

ROZDZIAŁ II

Podstawowe pojęcia i zasady fizyki kryształów

II.1 Skalary, wektory, tensory

Własności fizyczne kryształów zawsze określamy przez związki między mierzalnymi doświadczalnymi wielkościami. Na przykład gęstość kryształu ρ określana jest przez związek między masą m i objętością V kryształu w następujący sposób

$$m = \rho \cdot V . \quad (\text{II.1.1})$$

Zarówno masę, jak i objętość kryształu możemy zmierzyć nie biorąc pod uwagę orientacji kryształu w przestrzeni, ponieważ masa i objętość dowolnego ciała materialnego nie zależą od orientacji ciała w przestrzeni. Nie zależy od orientacji kryształu również temperatura T ciała w stanie równowagi termicznej. Definiując gęstość czy temperaturę kryształu nie ma sensu mówić o pomiarze tych wielkości w jakimś szczególnym kierunku. Takie “bezkierunkowe” wielkości fizyczne nazywamy **skalarami**. Wartość skalarną określa w zupełności pojedyncza liczba.

Oprócz skalarów, własności fizyczne kryształów określają również inne wielkości fizyczne zwane **wektorami**. Przykładem wektora, który definiuje własność fizyczną kryształów jest wektor współczynników piroelektrycznych \vec{p} . Piroelektrykami nazywamy dielektryki, które są spolaryzowane nawet w przypadku gdy na kryształ nie działa zewnętrzne pole elektryczne [7]. Zmiana temperatury kryształu powoduje zmianę wielkości i kierunku wektora polaryzacji \vec{P} , przy tym zmianę składowych wektora polaryzacji \vec{P} opisuje wzór [5-8]

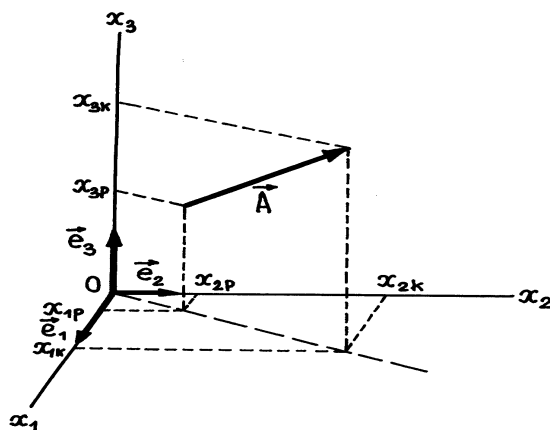
$$\Delta \vec{P} = \vec{p} \cdot \Delta T . \quad (\text{II.1.2})$$

Tu własność fizyczna - piroelektryczność, którą opisuje wektor \vec{p} , zdefiniowana jest, zgodnie z (II.1.2), jako związek między dwiema mierzalnymi wielkościami: temperaturą T (skalar) i polaryzacją \vec{P} (wektor).

Pojęcie wektora jest dobrze znane, nawet ze szkoły średniej. Żeby całkowicie określić wektor, musimy podać zarówno jego wielkość, jak i kierunek. Wektor wygodnie jest przedstawić przy pomocy strzałki o określonej długości i określonym kierunku (rys.II.1.1).

Dowolny wektor \vec{A} możemy również określić przez składowe wektora a_1, a_2, a_3 wzdłuż trzech wzajemnie prostopadłych osi współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3 (rys.II.1.1)

$$\vec{A} = (a_1, a_2, a_3) .$$



Rys.II.1.1. Określenie położenia wektora \vec{A} .

Wprowadzając jednostkowe wektory $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ wzdłuż osi Ox_1, Ox_2, Ox_3 i wybierając początek układu O (trzy jednostkowe wektory $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ + początek układu O nazywamy bazą układu współrzędnych) i korzystając z reguły dodawania wektorów, wektor \vec{A} możemy również zapisać w postaci

$$\vec{A} = a_1\vec{e}_1 + a_2\vec{e}_2 + a_3\vec{e}_3 . \quad (\text{II.1.3})$$

Tu $a_1 = x_{1k} - x_{1p}$, $a_2 = x_{2k} - x_{2p}$, $a_3 = x_{3k} - x_{3p}$; (x_{1k}, x_{2k}, x_{3k}) i (x_{1p}, x_{2p}, x_{3p}) są współrzędne wektorów wodzących odpowiednio punktu końcowego i punktu początkowego wektora A (rys.II.1.1). Wektorom wodzącym punktu nazywamy wektor początek którego pokrywa się z początkiem O układu współrzędnych. Z określenia pojęcia wektora wynika, że dla wszystkich wektorów, które mają taką samą wielkość, jak i kierunek, współrzędne a_i ($i = 1,2,3$) we wzorze (II.1.3) będą takie same.

Oprócz wielkości wektorowych, w fizyce kryształów występują jeszcze inne wielkości zwane **tensorami**. Rozważmy pojęcie tensora na przykładzie przewodnictwa elektrycznego. Przewodnictwo elektryczne, zdefiniowane jest jako związek między dwiema mierzalnymi wektorami: wektorem natężenia pola elektrycznego \vec{E} i wektorem gęstości prądu elektrycznego \vec{j} :

$$\vec{j} \leftrightarrow \vec{E} . \quad (\text{II.1.4})$$

Jeżeli przewodnik jest izotropowy i zachowuje się zgodnie z prawem Ohma, wektor \vec{j} jest równoległy do wektora \vec{E} i

$$\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E} . \quad (\text{II.1.5a})$$

albo dla składowych wektorów

$$j_i = \sigma E_i , \quad (\text{II.1.5b})$$

gdzie wielkość σ nosi nazwę **przewodnictwa elektrycznego**.

Więc, dla izotropowych ciał przewodnictwo jest wielkością skalarną. Natomiast jeżeli przewodnik jest kryształem, to z doświadczeń wynika, że wektor \vec{j} w ogólnym przypadku nie jest równoległy do wektora \vec{E} [2-4]. Znajdziemy związek między wektorami \vec{j} i \vec{E} , zakładając, że dla kryształu słuszne jest prawo Ohma, tj. zależność między \vec{j} i \vec{E} jest liniowa. Niech wektor \vec{E} skierowany jest wzdłuż osi Ox_1 , tj. $\vec{E} = [E_1, 0, 0]$. Wtedy dla składowych wektora \vec{j} możemy napisać

$$j_1 = \sigma_{11}E_1, \quad j_2 = \sigma_{21}E_1, \quad j_3 = \sigma_{31}E_1 . \quad (\text{II.1.6a})$$

Jeżeli wektor \vec{E} skierowany jest wzdłuż osi Ox_2 , tj. $\vec{E} = [0, E_2, 0]$, dla składowych wektora \vec{j} otrzymujemy

$$j_1 = \sigma_{12}E_2, \quad j_2 = \sigma_{22}E_2, \quad j_3 = \sigma_{32}E_2 . \quad (\text{II.1.6b})$$

W przypadku, gdy wektor \vec{E} skierowany jest wzdłuż osi Ox_3 , tj. $\vec{E} = [0, 0, E_3]$, dla składowych wektora \vec{j} mamy

$$j_1 = \sigma_{13}E_3, \quad j_2 = \sigma_{23}E_3, \quad j_3 = \sigma_{33}E_3 . \quad (\text{II.1.6c})$$

A więc, w przypadku gdy wektor \vec{E} skierowany jest w dowolny sposób, tj. $\vec{E} = [E_1, E_2, E_3]$, znajdziemy, że dla kryształów związek między wektorami \vec{E} i \vec{j} należy napisać w postaci

$$j_1 = \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3 , \quad (\text{II.1.7a})$$

$$j_2 = \sigma_{21}E_1 + \sigma_{22}E_2 + \sigma_{23}E_3 , \quad (\text{II.1.7b})$$

$$j_3 = \sigma_{31}E_1 + \sigma_{32}E_2 + \sigma_{33}E_3, \quad (\text{II.1.7c})$$

albo

$$j_i = \sum_{k=1,2,3} \sigma_{ik} E_k. \quad (\text{II.1.7d})$$

Ze wzorów (II.1.7) widać, że w celu określenia przewodnictwa kryształu musimy określić dziewięć współczynników σ_{ik} ($i, k = 1, 2, 3$). Możemy je dla wygody zapisać w postaci macierzy kwadratowej

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}. \quad (\text{II.1.8})$$

Współczynniki σ_{ik} tworzą składowe **tensora drugiego rzędu**. Więc, w odróżnieniu od ciał izotropowych, przewodnictwo elektryczne dla kryształu jest wielkością tensorową.

Dlatego, żeby zdefiniować pojęcie tensora rozpatrzmy najpierw transformację składowych dowolnego wektora \vec{b} przy przejściu od jednego układu kartezjańskiego Ox_1, Ox_2, Ox_3 do drugiego układu kartezjańskiego Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 , zakładając, iż układy mają ten sam początek. Niech $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ będą jednostkowymi wektorami wzdłuż osi Ox_1, Ox_2, Ox_3 , a $\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3$ są jednostkowymi wektorami wzdłuż osi Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 . Oznaczmy przez $\alpha_{i'k}$ iloczyn skalarny wektorów \vec{e}'_i i \vec{e}_k

$$\alpha_{i'k} \equiv \alpha_{ki'} = (\vec{e}'_i \cdot \vec{e}_k) = \cos \angle \vec{e}'_i \vec{e}_k, \quad (\text{II.1.9})$$

gdzie przez $\angle \vec{e}'_i \vec{e}_k$ oznaczyliśmy kąt między jednostkowym wektorem \vec{e}'_i „nowego” układu współrzędnych i jednostkowym wektorem \vec{e}_k „starego” układu współrzędnych. Składowe macierzy przekształcenia $\alpha_{i'k}$ są określone jednoznacznie przez wybrane bazy $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ i $\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3$.

Załóżmy teraz, że wektor \vec{b} ma składowe b_1, b_2, b_3 , względem osi Ox_1, Ox_2, Ox_3 i składowe b'_1, b'_2, b'_3 , względem osi Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 . Zgodnie z (II.1.3), wektor \vec{b} możemy zapisać w postaci

$$\vec{b} = b_1 \vec{e}_1 + b_2 \vec{e}_2 + b_3 \vec{e}_3, \quad (\text{II.1.10})$$

$$\vec{b} = b_1' \vec{e}_1' + b_2' \vec{e}_2' + b_3' \vec{e}_3' . \quad (\text{II.1.11})$$

Mnożąc (II.1.10) skalarne przez $\vec{e}_1', \vec{e}_2', \vec{e}_3'$ i uwzględniając (II.1.9), oraz że

$$b_1' = (\vec{e}_1' \cdot \vec{b}), \quad b_2' = (\vec{e}_2' \cdot \vec{b}), \quad b_3' = (\vec{e}_3' \cdot \vec{b}) , \quad (\text{II.1.12})$$

znajdujemy

$$b_1' = \alpha_{1'1} b_1 + \alpha_{1'2} b_2 + \alpha_{1'3} b_3 ,$$

$$b_2' = \alpha_{2'1} b_1 + \alpha_{2'2} b_2 + \alpha_{2'3} b_3 ,$$

$$b_3' = \alpha_{3'1} b_1 + \alpha_{3'2} b_2 + \alpha_{3'3} b_3 ,$$

co można zapisać również jako

$$b_i' = \sum_{k=1,2,3} \alpha_{i'k} b_k . \quad (\text{II.1.13a})$$

Powtarzając rozumowanie dla (II.1.11) otrzymujemy

$$b_i = \sum_{k=1,2,3} \alpha_{ik'} b_k' . \quad (\text{II.1.13b})$$

Łatwo wykazać, że dla macierzy przekształcenia $\alpha_{ik'}$ są słuszne związki

$$\alpha_{ik'} \alpha_{k'j} = \delta_{ij} , \quad \alpha_{ki'} \alpha_{j'k} = \delta_{i'j'} . \quad (\text{II.1.14})$$

Gdzie δ_{ij} i $\delta_{i'j'}$ są symbolami Kroneckera.

Rozpatrzmy dalej związek (II.1.7d) między wektorem gęstości prądu \vec{j} i wektorem natężenia pola elektrycznego \vec{E} dla kryształów. Zależność ta powinna być słuszną w dowolnym układzie współrzędnych, a więc w układzie współrzędnych Ox_i' ($i = 1,2,3$) możemy zapisać

$$j_i' = \sum_{k=1,2,3} \sigma_{ik'} E_k' . \quad (\text{II.1.15})$$

gdzie j_i' i E_k' ($i, k = 1,2,3$) są składowe wektorów \vec{j} i \vec{E} w układzie współrzędnych Ox_i' .

W celu znalezienia związków między σ_{ik} i $\sigma_{ik'}$ posłużmy się otrzymanymi wzorami (II.1.13) przekształcenia składowych wektora. Korzystając z (II.1.13a) możemy zapisać

$$j_i' = \sum_{m=1,2,3} \alpha_{i'm} j_m . \quad (\text{II.1.16})$$

Podstawiając (II.1.15) do (II.1.16) znajdujemy

$$j_i' = \sum_{m=1,2,3} \alpha_{i'm} \sum_{l=1,2,3} \sigma_{ml} E_l . \quad (\text{II.1.17})$$

Dalej, ze związku (II.1.13b) mamy

$$E_l = \sum_{k=1,2,3} \alpha_{k'l} E_k' . \quad (\text{II.1.18})$$

Podstawiając (II.1.18) do (II.1.17) otrzymujemy

$$j_i' = \sum_{k=1,2,3} \left(\sum_{m=1,2,3} \sum_{l=1,2,3} \alpha_{i'm} \alpha_{k'l} \sigma_{ml} \right) \cdot E_k' . \quad (\text{II.1.19})$$

Z porównania wzorów (II.1.15) i (II.1.19) wynika, że

$$\sigma_{ik}' = \sum_{m,l} \alpha_{i'm} \alpha_{k'l} \sigma_{ml} . \quad (\text{II.1.20})$$

Powtarzając rozumowanie dla transformacji odwrotnej znajdziemy

$$\sigma_{ik} = \sum_{m,l} \alpha_{m'i} \alpha_{l'k} \sigma_{ml}' . \quad (\text{II.1.21})$$

Prawa transformacji (II.1.20) i (II.1.21) stanowią podstawę definicji tensora drugiego rzędu.

Tensorom drugiego rzędu nazywamy $3^2 = 9$ liczb rzeczywistych T_{ik} ($i, k = 1, 2, 3$), które transformują się przy przejściu od jednego układu współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3 do drugiego Ox_1', Ox_2', Ox_3' zgodnie z równaniami

$$T_{ik}' = \sum_{m,l} \alpha_{i'm} \alpha_{k'l} T_{ml} , \quad (\text{II.1.22})$$

$$T_{ik} = \sum_{m,l} \alpha_{m'i} \alpha_{l'k} T_{ml}' . \quad (\text{II.1.23})$$

W fizyce kryształów często dla prostoty zapisu sum stosuje się konwencję sumowania Einsteina

$$b_i = \sum_{k=1,2,3} \alpha_{ik} c_k \equiv \alpha_{ik} c_k , \quad (\text{II.1.24a})$$

$$b_{ik} = \sum_{m,l} \alpha_{mi} \alpha_{lk} c_{ml} \equiv \alpha_{mi} \alpha_{lk} c_{ml} , \quad (\text{II.1.24b})$$

czyli opuszcza się znak sumowania, jeżeli wskaźnik literowy powtarza się dwa razy w tym samym wyrażeniu.

Zgodnie z konwencją Einsteina, wzory (II.1.22) i (II.1.23) możemy zapisać w postaci

$$T'_{ik} = \alpha_{i'm} \alpha_{k'l} T_{ml} , \quad (\text{II.1.25a})$$

$$T_{ik} = \alpha_{m'i} \alpha_{l'k} T'_{ml} . \quad (\text{II.1.25b})$$

W ogólnym przypadku mówimy, że dany jest **tensor** T n -go rzędu jeżeli z każdą bazą współrzędnych kartezjańskich $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ jest związany zbiór 3^{2n} liczb rzeczywistych $T_{k_1 k_2 \dots k_n}$ ($k_1, k_2, \dots, k_n = 1, 2, 3$) zwanych składowymi tensora w bazie $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ i jeżeli te liczby $T_{k_1 k_2 \dots k_n}$ są związane z liczbami $T'_{k_1 k_2 \dots k_n}$ (składowymi tensora T w bazie współrzędnych kartezjańskich $\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3$) równaniami:

$$T'_{k_1 k_2 \dots k_n} = \alpha_{k'_1 k_1} \alpha_{k'_2 k_2} \dots \alpha_{k'_n k_n} T_{k_1 k_2 \dots k_n} , \quad (\text{II.1.26a})$$

$$T_{k_1 k_2 \dots k_n} = \alpha_{k'_1 k_1} \alpha_{k'_2 k_2} \dots \alpha_{k'_n k_n} T'_{k_1 k_2 \dots k_n} . \quad (\text{II.1.26b})$$

Z definicji tensora n -go rzędu wynika, że jeżeli $n = 0$, to tensor zerowego rzędu zawiera tylko jedną składową ($3^0 = 1$) i zgodnie z (II.1.26)

$$T' = T . \quad (\text{II.1.27})$$

Więc tensor zerowego rzędu jest po prostu skalarem.

Jeżeli $n = 1$ to mamy tensor pierwszego rzędu, dla którego składowych ze wzorów (II.1.26) otrzymujemy

$$T'_k = \alpha_{k'l} T_l , \quad T_k = \alpha_{k'l} T'_l . \quad (\text{II.1.28})$$

Z porównania (II.1.28) i (II.1.13) widzimy, że tensor pierwszego rzędu jest wektorem.

Oprócz tensorów, w fizyce występują wielkości podobne do nich, ale nie spełniające równań (II.1.26). Takie wielkości nazywamy **pseudotensorami**. Przykładami pseudotensorów pierwszego rzędu, czyli **pseudowektorów** (albo wektorów **osiowych**) w fizyce są: indukcja pola magnetycznego \vec{B} , namagnesowanie \vec{M} , moment pędu \vec{J} , spin \vec{S} . Zwykle wektory, które transformują się zgodnie z równaniami (II.1.13), nazywamy **polarnymi** albo **biegunowymi**.

Pojęcie pseudowektora łatwo zrozumieć rozpatrując transformację składowych iloczynu wektorowego $\vec{c} = [\vec{a} \times \vec{b}]$ dwóch polarnych wektorów \vec{a} i \vec{b} . Z określenia iloczynu wektorowego wynika, że wektor $\vec{c} = [\vec{a} \times \vec{b}]$ ma składowe

$$c_1 = [\vec{a} \times \vec{b}]_1 = a_2 b_3 - a_3 b_2, \quad (\text{II.1.29a})$$

$$c_2 = [\vec{a} \times \vec{b}]_2 = a_3 b_1 - a_1 b_3, \quad (\text{II.1.29b})$$

$$c_3 = [\vec{a} \times \vec{b}]_3 = a_1 b_2 - a_2 b_1. \quad (\text{II.1.29c})$$

gdzie a_1, a_2, a_3 są składowe wektora \vec{a} , a b_1, b_2, b_3 są składowe wektora \vec{b} wzdłuż osi Ox_1, Ox_2, Ox_3 .

Składowe wektorów \vec{a} i \vec{b} spełniają równanie (II.1.13b), a zatem

$$a_i = \alpha_{k'i} a'_k, \quad b_i = \alpha_{k'i} b'_k. \quad (\text{II.1.30})$$

Po podstawieniu (II.1.30) do (II.1.29a) otrzymujemy

$$c_1 = c'_1 (\alpha_{2'2} \alpha_{3'3} - \alpha_{2'3} \alpha_{3'2}) + c'_2 (\alpha_{3'2} \alpha_{1'3} - \alpha_{3'3} \alpha_{1'2}) + c'_3 (\alpha_{1'2} \alpha_{2'3} - \alpha_{1'3} \alpha_{2'2}), \quad (\text{II.1.31})$$

gdzie

$$c'_1 = [\vec{a} \times \vec{b}]_{1'} = a'_2 b'_3 - a'_3 b'_2, \quad (\text{II.1.32a})$$

$$c'_2 = [\vec{a} \times \vec{b}]_{2'} = a'_3 b'_1 - a'_1 b'_3, \quad (\text{II.1.32b})$$

$$c'_3 = [\vec{a} \times \vec{b}]_{3'} = a'_1 b'_2 - a'_2 b'_1. \quad (\text{II.1.32c})$$

Liczby w nawiasach są minorami macierzy $(\alpha_{k'i})$ proporcjonalnymi do odpowiednich elementów macierzy odwrotnej $(\alpha_{k'i'})$

$$(\alpha_{2'2} \alpha_{3'3} - \alpha_{2'3} \alpha_{3'2}) = \det(\alpha_{k'i}) \cdot \alpha_{11'}, \quad (\text{II.1.33a})$$

$$(\alpha_{3'2} \alpha_{1'3} - \alpha_{3'3} \alpha_{1'2}) = \det(\alpha_{k'i}) \cdot \alpha_{12'}, \quad (\text{II.1.33b})$$

$$(\alpha_{1'2} \alpha_{2'3} - \alpha_{1'3} \alpha_{2'2}) = \det(\alpha_{k'i}) \cdot \alpha_{31'}, \quad (\text{II.1.33c})$$

gdzie $\det(\alpha_{k'i})$ jest wyznacznikiem macierzy $(\alpha_{k'i})$.

Zatem

$$c_1 = \det(\alpha_{k'i}) \cdot (\alpha_{11'} c_1' + \alpha_{12'} c_2' + \alpha_{13'} c_3'). \quad (\text{II.1.34})$$

Powtarzając to samo rozumowanie dla c_2 i c_3 znajdujemy, że

$$c_i = \det(\alpha_{k'i}) \cdot \alpha_{ik'} c_k'. \quad (\text{II.1.35})$$

Z porównania (II.1.35) i (II.1.13b) wynika, że różnice między nimi stanowi czynnik $\det(\alpha_{k'i})$, który jest równy +1 dla przekształceń symetrii pierwszego rodzaju i równy -1 dla przekształceń symetrii drugiego rodzaju (o przekształceniach symetrii pierwszego i drugiego rodzaju patrz w Rozdziale I). Mówi się, że trzy liczby c_i' stanowią składowe pseudowektora.

Do pojęcia **pseudoskalara** dochodzimy rozpatrując transformację iloczynu skalarnego $A = (\vec{b} \cdot \vec{c})$ dwóch wektorów: zwykłego \vec{b} wektora i pseudowektora \vec{c} . Z określenia iloczynu skalarnego i uwzględnieniu wzorów (II.1.13b) i (II.1.35) możemy zapisać

$$\begin{aligned} A = b_i c_i &= \det(\alpha_{k'i}) \cdot \alpha_{il'} \alpha_{k'i} \cdot b_l' c_k' \equiv \\ &\det(\alpha_{k'i}) \cdot b_k' c_k' = \det(\alpha_{k'i}) \cdot A' \end{aligned} \quad (\text{II.1.36})$$

Tu uwzględniliśmy właściwości (II.1.14) macierzy przekształcenia $\alpha_{ik'}$.

Z porównania (II.1.36) ze wzorem (II.1.27) wynika, że w przypadku pseudoskalara wielkość skalarna może zmienić swój znak w przypadku jeżeli dwa układy współrzędnych powiązane między sobą przekształceniami symetrii drugiego rodzaju. Przykładem pseudoskalara w fizyce jest prawdopodobnie ładunek elektryczny.

W zagadnieniach fizyki kryształów zwykle układy kartezjańskie Ox_1, Ox_2, Ox_3 i Ox_1', Ox_2', Ox_3' są układami związanymi między sobą przekształceniami symetrii kryształu. Udowodnimy twierdzenie które będziemy często dalej stosowali przy analizowaniu wpływu symetrii kryształu na jego własności fizyczne. Twierdzenie to brzmi: iloczyn $(x_{k_1} x_{k_2} \cdots x_{k_n})$ (gdzie $k_1, k_2, \dots, k_n = 1, 2, 3$ i x_1, x_2, x_3 są współrzędnymi wektora wodzącego dowolnego punktu w przestrzeni) transformuje się przy przejściu od jednego układu współrzędnych (Ox_1, Ox_2, Ox_3) do drugiego układu współrzędnych (Ox_1', Ox_2', Ox_3') tak jak składowa tensora n -go rzędu $T_{k_1 k_2 \dots k_n}$. Udowodnimy to twierdzenie na przykładzie iloczynu $(x_i x_k)$ ($i, k = 1, 2, 3$).

Niech w układzie Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 wektor położenia dowolnego punktu \vec{r} ma składowe x'_i .
Zgodnie z (II.1.13a)

$$x'_i = \alpha_{i'm} x_m . \quad (\text{II.1.37})$$

Korzystając z (II.1.37) otrzymujemy

$$x'_i x'_k = \alpha_{i'm} \alpha_{k'l} x_m x_l . \quad (\text{II.1.38})$$

Z porównania wzorów (II.1.38) i (II.1.25a) widzimy, że iloczyn $(x_m x_l)$ transformuje się tak samo jak składowa T_{ml} tensora drugiego rzędu. Udowodnienie twierdzenia dla dowolnego iloczynu $(x_{k_1} x_{k_2} \cdots x_{k_n})$ jest oczywiste.

Zadania do § II.1.2

1. Udowodnić wzór (II.1.13b).
2. Jeżeli \vec{a} i \vec{b} są wektorami, to stosunki (a_1/b_1) , (a_2/b_2) , (a_3/b_3) są trzema liczbami, wartości których są określone dla dowolnego układu współrzędnych. Czy są te trzy liczby składowymi wektora?
3. Udowodnić wzór (II.1.35).
4. Baza współrzędnych $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ jest związana z bazą współrzędnych $\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3$ związkami:

$$\text{a) } \vec{e}_1 = -\vec{e}'_1, \vec{e}_2 = -\vec{e}'_2, \vec{e}_3 = -\vec{e}'_3, \quad \text{b) } \vec{e}_1 = \vec{e}'_1, \vec{e}_2 = -\vec{e}'_2, \vec{e}_3 = \vec{e}'_3,$$

$$\text{c) } \vec{e}_1 = -\vec{e}'_2, \vec{e}_2 = -\vec{e}'_1, \vec{e}_3 = \vec{e}'_3, \quad \text{d) } \vec{e}_1 = -\vec{e}'_2, \vec{e}_2 = \vec{e}'_1, \vec{e}_3 = \vec{e}'_3 .$$

Wykazać, że w przypadkach (a) i (b) $\det(\alpha_{ik'}) = -1$, a w przypadkach (c) i (d) $\det(\alpha_{ik'}) = +1$.

5. Określić elementy symetrii które transformują bazę współrzędnych $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ w bazę współrzędnych $\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3$ w zadaniu 4. Zapisać macierzy symetrii dla poszczególnych elementów symetrii.
6. Udowodnić wzór (II.1.27).
7. Wykazać, że wektor indukcji pola magnetycznego \vec{B} i wektor momentu pędu \vec{L} są wektorami osiowymi.
8. Wykazać, że iloczyn skalarny dwóch pseudowektorów jest skalarem, a nie pseudoskalarem.
9. Związek między wektorem indukcji pola magnetycznego \vec{B} a wektorem natężenia pola magnetycznego \vec{H} dla kryształów ma postać

$$B_i = \mu_0 \mu_{ik} H_k ,$$

gdzie μ_0 - przenikalność magnetyczna próżni, a μ_{ik} - macierz współczynników przenikalności magnetycznej kryształu. Wektory \vec{B} i \vec{H} są pseudowektorami. Wykazać, że wielkości μ_{ik} są składowymi tensora drugiego rzędu.

II.2 Zasada Curie. Symetria pól fizycznych

O związkach między symetrią przyczyn a symetrią skutków które występują w przyrodzie, po raz pierwszy wypowiedział się w 1894 roku Piotr Curie: “Gdy kilka różnych zjawisk natury nakłada się nawzajem, tworząc jeden układ, ich dyssymetrie sumują się. W rezultacie pozostają tylko te elementy symetrii, które są wspólne dla każdego zjawiska wziętego oddzielnie” [11,12]. Stwierdzenie to nosi nazwę **zasady Curie**. W stosunku do kryształów zasadę Curie możemy sformułować następująco [5,6]: pod wpływem zewnętrznego wymuszenia (temperatury, naprężeń mechanicznych, pól elektromagnetycznych, grawitacyjnych) w kryształach pozostają tylko wspólne dla kryształu i wymuszenia elementy symetrii. Elementy symetrii nazywamy wspólnymi jeżeli ich geometryczne symbole i orientacje w przestrzeni są takie same.

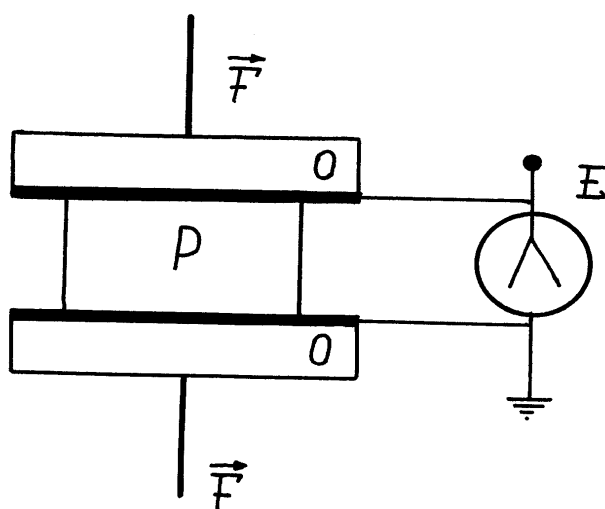
Oznaczając przez G_p grupę punktową kryształu, przez G_w - grupę symetrii zewnętrznego wymuszenia i używając symbolu \cap oznaczającego przekrój (iloczyn) grup G_p i G_w , zasadę Curie można zapisać w formie relacji

$$G_p \cap G_w . \quad (\text{II.2.1})$$

Korzystanie z zasady Curie pozwala otrzymać szereg interesujących wniosków o możliwości istnienia w kryształach różnych zjawisk fizycznych nie rozważając mikroskopowej natury zjawisk.

Przykład II.2.1. W pewnych kryształach pod wpływem naprężeń mechanicznych powstaje polaryzacja elektryczna, co przejawia się wystąpieniem na przeciwległych powierzchniach kryształu ładunków elektrycznych. Zjawisko to odkryli bracia Jakub i Piotr Curie w 1880 roku i nazwali efektem piezoelektrycznym. Z kryształu kwarcu (SiO_2 , grupa punkтова 32) została wycięta płytka. Płytkę (P) zaopatrzoną w okładki metalowe została ściśnięta za pomocą izolujących okładek (O). Przy ściśnięciu płytki, wykazującej efekt piezoelektryczny, na powierzchniach płytki połączonych z okładkami metalowymi występują ładunki przeciwnych

znaków które rejestruje elektrometr (E) (rys.II.2.1). Stosując zasadę Curie udowodnimy, że płytka z kwarcu wykazuje właściwości piezoelektryczne tylko wtedy, gdy jest wycięta prostopadle do osi symetrii kwarcu 2 - krotnej. Natomiast płytka kwarcowa wycięta prostopadle do osi symetrii 3 - krotnej nie wykazuje efektu piezoelektrycznego.



Rys.II.2.1. Schemat pomiaru efektu piezoelektrycznego

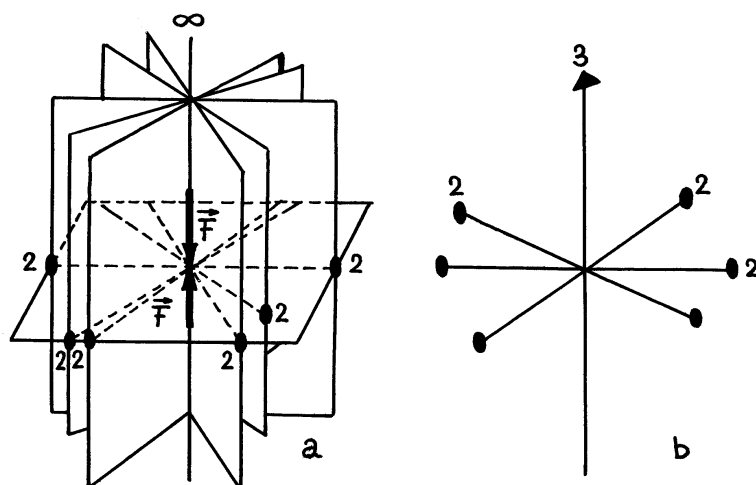
Aby móc zastosować zasadę Curie musimy najpierw określić grupę symetrii zewnętrznego wymuszenia. Jako wymuszenie zewnętrzne występuje tu para sił: jedna siła działa na okładkę dolną, druga - na okładkę górną (rys.II.2.1). Łatwo zauważyć, że ta para sił pozostaje niezmiennicza względem obrotu o dowolny kąt dookoła prostej wzdłuż której przyłożona para sił. Oś ta jest osią nieskończenie krotną, a zatem ma symbol ∞ (rys.II.2.2a). Podkreślimy, że oś ∞ - krotna zawiera osie dowolnej krotności ($n = 1, 2, \dots$). Para sił, ściskająca płytkę wykazuje również symetrię względem płaszczyzny w której leży oś ∞ - krotna (rys.II.2.2a). Obecność osi ∞ - krotnej powoduje, że takich płaszczyzn symetrii jest nieskończenie wiele.

Siła naprężenia mechanicznego jest wektorem biegunowym (polarnym), a więc para sił wykazuje symetrię względem płaszczyzny prostopadłej do osi ∞ - krotnej i przechodzącej przez środek płytki (rys.II.2.2a). Stosując reguły zapisu symbolu grupy punktowej (patrz Rozdział I), grupę symetrii ściśnięcia płytki wzdłuż jednego kierunku możemy zapisać w postaci ∞ / mmm . Można sprawdzić, że tę samą symetrię ma walec.

Grupa punktowa kwarcu 32 zawiera jedną oś 3 - krotną i trzy osie 2 - krotne leżące w płaszczyźnie prostopadłej do osi 3 (rys.II.2.2b). Jeżeli naprężenie mechaniczne (para sił) przyłożono wzdłuż osi 3 - krotnej, to wspólnymi elementami symetrii wymuszenia zewnętrznego i kryształu są wszystkie elementy symetrii grupy punktowej kwarcu. Rzeczywiście, w tym przypadku oś 3 kryształu pokrywa się z osią ∞ - krotną wymuszenia, która zawiera również oś 3 - krotną. Trzy osie 2-krotne kryształu również są w grupie ∞ / mmm , ponieważ oś przecięcia dwóch płaszczyzn symetrii jest osią 2 - krotną (patrz Rozdział I). W grupie ∞ / mmm osie 2 - krotne leżą w płaszczyźnie prostopadłej do osi 3 - krotnej. Zatem dla płytki z kwarcu ściśniętej wzdłuż osi 3 relacja (II.2.1) przyjmuje postać

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

Oznacza to, że naprężenie mechaniczne przyłożone wzdłuż osi 3 nie zmienia symetrii kryształu kwarcu. Rozważmy teraz czy w tym przypadku może powstać polaryzacja płytki z kwarcu?



Rys. II.2.2. a) Elementy symetrii ściśnięcia płytki wzdłuż osi.

b) Elementy symetrii grupy punktowej kwarcu.

Przypuśćmy, że polaryzacja płytki następuje. Obecność w kryształach kwarcu osi 3 - krotnej powoduje, że wektor polaryzacji \vec{P} może być skierowany tylko wzdłuż osi 3. Natomiast, obecność osi 2 - krotnej prostopadłej do osi 3 pociąga za sobą istnienie w kryształach wektora $(-\vec{P})$. Istnienie w tym samym kryształach dwóch wektorów polaryzacji skierowanych w przeciwne strony może mieć miejsce tylko w jednym przypadku, gdy $|\vec{P}| = 0$. Otrzymaliśmy

więc, że płytka kwarcowa ściśnięta wzdłuż osi symetrii 3 - krotnej nie wykazuje efektu piezoelektrycznego.

Przy ściśnięciu płytki kwarcowej wzdłuż osi 2 - krotnej ze wspólnych elementów symetrii kryształu i wymuszenia zewnętrznego będzie tylko oś 2 - krotna. Symetria kryształu obniża się więc do jednoskośnej 2 i właśnie tylko w kierunku tej osi 2 - krotnej może być skierowany wektor polaryzacji \vec{P} .

Przykład II.2.2. Płytkę z kryształu chlorku sodu ($NaCl$, grupa punktowa - $m\bar{3}m$) została umieszczona w płaskim kondensatorze elektrycznym. Pole elektryczne wywołuje deformację płytki (efekt odwrotny do efektu piezoelektrycznego). Określmy symetrię kryształu w przypadku gdy płytka jest wycięta prostopadle do kierunku krystalograficznego: a) $[001]$, b) $[111]$, c) $[110]$, d) $[hk0]$.

Zewnętrznym wymuszeniem tu jest jednorodne pole elektryczne \vec{E} . Znajdziemy grupę symetrii wektora polarnego \vec{E} . Każdy wektor polarny jest niezmienniczy: 1) względem osi symetrii biegunowej (polarnej) dowolnej krotności stanowiącej jego własny kierunek (oś ∞ - krotna); 2) względem każdej płaszczyzny symetrii leżącej na osi ∞ . Stosując reguły zapisu symbolu grupy punktowej (patrz Uzupełnienie), grupę symetrii jednorodnego pola elektrycznego możemy zapisać w postaci ∞m . Łatwo sprawdzić, że tę samą symetrię ma stożek. Dla określenia symetrii kryształu w polu elektrycznym zastosujemy zasadę Curie.

a) W przypadku gdy wektor pola elektrycznego ma w kryształach chlorku sodu kierunek $[001]$, tj. wektor \vec{E} jest równoległy do osi 4 - krotnej, wspólnymi elementami symetrii pola i kryształu są: oś 4 i cztery płaszczyzny symetrii zawierające oś 4. Symetria kryształu obniża się więc do tetragonalnej $4mm$.

b) Jeżeli wektor \vec{E} jest skierowany wzdłuż osi 3 - krotnej (kierunek $[111]$), symetria kryształu obniża się do $3m$ (układ trygonalny).

c) Przy orientacji wektora pola elektrycznego wzdłuż osi 2 - krotnej (kierunek $[110]$), w kryształach pozostają: oś 2 - krotna i dwie płaszczyzny symetrii leżące na osi 2. Symetria kryształu jest $mm2$ (układ rombowy).

d) Jeżeli wektor \vec{E} leży w płaszczyźnie prostopadłej do osi 4 - krotnej i ma dowolny kierunek $[hk0]$, wspólnym elementem symetrii pola i kryształu będzie tylko płaszczyzna symetrii w której leży wektor \vec{E} . Symetria kryształu obniża się więc do klasy m (układ jednoskośny).

Zadania do § II.2

1. Z kryształu soli Siegnette'a (winian sodowo-potasowy - $KNaC_4H_4O_6 \cdot 4H_2O$, grupa punktowa - 222) wycięta płytką prostopadle do osi dwukrotnej. Wykazać, że płytką ściśnięta wzdłuż jednej z osi 2 (wzdłuż Ox , Oy lub Oz) nie wykazuje efektu piezoelektrycznego.

2. Kryształ fluorytu (CaF_2 , grupa punktowa - $m\bar{3}m$) został rozciągnięty wzdłuż kierunków: a) [001]; b) [111]; c) [110]; d) $[hk0]$. Określić symetrię rozciągniętych kryształów.

Odpowiedź: a) $4/m\bar{3}m$; b) $3m$; c) mmm ; d) $2/m$.

3. Kryształ dwuwodorofosforanu potasu (KDP) (KH_2PO_4 , grupa punktowa - $\bar{4}2m$) jest umieszczony w polu elektrycznym płaskiego kondensatora. Określić symetrię kryształu w przypadku gdy pole elektryczne \vec{E} jest skierowane wzdłuż kierunków: a) [001]; b) [110]; c) [010].

Odpowiedź: a) $mm2$; b) 2 ; c) m .

4. Wykazać, że symetria równomiernego ściskania ciała ze wszystkich stron (hydrostatyczne ciśnienie) pokrywa się z symetrią kuli i wynosi $\infty \infty m$.

5. Do których klas symetrii musi należeć kryształ, by przy hydrostatycznym ściskaniu kryształu mógł się pojawić efekt piezoelektryczny?

Odpowiedź: 10 polarnych klas - $1, 2, 3, 4, 6, m, mm2, 4mm, 6mm, 3m$.

6. Wykazać, że symetria jednorodnego pola magnetycznego pokrywa się z symetrią walca wirującego dookoła osi i wynosi ∞ / m .

7. Kryształ symetrii $\bar{3}m$ jest umieszczony w jednorodnym polu magnetycznym. Określić symetrię kryształu w przypadku, gdy pole magnetyczne jest skierowane wzdłuż osi krystalograficznej: a) Ox ; b) Oy ; c) Oz , d) Ox .

Odpowiedź: a), b), c) - $2/m$; d) $\bar{3}$.

8. Symbol punktowej grupy kryształu zawiera oś inwersyjną 6 - krotną. Wyznaczyć symetrię tego kryształu w jednorodnym polu magnetycznym w przypadku gdy wektor indukcji pola jest skierowany wzdłuż osi krystalograficznej: a) Ox ; b) Oy ; c) Oz , d) Ox .

Odpowiedź: a), b), c) $\bar{1}$; d) $\bar{6}$.

II.3 Symetria własności fizycznych. Zasada Neumanna

W paragrafie II.1 anizotropowe własności fizyczne kryształu określiliśmy przez związki między mierzalnymi wielkościami związanymi z kryształem. Określone w taki sposób własności fizyczne są wielkościami tensorowymi, przy czym rząd tensora własności fizycznej

zależy od tego, jakie mierzalne wielkości fizyczne łączy ten tensor. Przykłady niektórych tensorów opisujących właściwości fizyczne kryształów podano w tabelicy II.3.1.

Tabela II.3.1. Przykłady tensorów opisujących właściwości fizyczne kryształów

Nazwa właściwości fizycznej	Równanie określające własność fizyczną
<i>A. Tensory pierwszego rzędu łączące skalar i wektor</i>	
Piroelektryczność	$\Delta P_i = p_i \Delta T$
Efekt elektrokaloryczny	$\Delta T = q_i \Delta E_i$
<i>B. Tensory drugiego rzędu łączące dwa wektory</i>	
Przenikalność dielektryczna	$D_i = \epsilon_{0ij} E_j$
Dielektryczna nieprzenikalność	$E_i = \eta_{0ij} D_j$
Podatność dielektryczna	$P_i = \epsilon_{0ij} E_j$
Przenikalność magnetyczna	$B_i = \mu_{0ij} H_j$
Podatność magnetyczna	$J_i = \mu_{0ij} H_j$
Przewodnictwo elektryczne	$j_i = \sigma_{ij} E_j$
Opór elektryczny	$E_i = \rho_{ik} j_k$
<i>C. Tensory drugiego rzędu łączące skalar z tensorem drugiego rzędu</i>	
Rozszerzalność cieplna	$r_{ij} = \alpha_{ij} \Delta T$
<i>D. Tensory trzeciego rzędu łączące wektor z tensorem drugiego rzędu</i>	
Efekt piezoelektryczny prosty	$P_i = d_{ijk} t_{jk}$
Efekt piezoelektryczny odwrotny	$r_{jk} = d_{ijk} E_i$
Efekt piezoelektryczny	$P_i = e_{ijk} r_{jk}$
Efekt piezoelektryczny odwrotny	$t_{jk} = -e_{ijk} E_i$
Efekt elektrooptyczny	$\Delta \eta_{ij} = r_{ijk} E_k$
<i>E. Tensory czwartego rzędu łączące dwa tensory drugiego rzędu</i>	
Współczynniki sprężystości	$r_{ij} = s_{ijkl} t_{kl}$
Współczynniki sztywności	$t_{ij} = c_{ijkl} r_{kl}$
Współczynniki elastoptyczne	$\Delta \eta_{ij} = p_{ijkl} r_{kl}$
Współczynniki piezoptyczne	$\Delta \eta_{ij} = \pi_{ijkl} t_{kl}$
Elektrostrykcja	$r_{jk} = \gamma_{ijkl} E_i E_l$

Oprócz wymienionych w tej tabelicy właściwości istnieje jeszcze szereg własności anizotropowych kryształów które nie występują w postaci tensorowej. Przykładami takich własności kryształów są twardość, łupliwość, plastyczność kryształów, różnego rodzaju anizotropowe własności powierzchniowe kryształów: tarcie, szybkość wzrostu i rozpuszczania

się kryształów; prędkość matowienia i figury trawienia powierzchni kryształów itp. [5,6]. W niniejszym skrypcie będziemy rozpatrywali tylko tensorowe właściwości fizyczne.

Jak wynika z określenia tensora (patrz wzór (II.1.26)) wartości liczbowe składowych tensora zależą od wybranego układu współrzędnych i przy przejściu od jednego układu współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3 do innego Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 składowe tensora zmieniają się. Obecność elementów symetrii w kryształach powoduje, że postać tensora właściwości fizycznej (wartości liczbowe składowych tensora) powinna być niezmiennicza względem przekształceń symetrii kryształu. Oznacza to, że w różnych układach współrzędnych, związanych między sobą przekształceniami symetrii punktowej grupy kryształu, tensor właściwości fizycznej musi mieć tę samą postać. Związek między symetrią kryształu a symetrią właściwości fizycznych kryształów stanowi zasadniczy postulat fizyki kryształów, znany jako **zasada Neumanna** [5,6,7,8,11]: elementy symetrii własności fizycznej kryształu muszą zawierać elementy symetrii grupy punktowej kryształu.

Oznaczając przez G_p grupę punktową kryształu, a przez G_f - symetrię własności fizycznej i używając symbolu \subset oznaczającego zawieranie (inkluzję) zasadę Neumanna możemy zapisać w postaci relacji:

$$G_p \subset G_f . \quad (\text{II.3.1})$$

Warto podkreślić, że z zasady Neumanna nie wynika, że elementy symetrii własności fizycznej są takie same jak elementy symetrii grupy punktowej kryształu. Własność fizyczna często wykazuje symetrię względem dodatkowych elementów symetrii i ma symetrię wyższą niż grupa punktowa kryształu. Jednak zgodnie z zasadą Neumanna symetria własności fizycznej powinna zawierać geometryczne symbole i ich orientacje w przestrzeni wszystkich elementów symetrii grupy punktowej kryształu.

Przykład II.3.1. Do własności fizycznych wyrażonych za pomocą wektorów (tensorów pierwszego rzędu) należą: efekt piroelektryczny; efekt zmiany temperatury kryształu na skutek zmiany natężenia pola elektrycznego (efekt elektrokaloryczny); polaryzacja kryształu pod wpływem ciśnienia hydrostatycznego (efekt piezoelektryczny) itp. Stosując zasadę Neumanna udowodnimy, że własności wektorowe mogą powstać tylko w kryształach klas polarnych: 1, 2, 3, 4, 6, m , $mm2$, $3m$, $4mm$, $6mm$.

Grupa punktowa symetrii wektora polarnego jest ∞m (patrz przykład II.2.2) i zawiera oś dowolnej krotności (∞) stanowiącej własny kierunek wektora i nieskończoną liczbę

płaszczyzn symetrii leżących na tej osi. Zastosujemy zasadę Neumanna dla poszczególnych klas symetrii układów krystalograficznych.

a) *Układ trójskośny*. Klasa 1 nie wykazuje zupełnie elementów symetrii, a więc nie nakłada żadnych ograniczeń na możliwość istnienia własności fizycznej wektorowej w kryształach tej klasy. Kierunek wektora polarnego może być dowolnym. W kryształach klasy $\bar{1}$ istnieje środek symetrii którego nie ma w grupie punktowej ∞m symetrii wektora polarnego. Zatem, zgodnie z (II.3.1) w kryształach zawierających środek symetrii nie mogą powstać właściwości fizyczne, które charakteryzują wektory polarne.

b) *Układ jednoskośny*. W kryształach układu jednoskośnego własności wektorowe mogą mieć tylko kryształy klasy 2 i m (klasa $2/m$ zawiera środek symetrii). Dla kryształów klasy 2 wektor własności fizycznej, zgodnie z (II.3.1) musi być skierowany tylko wzdłuż osi 2. Dla kryształów klasy m relacja (II.3.1) wymaga, żeby wektor osiowy znajdował się w płaszczyźnie symetrii. Kierunek wektora w tej płaszczyźnie może być dowolny.

c) *Układ rombowy*. W tym przypadku środka symetrii nie zawierają dwie klasy: $mm2$ i 222 . Jednak klasa 222 ma trzy wzajemnie prostopadłe osi 2 - krotne i nie jest zgodna z symetrią punktową wektora polarnego. Zatem dla kryształów układu rombowego tylko kryształy klasy $mm2$ mogą mieć właściwości wektorowe. Wektor polarny powinien być skierowany wzdłuż osi 2 - krotnej.

d) *Układ tetragonalny*. Spośród klas układu tetragonalnego tylko klasy 4 i $4mm$ (patrz tablice I.4.1 Rozdziału I) zawierają polarny kierunek, tj. kierunek który nie zmienia swojego zwrotu przekształceniami symetrii kryształu. Łatwo zauważyć, że kierunek polarny pokrywa się z osią 4 - krotną. W pozostałych klasach jest środek symetrii, albo osie 2 - krotne prostopadłe do osi 4. Właściwości wektorowe mogą więc posiadać tylko kryształy klas 4 i $4mm$ układu tetragonalnego i wektor własności fizycznej musi być skierowany wzdłuż osi 4 - krotnej.

e) *Układ regularny*. W kryształach układu regularnego, obecność czterech osi 3 - krotnych powoduje, że w kryształach nie istnieje kierunek polarny, a zatem kryształy układu regularnego nie mogą mieć właściwości fizycznych, które opisują tensory pierwszego rzędu.

f) *Układy heksagonalny i trygonalny*. Dla układów heksagonalnego i trygonalnego tylko w kryształach klas 6, $6mm$, 3 i $3m$ istnieją kierunki polarne, a więc tylko kryształy tych klas wykazują właściwości wektorowe. Wektor własności fizycznej w tym przypadku ma kierunek wzdłuż osi 3 albo 6.

Reasumując możemy powiedzieć, że tylko kryształy należące do wymienionych dziesięciu klas polarnych mogą mieć właściwości fizyczne, które opisują tensory pierwszego rzędu (wektory).

Przykład II.3.2. Przykładami tensorów drugiego rzędu opisujących właściwości fizyczne kryształów są: przenikalność i podatność dielektryczna; przenikalność i podatność magnetyczna; przewodnictwo i opór elektryczny; rozszerzalność cieplna; efekt zmiany temperatury wskutek ściśnięcia kryształu (efekt piezokaloryczny) itp. Można wykazać, że tensory te są tensorami symetrycznymi $S_{ij} = S_{ji}$ [5-8]. Stosując zasadę Neumanna rozważmy wpływ symetrii kryształu na postać własności fizycznej opisywanej tensorem drugiego rzędu S_{ij} .

Zastosujemy metodę znaną jako metodę bezpośredniego sprawdzania (metoda Fumi [5-8]), która polega na udowodnionym na końcu § II.1 twierdzeniu, że składowe tensora transformują się przy przejściu od jednego układu współrzędnych do drugiego jak odpowiednie iloczyny współrzędnych dowolnego punktu (patrz wzór (II.1.38)).

a) *Układ trójskośny.* Symetria klasy 1 nie nakłada żadnych ograniczeń na składowe tensora drugiego rzędu, a zatem tensor S_{ij} może mieć 9 niezerowych składowych. W kryształach klasy $\bar{1}$ obecność środka symetrii powoduje, że z każdym układem współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3 jest związany równoważny układ współrzędnych Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 osie którego otrzymujemy przekształcając osie Ox_1, Ox_2, Ox_3 względem środka symetrii (początku układu współrzędnych). To przekształcenie osi współrzędnych transformuje współrzędne dowolnego punktu (x_1, x_2, x_3) w sposób następujący

$$x_1 \rightarrow x'_1 = -x_1, \quad x_2 \rightarrow x'_2 = -x_2, \quad x_3 \rightarrow x'_3 = -x_3, \quad (\text{II.3.2})$$

gdzie symbol \rightarrow oznacza “transformuje się w”.

Zgodnie z (II.1.38) odpowiednie iloczyny $x_i x_j$ transformują się następująco

$$\begin{aligned} x_1 x_1 &\rightarrow x'_1 x'_1 = x_1 x_1; & x_2 x_2 &\rightarrow x'_2 x'_2 = x_2 x_2; & x_3 x_3 &\rightarrow x'_3 x'_3 = x_3 x_3; \\ x_1 x_2 &\rightarrow x'_1 x'_2 = x_1 x_2; & x_2 x_1 &\rightarrow x'_2 x'_1 = x_2 x_1; & x_1 x_3 &\rightarrow x'_1 x'_3 = x_1 x_3 \\ x_3 x_1 &\rightarrow x'_3 x'_1 = x_3 x_1; & x_2 x_3 &\rightarrow x'_2 x'_3 = x_2 x_3; & x_3 x_2 &\rightarrow x'_3 x'_2 = x_3 x_2, \end{aligned}$$

a więc transformacja układu współrzędnych względem środka symetrii znajdującego w początku układu nie zmienia składowych tensora drugiego rzędu

$$S_{ij} \equiv S'_{ij} . \quad (\text{II.3.3})$$

Otrzymaliśmy ważny wynik: wszystkie własności fizyczne opisywane tensorami drugiego rzędu wykazują symetrię względem środka symetrii, nawet w przypadku gdy kryształ nie posiada środka symetrii.

b) *Układ jednoskośny*. Wybierzemy oś Ox_2 układu krystalofizycznego dla kryształu klasy 2 wzdłuż osi symetrii 2 - krotnej. Obrót układu współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3 dookoła osi 2 o kąt 180° prowadzi do przekształceń

$$x_1 \rightarrow x'_1 = -x_1, \quad x_2 \rightarrow x'_2 = x_2, \quad x_3 \rightarrow x'_3 = -x_3, \quad (\text{II.3.4})$$

Po dokonaniu podstawień wskazanych przez wzór (II.3.4) zobaczymy, że iloczyny x_1x_2 (x_2x_1), x_2x_3 (x_3x_2) po transformacji zmieniają swoje znaki

$$x_1x_2 \rightarrow x'_1x'_2 = -x_1x_2, \quad x_2x_3 \rightarrow x'_2x'_3 = -x_2x_3 .$$

Stąd dla składowych tensora S_{ij} otrzymujemy

$$\begin{aligned} S_{12} \rightarrow S'_{12} &= -S_{12}, \quad S_{21} \rightarrow S'_{21} = -S_{21}, \\ S_{23} \rightarrow S'_{23} &= -S_{23}, \quad S_{32} \rightarrow S'_{32} = -S_{32}. \end{aligned} \quad (\text{II.3.5})$$

Ponieważ jednak kryształ posiada oś symetrii dwukrotną, więc transformacja układu współrzędnych względem osi 2 nie może zmieniać postaci tensora S_{ij} , tj. każda składowa tensora S_{ij} musi transformować się tylko sama w siebie

$$S_{ij} \rightarrow S'_{ij} = S_{ij} . \quad (\text{II.3.6})$$

Transformacji (II.3.5) i (II.3.6) można ze sobą pogodzić tylko w jednym przypadku, gdy

$$S_{12} = 0, \quad S_{21} = 0, \quad S_{23} = 0, \quad S_{32} = 0 .$$

W zapisie macierzowym tensor S_{ij} kryształów klasy 2 będzie więc miał postać

$$\begin{bmatrix} S_{11} & 0 & S_{13} \\ 0 & S_{22} & 0 \\ S_{31} & 0 & S_{33} \end{bmatrix}. \quad (\text{II.3.7})$$

Łatwo sprawdzić, że tensor S_{ij} ma również postać (II.3.7) jeżeli dla klas m i $2/m$ wybierzemy oś Ox_2 prostopadle do płaszczyzny symetrii.

c) *Układ rombowy*. Rozważmy klasę 222. Jeżeli wybierzemy osie Ox_1, Ox_2, Ox_3 wzdłuż osi symetrii 2 - krotnych, to obecność osi symetrii 2 wzdłuż osi Ox_2 powoduje, że $S_{12} = S_{21} = S_{23} = S_{32} = 0$. Obrót układu współrzędnych dookoła osi Ox_1 równoległej do osi symetrii 2 o kąt 180° prowadzi do przekształceń

$$x_1 \rightarrow x'_1 = x_1, \quad x_2 \rightarrow x'_2 = -x_2, \quad x_3 \rightarrow x'_3 = -x_3.$$

Stąd dla przekształceń składowych S_{13} i S_{31} otrzymujemy

$$S_{13} \rightarrow S'_{13} = -S_{13}, \quad S_{31} \rightarrow S'_{31} = -S_{31},$$

czyli

$$S_{13} = 0, \quad S_{31} = 0.$$

Zatem dla kryształów klasy 222 tensor S_{ij} w zapisie macierzowym ma postać

$$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.3.8})$$

gdzie przez S_1, S_2, S_3 oznaczyliśmy: $S_1 \equiv S_{11}$, $S_2 \equiv S_{22}$, $S_3 \equiv S_{33}$.

Można łatwo wykazać, że tę samą postać ma tensor drugiego rzędu dla klas rombowych $mm2$ i mmm .

d) *Układ tetragonalny*. Rozważmy klasę 4 zawierającą jedną oś symetrii 4 - krotną i założmy, że oś 4 jest równoległa do osi Ox_3 . Oś 4 - krotna zawsze zawiera oś dwukrotną, a więc powtarzając to samo rozumowanie jak dla układu jednoskośnego otrzymujemy: $S_{13} = S_{31} = S_{23} = S_{32} = 0$. Obrót o kąt 90° dookoła osi Ox_3 transformuje w następujący sposób osie układu współrzędnych

$$x_1 \rightarrow x'_1 = x_2, \quad x_2 \rightarrow x'_2 = -x_1, \quad x_3 \rightarrow x'_3 = x_3.$$

Zatem

$$\begin{aligned} S_{11} \rightarrow S'_{11} = S_{22}, \quad S_{22} \rightarrow S'_{22} = S_{11}, \quad S_{33} \rightarrow S'_{33} = S_{33} \\ S_{12} \rightarrow S'_{12} = -S_{21}, \quad S_{21} \rightarrow S'_{21} = -S_{12}. \end{aligned} \quad (\text{II.3.9})$$

Ponieważ przy przekształceniach układu współrzędnych względem elementów symetrii punktowej grupy kryształu tensor S_{ij} musi transformować się w siebie samego, ze wzoru (II.3.9), uwzględniając iż $S_{ij} = S_{ji}$, znajdujemy

$$S_{12} = S_{21} = 0, \quad S_{11} = S_{22} \equiv S_1, \quad S_{33} \equiv S_3. \quad (\text{II.3.10})$$

A więc tensor S_{ij} dla kryształów klasy 4 ma postać

$$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_1 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.3.11})$$

Tę samą postać będzie miał tensor drugiego rzędu dla pozostałych klas symetrii układu rombowego.

e) *Układ regularny.* Wszystkie klasy układu regularnego posiadają cztery osie 3 - krotne ułożone jak przekątne w sześcianie. Wybierzemy osie Ox_1, Ox_2, Ox_3 wzdłuż kierunków [100], [010], [001] (rys.II.3.1)

Przy obrocie o kąt 120° dookoła osi 3 - krotnej (kierunek [111]) następuje kolejna zmiana trzech osi współrzędnych zgodnie ze schematem (rys.II.3.1a)

$$x_1 \rightarrow x'_1 = x_2, \quad x_2 \rightarrow x'_2 = x_3, \quad x_3 \rightarrow x'_3 = x_1.$$

Stąd znajdziemy, że składowe tensora S_{ij} transformują się w sposób następujący

$$\begin{aligned} S_{11} \rightarrow S'_{11} = S_{22}, \quad S_{12} \rightarrow S'_{12} = S_{23}, \quad S_{13} \rightarrow S'_{13} = S_{21}, \\ S_{21} \rightarrow S'_{21} = S_{32}, \quad S_{22} \rightarrow S'_{22} = S_{33}, \quad S_{23} \rightarrow S'_{23} = S_{31}, \\ S_{31} \rightarrow S'_{31} = S_{12}, \quad S_{32} \rightarrow S'_{32} = S_{13}, \quad S_{33} \rightarrow S'_{33} = S_{11}. \end{aligned}$$

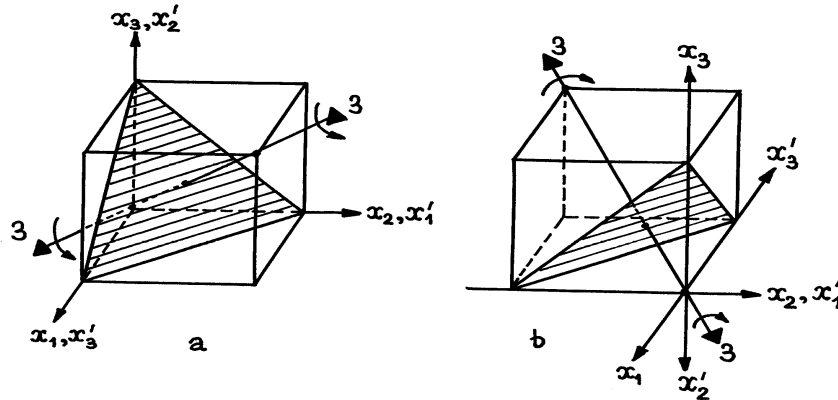
Ponieważ jednak, kryształ posiada oś 3, transformacja ta nie może zmieniać składowych tensora S_{ij} . Stąd

$$S_{11} = S_{22} = S_{33} \equiv S,$$

$$S_{12} = S_{23} = S_{31} , S_{13} = S_{21} = S_{32} . \quad (\text{II.3.12})$$

Przy obrocie o kąt 120° dookoła innej osi 3 - krotnej (kierunek $[\bar{1}\bar{1}1]$) następuje przekształcenie (rys.II.3.1b) osi współrzędnych

$$x_1 \rightarrow x'_1 = x_2, \quad x_2 \rightarrow x'_2 = -x_3, \quad x_3 \rightarrow x'_3 = -x_1 .$$



Rys. II.3.1. a) Transformacja osi współrzędnych przy obrocie układu o kąt 120° dookoła kierunku $[111]$; b) transformacja osi współrzędnych przy obrocie układu o kąt 120° dookoła kierunku $[\bar{1}\bar{1}1]$.

Stąd dla składowych tensora S_{ij} mamy

$$S_{12} \rightarrow S'_{12} = -S_{23} , S_{13} \rightarrow S'_{13} = -S_{21} . \quad (\text{II.3.13})$$

Ze wzorów (II.3.12) i (II.3.13) otrzymujemy

$$S_{12} = S_{13} = S_{23} = 0 .$$

Więc dla kryształów układu regularnego tensor S_{ij} w zapisie macierzowym ma postać

$$\begin{bmatrix} S & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & S \end{bmatrix} , \quad (\text{II.3.14})$$

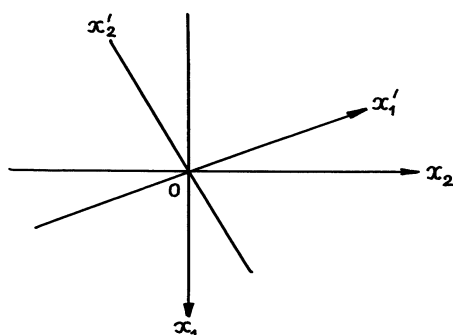
Ze wzoru (II.3.14) wynika, że tensorowa własność fizyczna S_{ij} kryształu regularnego jest całkowicie określona przez podanie jednej liczby S . Wybór osi współrzędnych do których odnosimy tensor S_{ij} jest w tym przypadku nieważny, ponieważ tensor S_{ij} ma taką samą

postać (II.3.14) dla dowolnego układu współrzędnych. Więc własności fizyczne określone przez tensory drugiego rzędu dla kryształów regularnych są wielkościami izotropowymi (skalarnymi), tj. we wszystkich kierunkach te własności fizyczne są takie same. Na przykład, jeżeli z kryształu regularnego wytniemy kulę, to przy ogrzewaniu lub chłodzeniu ta kula zachowa swój kształt. Dla kryształów układu regularnego skalarnymi (izotropowymi) więc są: przenikalność i podatność dielektryczna; przewodnictwo i opór elektryczny itp..

f) *Układy trygonalny i heksagonalny.* Dla wszystkich klas krystalograficznych, z wyjątkiem klas układu trygonalnego i heksagonalnego, transformacja układu współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3 względem jakiegoś elementu symetrii po prostu zmienia porządek osi układu. Natomiast w układach trygonalnym i heksagonalnym przekształcanie układu współrzędnych według osi symetrii 3-krotnej lub 6-krotnej powoduje, że po dokonaniu transformacji osie Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 nowego układu zajmują położenia pośrednie. Dlatego więc w przypadku układu trygonalnego i heksagonalnego rozważanie wpływu symetrii kryształu na postać tensora S_{ij} nie jest takie proste jak dla innych układów, chociaż zasada jest dokładnie taka sama jak poprzednio.

Rozpatrzmy kryształ klasy 3 i niech oś Ox_3 pokrywa się z osią symetrii 3. Z rys.II.3.2 widać, że macierz $\alpha_{i'j}$ transformacji dla obrotu o kąt 120° dookoła osi Ox_3 ma postać

$$[\alpha_{i'j}] = \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{II.3.15})$$



Rys. II.3.2. Transformacja osi współrzędnych układu przy obrocie o kąt 120° dookoła osi symetrii 3 - krotnej dla kryształów klasy 3

Gdy zastosujemy tą transformację do współrzędnych dowolnego punktu, otrzymujemy

$$x_1 \rightarrow x'_1 = -\frac{1}{2}x_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_2 ,$$

$$x_2 \rightarrow x'_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2}x_1 - \frac{1}{2}x_2 ,$$

$$x_3 \rightarrow x'_3 = x_3 .$$

Stąd dla składowych tensora S_{ij} mamy

$$S_{11} \rightarrow S'_{11} = \frac{1}{4}S_{11} - \frac{\sqrt{3}}{4}S_{12} - \frac{\sqrt{3}}{4}S_{21} + \frac{3}{4}S_{22} ,$$

$$S_{22} \rightarrow S'_{22} = \frac{3}{4}S_{11} + \frac{\sqrt{3}}{4}S_{12} + \frac{\sqrt{3}}{4}S_{21} + \frac{1}{4}S_{22} ,$$

$$S_{12} \rightarrow S'_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4}S_{11} + \frac{1}{4}S_{12} - \frac{3}{4}S_{21} - \frac{\sqrt{3}}{4}S_{22} ,$$

$$S_{21} \rightarrow S'_{21} = \frac{\sqrt{3}}{4}S_{11} - \frac{3}{4}S_{12} + \frac{1}{4}S_{21} - \frac{\sqrt{3}}{4}S_{22} ,$$

$$S_{33} \rightarrow S'_{33} = S_{33} , \quad S_{13} \rightarrow S'_{13} = -\frac{1}{2}S_{13} + \frac{\sqrt{3}}{2}S_{23} , \quad (\text{II.3.16})$$

$$S_{31} \rightarrow S'_{31} = -\frac{1}{2}S_{31} + \frac{\sqrt{3}}{2}S_{32} , \quad S_{23} \rightarrow S'_{23} = -\frac{\sqrt{3}}{2}S_{13} - \frac{1}{2}S_{23} ,$$

$$S_{32} \rightarrow S'_{32} = -\frac{\sqrt{3}}{2}S_{31} - \frac{1}{2}S_{32} .$$

Ponieważ kryształ posiada oś 3, wszystkie strzałki we wzorach (II.3.16) możemy traktować jako znaki równości. Kładąc w tych wzorach $S_{ij} = S'_{ij}$ otrzymujemy 6 niezależnych równań

$$\sqrt{3}(S_{11} - S_{22}) + (S_{12} + S_{21}) = 0 ,$$

$$(S_{11} - S_{22}) - \sqrt{3}(S_{12} + S_{21}) = 0 ,$$

$$S_{13} + \sqrt{3}S_{23} = 0 , \quad \sqrt{3}S_{13} - S_{23} = 0 ,$$

$$\sqrt{3}S_{31} - S_{32} = 0 , \quad S_{31} + \sqrt{3}S_{32} = 0 .$$

Ich rozwiązanie daje

$$S_{11} = S_{22} \equiv S_1 , \quad S_{13} = S_{31} = S_{23} = S_{32} = 0 , \quad S_{12} = -S_{21} = 0 . \quad (\text{II.3.17})$$

Więc jeżeli tensor drugiego rzędu S_{ij} jest tensorem symetrycznym, to zgodnie z (II.3.17) dla kryształów klasy 3 tensor S_{ij} ma postać

$$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_1 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}. \quad (\text{II.3.18})$$

Można sprawdzić, że taką samą postać ma symetryczny tensor S_{ij} dla pozostałych klas układu trygonalnego.

W przypadku kryształów układu heksagonalnego obecność osi 3 - krotnej (oś 6 zawsze zawiera oś 3; przekształcenie względem inwersyjnej osi 6-krotnej może być zastąpione przez przekształcenie względem osi 3 i płaszczyzny symetrii prostopadłej do niej) od razu doprowadzi do tego, że symetryczny tensor drugiego rzędu ma postać (II.3.18). Istnienie innych elementów symetrii w grupach punktowych układu heksagonalnego nie zmienia postaci (II.3.18) tensora S_{ij} .

Przykład II.3.3. Wykażemy, że wielkość własności fizycznej określonej za pomocą tensora drugiego rzędu S_{ij} w dowolnym kierunku definiuje wzór

$$S_{\vec{n}} = n_i S_{ij} n_j, \quad (i, j = 1, 2, 3), \quad (\text{II.3.19})$$

gdzie $S_{\vec{n}}$ - wielkość własności fizycznej w kierunku wyznaczonym przez składowe n_1, n_2, n_3 jednostkowego wektora \vec{n} ($|\vec{n}| = 1$).

Rozważania oprzemy na przykładzie przewodnictwa elektrycznego, niemniej są one ważne dla wszystkich własności fizycznych określonych za pomocą tensora drugiego rzędu. Najpierw zastanowimy się bliżej co rozumiemy gdy mówimy “przewodnictwo elektryczne w określonym kierunku”. Jeżeli do kryształu zostało przyłożone pole elektryczne \vec{E} w kierunku wyznaczonym przez wektor jednostkowy \vec{n} , to w ogólnym przypadku, wektor gęstości prądu elektrycznego \vec{j} będzie miał składowe zarówno równoległe ($j_{\vec{n}}$), jak i prostopadłe (j_{\perp}) do wektora \vec{E} . Doświadczalnie mierzymy zwykle prąd w kierunku wektora \vec{E} , tj. mierzymy tylko składową $j_{\vec{n}}$. Właśnie wielkość

$$\sigma_{\vec{n}} = \frac{(\vec{j} \cdot \vec{n})}{E} \quad (\text{II.3.20})$$

będziemy nazywali przewodnictwem elektrycznym w kierunku wektora \vec{n} . Znajdziemy teraz wyrażenie analityczne dla wielkości przewodnictwa w określonym kierunku.

Zgodnie z (II.1.7d) składowe j_i wektora gęstości prądu są równe

$$j_i = \sigma_{ij} E_j = (\sigma_{ij} n_j) \cdot E . \quad (\text{II.3.21})$$

Po podstawieniu (II.3.21) do (II.3.20) i uwzględnieniu, że $(\vec{j} \cdot \vec{n}) = j_i n_i$, otrzymujemy

$$\sigma_{\vec{n}} = n_i \sigma_{ij} n_j .$$

Przykład II.3.4. Poglądowo obraz zmian własności fizycznej określonej za pomocą symetrycznego tensora drugiego rzędu dla wszystkich kierunków w kryształach można przedstawić za pomocą powierzchni przedstawieniowej (charakterystycznej) [5-8]. Powierzchnia ta jest geometrycznym sposobem przedstawienia symetrycznego tensora drugiego rzędu, analogicznym do przedstawienia wektora za pomocą strzałki. Wykażemy, że do opisu własności fizycznej określonej tensorem symetrycznym drugiego rzędu S_{ij} możemy użyć geometrycznego przedstawienia w postaci powierzchni drugiego stopnia (elipsoidy, hiperboloidy)

$$x_i S_{ij} x_j = 1 , \quad (\text{II.3.22})$$

która nosi nazwę **kwadryki** [5-8]. We wzorze (II.3.22) x_1, x_2, x_3 są to współrzędne dowolnego punktu $A(x_1, x_2, x_3)$ na powierzchni kwadryki.

W przykładzie II.3.3 wykazaliśmy, że wielkość własności fizycznej, określonej za pomocą tensora drugiego rzędu S_{ij} w kierunku wektora jednostkowego \vec{n} , definiuje wzór (II.3.19). Rozważmy w kierunku wektora \vec{n} punkt $A(x_1, x_2, x_3)$ odległość którego od początku układu wynosi r . Wówczas dla współrzędnych punktu A mamy

$$x_i = r \cdot n_i . \quad (\text{II.3.23})$$

Podstawiając (II.3.23) do (II.3.19) i zamieniając $S_{\vec{n}}$ przez $S_{\vec{r}}$ otrzymujemy

$$S_{\vec{r}} = \frac{1}{r^2} x_i S_{ij} x_j . \quad (\text{II.3.24})$$

Ze wzoru (II.3.24) wynika, że jeżeli $S_{ij} = S_{ji}$ i składowe wektora \vec{r} spełniają równanie:

$$x_i S_{ij} x_j = 1 , \text{ to}$$

$$S_{\vec{r}} = \frac{1}{r^2} .$$

A więc kwadryka (II.3.22) daje prosty geometryczny sposób przedstawienia symetrycznego tensora drugiego rzędu: promień wodzący r wyprowadzony ze środka kwadryki tensora S_{ij} do dowolnego punktu jej powierzchni jest równy odwrotności pierwiastka kwadratowego własności fizycznej mierzonej w kierunku wektora \vec{r}

$$r = \frac{1}{\sqrt{S_{\vec{r}}}} . \quad (\text{II.3.25})$$

Kwadryka tensora S_{ij} zawiera tyle zerowych współczynników, ile jest zerowych składowych w tensorze S_{ij} i przedstawia całkowicie wewnętrzną symetrię własności kryształu określoną symetrycznym tensorem drugiego rzędu.

Przykład II.3.5. Dla pewnego kryształu tensor przewodnictwa elektrycznego σ_{ij} ma następujące składowe w układzie współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 36 \end{bmatrix} \cdot 10^{-6} \Omega^{-1} m^{-1} .$$

Ten sam tensor przewodnictwa elektrycznego w układzie współrzędnych Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 ma składowe

$$[\sigma_{i'j'}] = \begin{bmatrix} 7 & -3\sqrt{3} & 0 \\ -3\sqrt{3} & 13 & 0 \\ 0 & 0 & 36 \end{bmatrix} \cdot 10^{-6} \Omega^{-1} m^{-1} .$$

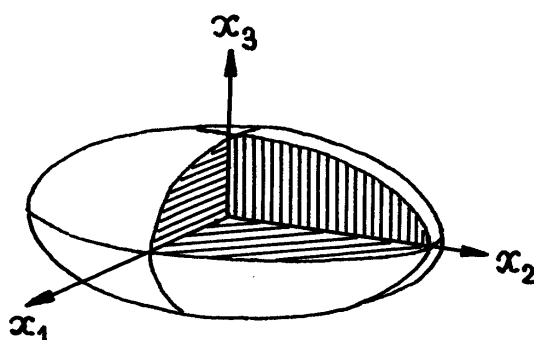
Znajdziemy a) kierunki w których opór elektryczny osiąga maksymalną i minimalną wartość; b) kąty między osiami Ox_1, Ox_2, Ox_3 i osiami Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 .

a) W układzie współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3 równanie kwadryki tensora σ_{ij} , zgodnie z (II.3.22), ma postać

$$\sigma_{11}x_1^2 + \sigma_{22}x_2^2 + \sigma_{33}x_3^2 = 1 . \quad (\text{II.3.26})$$

Ponieważ $\sigma_{11} > 0$, $\sigma_{22} > 0$, $\sigma_{33} > 0$, powierzchnia (II.3.26) jest elipsoidą, a długość półosi wynosi $1/\sqrt{\sigma_{11}} = 2.5 \cdot 10^2 \Omega \cdot m$, $1/\sqrt{\sigma_{22}} = 5 \cdot 10^2 \Omega \cdot m$, $1/\sqrt{\sigma_{33}} = 1.7 \cdot 10^2 \Omega \cdot m$ (rys.II.3.3). Układ współrzędnych w którym równanie kwadryki przyjmuje postać kanoniczną (II.3.26) nosi nazwę **układu osi głównych tensora** [5-8]. W tym układzie odpowiedni tensor symetryczny drugiego rzędu ma niezerowe tylko przekątne składowe. Więc układ współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3 jest układem osi głównych tensora przewodnictwa elektrycznego kryształu. W układzie osi głównych tensora σ_{ij} prawo Ohma (II.3.21) będzie miało następujący wygląd

$$j_1 = \sigma_{11}E_1 \equiv \sigma_1 E_1, \quad j_2 = \sigma_{22}E_2 \equiv \sigma_2 E_2, \quad j_3 = \sigma_{33}E_3 \equiv \sigma_3 E_3. \quad (\text{II.3.27})$$



Rys.II.3.3. Kwadryka tensora σ_{ij}

Ze wzoru (II.3.27) i rys.II.3.3 widać, że przewodnictwo elektryczne będzie miało maksymalną wartość w kierunku najkrótszej z osi głównych, tj. w kierunku osi Ox_3 . Natomiast przewodnictwo elektryczne będzie maksymalne w kierunku osi Ox_2 , tj. w kierunku najdłuższej z osi głównych.

Opór elektryczny ρ_{ij} , jak i przewodnictwo elektryczne, jest określony przez związek (patrz tabelę II.3.1) wektorów \vec{E} i \vec{j}

$$E_i = \rho_{ik} j_k. \quad (\text{II.3.28})$$

Równanie (II.3.28) rozpisane szczegółowo ma postać

$$\begin{aligned}
E_1 &= \rho_{11}j_1 + \rho_{12}j_2 + \rho_{13}j_3, \\
E_2 &= \rho_{21}j_1 + \rho_{22}j_2 + \rho_{23}j_3, \\
E_3 &= \rho_{31}j_1 + \rho_{32}j_2 + \rho_{33}j_3.
\end{aligned}
\tag{II.3.29}$$

Z porównania (II.3.27) i (II.3.29) znajdziemy, że

$$\rho_{11} = 1/\sigma_1; \rho_{22} = 1/\sigma_2; \rho_{33} = 1/\sigma_3; \rho_{ij} = 0, (i \neq j), \tag{II.3.30}$$

czyli

$$\rho_1 \equiv \rho_{11} = 6 \cdot 10^4 \Omega \cdot m, \rho_2 \equiv \rho_{22} = 25 \cdot 10^4 \Omega \cdot m, \rho_3 \equiv \rho_{33} = 3 \cdot 10^4 \Omega \cdot m.$$

Więc opór elektryczny będzie maksymalny w kierunku osi Ox_2 i będzie minimalny w kierunku osi Ox_3 .

b) Korzystając ze związków między składowymi tensora przewodnictwa elektrycznego w układach Ox_1, Ox_2, Ox_3 i Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\sigma_{1'3'} &= \alpha_{1'1} \alpha_{3'1} \sigma_1 + \alpha_{1'2} \alpha_{3'2} \sigma_2 + \alpha_{1'3} \alpha_{3'3} \sigma_3 = 0, \\
\sigma_{2'3'} &= \alpha_{2'1} \alpha_{3'1} \sigma_1 + \alpha_{2'2} \alpha_{3'2} \sigma_2 + \alpha_{2'3} \alpha_{3'3} \sigma_3 = 0, \\
\sigma_{3'3'} &= \alpha_{3'1} \alpha_{3'1} \sigma_1 + \alpha_{3'2} \alpha_{3'2} \sigma_2 + \alpha_{3'3} \alpha_{3'3} \sigma_3 = \sigma_3.
\end{aligned}
\tag{II.3.31}$$

Korzystając z określenia składowych macierzy $\alpha_{i'k}$

$$\alpha_{i'k} = (\vec{e}_{i'} \cdot \vec{e}_k)$$

gdzie $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ - baza układu współrzędnych Ox_1, Ox_2, Ox_3 , a $\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3$ - baza układu współrzędnych Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 , zapiszmy równania (II.3.31) w postaci

$$\begin{aligned}
\vec{e}'_1 \cdot (\alpha_{3'1} \sigma_1 \cdot \vec{e}_1 + \alpha_{3'2} \sigma_2 \cdot \vec{e}_2 + \alpha_{3'3} \sigma_3 \cdot \vec{e}_3) &= 0, \\
\vec{e}'_2 \cdot (\alpha_{3'1} \sigma_1 \cdot \vec{e}_1 + \alpha_{3'2} \sigma_2 \cdot \vec{e}_2 + \alpha_{3'3} \sigma_3 \cdot \vec{e}_3) &= 0, \\
\vec{e}'_3 \cdot (\alpha_{3'1} \sigma_1 \cdot \vec{e}_1 + \alpha_{3'2} \sigma_2 \cdot \vec{e}_2 + \alpha_{3'3} \sigma_3 \cdot \vec{e}_3) &= \sigma_3.
\end{aligned}
\tag{II.3.32}$$

Ze wzorów (II.3.32) wynika, że wektor

$$\alpha_{3'1} \sigma_1 \cdot \vec{e}_1 + \alpha_{3'2} \sigma_2 \cdot \vec{e}_2 + \alpha_{3'3} \sigma_3 \cdot \vec{e}_3 = \sigma_3 \cdot \vec{e}'_3 \tag{II.3.33}$$

jest równoległy do jednostkowego wektora \vec{e}_3' . Mnożąc (II.3.33) skalarnie przez wektory $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ i uwzględniając, że $(\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j) = \delta_{ij}$, znajdujemy

$$\alpha_{3'1} \sigma_1 = \alpha_{3'1} \sigma_3, \quad \alpha_{3'2} \sigma_2 = \alpha_{3'2} \sigma_3, \quad \alpha_{3'3} \sigma_3 = \alpha_{3'3} \sigma_3. \quad (\text{II.3.34})$$

Stąd, uwzględniając, że $\sigma_1 \neq \sigma_3, \sigma_2 \neq \sigma_3$ mamy

$$\alpha_{3'1} = \alpha_{3'2} = 0, \quad \alpha_{3'3} = 1. \quad (\text{II.3.35})$$

Ze wzoru (II.3.35) wynika, że oś Ox_3' jest równoległa do osi Ox_3 .

Biorąc pod uwagę (II.3.35) i znów korzystając z reguły przekształcenia składowych tensora drugiego rzędu, otrzymujemy

$$\begin{aligned} \sigma_{1'1'} &= \alpha_{1'1}^2 \sigma_1 + \alpha_{1'2}^2 \sigma_2, \\ \sigma_{1'2'} &= \alpha_{1'1} \alpha_{2'1} \sigma_1 + \alpha_{1'2} \alpha_{2'2} \sigma_2, \\ \sigma_{2'2'} &= \alpha_{2'1}^2 \sigma_1 + \alpha_{2'2}^2 \sigma_2. \end{aligned} \quad (\text{II.3.36})$$

Dla macierzy transformacji $\alpha_{i'k}$ są słuszne związki (patrz wzór (II.1.14))

$$\alpha_{1'1}^2 + \alpha_{1'2}^2 = 1, \quad \alpha_{1'1} \alpha_{2'1} + \alpha_{1'2} \alpha_{2'2} = 0, \quad \alpha_{2'1}^2 + \alpha_{2'2}^2 = 1. \quad (\text{II.3.37})$$

Uwzględniając (II.3.37) ze wzorów (II.3.36) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \alpha_{1'2} \alpha_{2'2} &= -\alpha_{1'1} \alpha_{2'1} = \frac{\sigma_{1'2'}}{\sigma_2 - \sigma_1}, \\ \alpha_{1'2}^2 &= (1 - \alpha_{1'1}^2) = \frac{\sigma_{1'1'} - \sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_1}, \\ \alpha_{2'2}^2 &= (1 - \alpha_{2'1}^2) = \frac{\sigma_{2'2'} - \sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_1}. \end{aligned}$$

Skąd mamy

$$\alpha_{1'2} = -\alpha_{2'1} = -\frac{\sqrt{3}}{2}, \quad \alpha_{2'2} = \alpha_{2'2} = \frac{1}{2}. \quad (\text{II.3.38})$$

Więc osie Ox_1, Ox_2, Ox_3 tworzą z osiami Ox_1', Ox_2', Ox_3' kąty

$$\angle x_1' Ox_1 = \angle x_2' Ox_2 = 60^\circ, \quad \angle x_2' Ox_1 = 30^\circ, \quad \angle x_3' Ox_3 = 0^\circ.$$

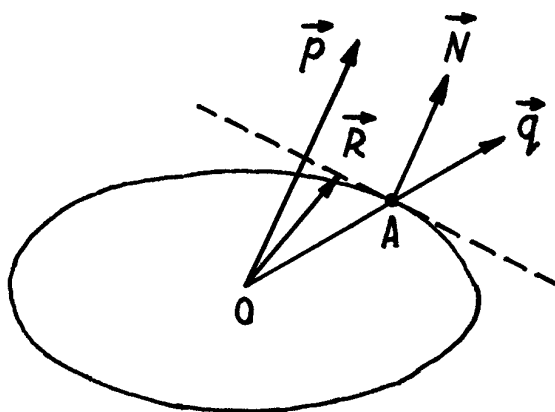
Przykład II.3.6. Udowodnimy, że jeżeli $p_i = S_{ij}q_j$, to kierunek wektora \vec{p} jest taki jak kierunek normalnej wystawionej do powierzchni kwadryki tensora S_{ij} w końcu promienia wodzącego równoległego do wektora \vec{q} (rys. II.3.4).

Niech w układzie osi głównych tensora S_{ij} kierunek wektora \vec{q} określa jednostkowy wektor $\vec{n} = \vec{q}/|\vec{q}|$. Wtedy, w tym układzie wektor \vec{p} ma składowe

$$p_1 = qS_1n_1, \quad p_2 = qS_2n_2, \quad p_3 = qS_3n_3. \quad (\text{II.3.39})$$

Rozważmy punkt $A(x_1, x_2, x_3)$ leżący na powierzchni kwadryki tensora S_{ij} w kierunku wektora \vec{q} (rys. II.3.4). Współrzędne punktu $A(x_1, x_2, x_3)$ możemy zapisać w postaci

$$x_1 = r \cdot n_1, \quad x_2 = r \cdot n_2, \quad x_3 = r \cdot n_3. \quad (\text{II.3.40})$$



Rys. II.3.4. Określenie kierunku wektora \vec{p} za pomocą kwadryki tensora S_{ij}

Oznaczmy przez \vec{R} wektor określający położenie dowolnego punktu na płaszczyźnie stycznej do elipsoidy w punkcie $A(x_1, x_2, x_3)$, a przez \vec{N} - wektor prostopadły do tej płaszczyzny (rys. II.3.4). Wtedy równanie płaszczyzny stycznej możemy zapisać w postaci

$$(\vec{R} - \vec{r}) \cdot \vec{N} = 0, \quad (\text{II.3.41})$$

albo

$$\frac{\partial F}{\partial x_1}(X_1 - x_1) + \frac{\partial F}{\partial x_2}(X_2 - x_2) + \frac{\partial F}{\partial x_3}(X_3 - x_3) = 0, \quad (\text{II.3.42})$$

gdzie

$$F(x_1, x_2, x_3) = S_1 x_1^2 + S_2 x_2^2 + S_3 x_3^2 - 1 = 0 \quad (\text{II.3.43})$$

jest równaniem elipsoidy (kwadryki tensora S_{ij}), a X_i ($i = 1, 2, 3$) są składowymi wektora \vec{R} w układzie głównych osi tensora S_{ij} .

Różniczkując (II.3.43) względem x_1, x_2, x_3 znajdziemy

$$T_1 = \frac{\partial F}{\partial x_1} = 2S_1 \cdot x_1, \quad T_2 = \frac{\partial F}{\partial x_2} = 2S_2 \cdot x_2, \quad T_3 = \frac{\partial F}{\partial x_3} = 2S_3 \cdot x_3. \quad (\text{II.3.44})$$

Pochodne cząstkowe $\partial F / \partial x_1, \partial F / \partial x_2, \partial F / \partial x_3$ są składowymi wektora \vec{T} równoległego do wektora \vec{N} . (To twierdzenie jest oczywiste przy $S_1 = S_2 = S_3 = S$, ponieważ wtedy kwadryka tensora S_{ij} jest kulą, a wektor $\vec{T} = 2S \cdot \vec{r}$).

Uwzględniając (II.3.44) i (II.3.39) otrzymujemy

$$T_i = 2S_i r \cdot n_i = 2 \frac{r}{q} p_i. \quad (\text{II.3.45})$$

Ze wzoru (II.3.45) wynika, że wektor \vec{T} ma ten sam kierunek co wektor \vec{p} , a zatem, ponieważ wektor \vec{T} jest równoległy do wektora \vec{N} , normalna w punkcie $A(x_1, x_2, x_3)$ jest równoległa do wektora \vec{p} .

Zadania do § II.3

1. Płytką z kryształu KDP (KH_2PO_4 , grupa punktowa $\bar{4}2m$) jest umieszczona w polu elektrycznym o natężeniu 20 kV/cm . Zakładając, że wartość współczynnika elektrokalorycznego wynosi $q = -2 \cdot 10^{-6} \text{ Km/V}$ znaleźć o ile się zmieni temperatura płytki jeżeli pole elektryczne jest skierowane wzdłuż: a) osi inwersyjnej; b) prostopadle do tej osi.

Odpowiedź: a) $\Delta T = -4K$; b) $\Delta T = 0$.

2. Z kryształu turmalinu ($(Na, Ca)(Mg, Li, Al)_3 Al_6 (BO_3)(Si_6 O_{18})$, grupa punktowa $3m$) została wycięta płytką. Jakie pole elektryczne wywołałoby tę samą polaryzację płytki co zmiana jej temperatury o $1K$? (W temperaturze pokojowej wartość współczynnika piroelektrycznego turmalinu wynosi $p \approx 3 \cdot 10^{-7} \text{ Cm}^{-2} K^{-1}$, a stałą dielektryczną w kierunku osi 3 jest równa $\epsilon_3 = 7.5$).

Odpowiedź: $E = 5.2 \cdot 10^3 \text{ V/m}$.

Wskazówka: skorzystać ze wzorów: $\epsilon_3 = 1 + \zeta_3$, $E = P/\epsilon_0\zeta_3$ ($\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ Fm}^{-1}$).

3. Obliczyć gęstość ładunków elektrycznych które się pojawiają na powierzchni płytki z turmalinu przy ogrzewaniu płytki o 30K . Płytką została wycięta tak aby: a) wektor normalny do powierzchni płytki był równoległy do osi symetrii kryształu; b) kąt między wektorem normalnym do powierzchni płytki i osią 3 wynosił 60° ; c) oś 3-krotna leżała w płaszczyźnie płytki.

Odpowiedź: a) $\sigma = 9 \cdot 10^{-6} \text{ Cm}^{-2}$; b) $\sigma = 4.5 \cdot 10^{-6} \text{ Cm}^{-2}$; c) $\sigma = 0 \text{ Cm}^{-2}$.

Wskazówka: gęstość ładunków elektrycznych σ jest liczbowo równa polaryzacji P .

4. Płytką z kryształu kwasu winowego ($\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_6$, grupa punktowa 2) ma wymiary $1 \times 1 \times 0,1 \text{ cm}^3$. Oś symetrii 2 jest normalna do powierzchni płytki. Obliczyć: a) ładunek elektryczny który się pojawia na powierzchni płytki przy jej ogrzewaniu o 10K ; b) różnicę potencjałów między powierzchniami przeciwnymi płytki. (Wartość współczynnika piroelektrycznego kwasu winowego wynosi $p = -1.3 \cdot 10^{-6} \text{ Cm}^{-2} \text{ K}^{-1}$, a tensor przenikalności dielektrycznej ma składowe: $\epsilon_{11} = 6.44$, $\epsilon_{22} = 5.80$, $\epsilon_{33} = 6.49$, $\epsilon_{13} = 0.005$).

Odpowiedź: a) $Q = 1.3 \cdot 10^{-6} \text{ C}$; b) $U = 2.5 \cdot 10^6 \text{ V}$.

Wskazówka: różnicę potencjałów obliczamy ze wzoru $U = Q/C$, gdzie Q - wartość bezwzględna ładunku elektrycznego na jednej z powierzchni płytki, $C = \epsilon_0 \epsilon S/d$ - pojemność kondensatora.

5. Wykazać, że składowymi głównymi tensora symetrycznego drugiego rzędu S_{ij} są trzy pierwiastki równania trzeciego stopnia względem λ

$$\det(S_{ij} - \lambda \delta_{ij}) = 0,$$

zwanego **równaniem wiekowym**. Kierunek osi głównej x'_1, x'_2, x'_3 , odpowiadającej pierwiastkowi λ' , szukamy przez rozwiązanie układu równań

$$S_{ij} x'_j = \lambda' x'_i,$$

$$x'_i x'_i = 1.$$

6. Tensor rozszerzalności cieplnej α_{ij} w pewnym układzie współrzędnych ma postać

$$[\alpha_{ij}] = \begin{bmatrix} 15 & 0 & -7.5 \\ 0 & 41 & 0 \\ -7.5 & 0 & 32 \end{bmatrix} \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}.$$

Znaleźć postać tensora α_{ij} w układzie osi głównych.

Odpowiedź: $\alpha_1 = 34.8 \cdot 10^{-6} K^{-1}$, $\alpha_2 = 41 \cdot 10^{-6} K^{-1}$, $\alpha_3 = 12.2 \cdot 10^{-6} K^{-1}$,

Wskazówka: Skorzystać ze wzorów zadania 5.

7. Jak musimy wyciąć płytkę z kryształu kalcytu ($CaCO_3$, grupa punktowa $\bar{3}m$; główne współczynniki rozszerzalności cieplnej są równe: $\alpha_1 = \alpha_2 = -5.6 \cdot 10^{-6} K^{-1}$, $\alpha_3 = 25 \cdot 10^{-6} K^{-1}$) aby przy ogrzewaniu jej grubość się nie zmieniała?

Odpowiedź: kąt między inwersyjną osią trójkrotną i kierunkiem wektora normalnego do płytki musi być równy $\theta = \arccos[\alpha_1 / (\alpha_1 - \alpha_3)] = 64^{\circ}43'$.

8. W których kierunkach kryształ grafitu (C , grupa punktowa $6/mmm$; główne współczynniki rozszerzalności cieplnej są równe: $\alpha_1 = \alpha_2 = -1.5 \cdot 10^{-6} K^{-1}$, $\alpha_3 = 28.2 \cdot 10^{-6} K^{-1}$) przy ogrzewaniu nie rozszerza się?

Odpowiedź: w kierunkach tworzących kąt $86^{\circ}50'$ z osią 6 - krotną.

9. Macierz α_{ij} transformacji układu współrzędnych przy obrocie o kąt 60° dookoła osi Ox_3 ma postać

$$[\alpha_{ij}] = \begin{bmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{II.3.46})$$

Korzystając ze wzoru (II.3.46) wykazać, że własność fizyczna określona za pomocą tensora drugiego rzędu dla kryształów układu heksagonalnego ma postać (II.3.18).

10. Między okładkami kondensatora płaskiego zaciśnięta jest płytkę z gipsu ($CaSO_4 \cdot 2H_2O$, grupa punktowa $2/m$) o grubości 0.4 cm . Pole powierzchni płytki wynosi $1 \times 2.5 \text{ cm}^2$.

Wektor \vec{N} normalny do powierzchni płytki tworzy następujące kąty z osiami krystalograficznymi

$$\angle x_1ON = 90^{\circ}, \angle x_2ON = 30^{\circ}, \angle x_3ON = 60^{\circ}.$$

Obliczyć pojemność elektryczną kondensatora, jeżeli główne stałe dielektryczne gipsu są równe: $\epsilon_1 = 9.9$, $\epsilon_2 = 5.1$, $\epsilon_3 = 5.0$.

Odpowiedź: $C = 1.4 \cdot 10^{-12} F$.

11. Jeżeli kryształ znajduje się w polu elektrycznym \vec{E}_{zew} , to wskutek polaryzacji kryształu pole elektryczne wewnątrz kryształu nie jest równe \vec{E}_{zew} . Niezrównoważone ładunki elektryczne, które powstają przy polaryzacji kryształu wytwarzają swoje własne pole elektryczne \vec{E}_{pol} i całkowite pole elektryczne w kryształach wynosi

$$\vec{E} = \vec{E}_{zew} + \vec{E}_{pol} . \quad (\text{II.3.47})$$

Z kryształu układu regularnego wycięto długi pręt, płaski krążek (dysk) oraz kulę. Wykazać, że w przypadku:

a) długiego pręta umieszczonego w jednorodnym polu elektrycznym tak, aby wektor \vec{E}_{zew} był równoległym do osi pręta są słuszne wzory

$$\vec{E}_{pol} = 0 , \quad P_i = \epsilon_0 \zeta_{ii} (E_{zew})_i .$$

b) płaskiego krążka, dla którego wektor \vec{E}_{zew} jest prostopadły do płaszczyzny krążka zachodzi

$$\epsilon_0 \vec{E}_{pol} = -\vec{P} , \quad P_i = \epsilon_0 \frac{\zeta_{ii}}{1 + \zeta_{ii}} (E_{zew})_i .$$

c) kuli umieszczonej w jednorodnym polu mamy

$$\epsilon_0 \vec{E}_{pol} = -\frac{1}{3} \vec{P} , \quad P_i = \epsilon_0 \frac{3\zeta_{ii}}{3 + \zeta_{ii}} (E_{zew})_i .$$

Wskazówka: Występujące we wzorze na polaryzację $P_i = \epsilon_0 \zeta_{ij} E_j$ pole elektryczne \vec{E} jest całkowitym polem elektrycznym (II.3.47).

12. Wektor normalny do płytki z winianu sodowo-potasowego (sól Seignette'a, $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, grupa punktowa 222, główne współczynniki rozszerzalności cieplnej są równe: $\alpha_1 = 58.3 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$, $\alpha_2 = 35.5 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$, $\alpha_3 = -136.1 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$) tworzy z osiami krystalofizycznymi kąty 30° , 70° , $68,6^\circ$. Znaleźć współczynnik rozszerzalności cieplnej płytki w kierunku normalnym do jej powierzchni.

Odpowiedź: $\alpha = 0.63 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$.

13. Polikryształem (albo proszkiem) nazywamy zbiór wielkiej liczby małych kryształków zorientowanych w przestrzeni losowo. Wykazać, że przenikalność dielektryczna proszku wynosi

$$\varepsilon = \frac{1}{3}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3) .$$

Wskazówka : dla proszku przenikalność dielektryczną określa wzór

$$\varepsilon = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \varepsilon_{\vec{n}} \cdot \sin\theta \cdot d\theta ,$$

gdzie $\varepsilon_{\vec{n}} = \varepsilon_{ij} n_i n_j$, a $n_1 = \cos\varphi \cdot \sin\theta$, $n_2 = \sin\varphi \cdot \sin\theta$, $n_3 = \cos\theta$.