

Wykład 3

Tensory

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} :

$$\vec{j} \leftrightarrow \vec{E} . \quad (3.1)$$

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

$$\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E} . \quad (3.2a)$$

albo dla składowych wektorów

$$j_i = \sigma E_i , \quad (3.2b)$$

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} . 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

$$j_1 = \sigma_{11}E_1, \quad j_2 = \sigma_{21}E_1, \quad j_3 = \sigma_{31}E_1 . \quad (3.3a)$$

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

$$j_1 = \sigma_{12}E_2, \quad j_2 = \sigma_{22}E_2, \quad j_3 = \sigma_{32}E_2 . \quad (3.3b)$$

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

$$j_1 = \sigma_{13}E_3, \quad j_2 = \sigma_{23}E_3, \quad j_3 = \sigma_{33}E_3. \quad (3.3c)$$

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

$$j_1 = \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3, \quad (3.4a)$$

$$j_2 = \sigma_{21}E_1 + \sigma_{22}E_2 + \sigma_{23}E_3, \quad (3.4b)$$

$$j_3 = \sigma_{31}E_1 + \sigma_{32}E_2 + \sigma_{33}E_3, \quad (3.4c)$$

albo

$$j_i = \sum_{k=1,2,3} \sigma_{ik} E_k. \quad (3.4d)$$

Ze wzorów (3.4) 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

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

Więc, w odróżnieniu od ciał izotropowych, przewodnictwo elektryczne dla kryształu jest wielkością tensorową.

Zależność (3.4) powinna być słuszną w dowolnym układzie współrzędnych, a więc w układzie współrzędnych Ox'_i ($i=1,2,3$) możemy zapisać

$$j'_i = \sum_{k=1,2,3} \sigma'_{ik} E'_k. \quad (3.6)$$

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 σ'_{ik} posłużmy się otrzymanymi wzorami przekształcenia składowych wektora. Korzystając z tych wzorów możemy zapisać

$$j'_i = \sum_{m=1,2,3} \alpha'_{i'm} j_m . \quad (3.7)$$

Podstawiając (3.4) do (3.7) znajdujemy

$$j'_i = \sum_{m=1,2,3} \alpha'_{i'm} \sum_{l=1,2,3} \sigma_{ml} E_l . \quad (3.8)$$

Dalej, ponieważ

$$E_l = \sum_{k=1,2,3} \alpha_{k'l} E_k \quad (3.9)$$

ze wzoru (3.8) otrzymujemy

$$j'_i = \sum_{k=1,2,3} \left(\sum_{m=1,2,3} \sum_{l=1,2,3} \alpha'_{i'm} \alpha_{k'l} \sigma_{ml} \right) \cdot E_k . \quad (3.10)$$

Z porównania wzorów (3.6) i (3.10) wynika, że

$$\sigma'_{ik} = \sum_{m,l} \alpha'_{i'm} \alpha_{k'l} \sigma_{ml} . \quad (3.11)$$

Powtarzając rozumowanie dla transformacji odwrotnej znajdziemy

$$\sigma_{ik} = \sum_{m,l} \alpha_{m'i} \alpha'_{l'k} \sigma'_{ml} . \quad (3.12)$$

Prawa transformacji (3.11) i (3.12) 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

$$T'_{ik} = \sum_{m,l} \alpha'_{i'm} \alpha_{k'l} T_{ml} , \quad (3.13)$$

$$T_{ik} = \sum_{m,l} \alpha_{m'i} \alpha'_{l'k} T'_{ml} . \quad (3.14)$$

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

$$b_i = \sum_{k=1,2,3} \alpha_{ik} c_k \equiv \alpha_{ik} c_k, \quad (3.15a)$$

$$b_{ik} = \sum_{m,l} \alpha_{mi} \alpha_{lk} c_{ml} \equiv \alpha_{mi} \alpha_{lk} c_{ml}, \quad (3.15b)$$

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

Zgodnie z konwencją Einsteina, wzory (3.13) i (3.14) możemy zapisać w postaci

$$T'_{ik} = \alpha_{i'm} \alpha_{k'l} T_{ml}, \quad (3.16a)$$

$$T_{ik} = \alpha_{m'i} \alpha_{l'k} T'_{ml}. \quad (3.16b)$$

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^n 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:

$$T'_{k_1 k_2 \dots k_n} = \alpha_{k'_1 k_1} \alpha_{k'_2 k_2} \dots \alpha_{k'_n k_n} T_{k_1 k_2 \dots k_n}, \quad (3.17a)$$

$$T_{k_1 k_2 \dots k_n} = \alpha_{k'_1 k_1} \alpha_{k'_2 k_2} \dots \alpha_{k'_n k_n} T'_{k_1 k_2 \dots k_n}. \quad (3.17b)$$

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 (3.17)

$$T' = T. \quad (3.18)$$

Więc tensor zerowego rzędu jest po prostu skalarem.

Jeżeli $n=1$ to mamy tensor pierwszego rzędu, dla którego składowych ze wzorów (3.17) otrzymujemy

$$T'_k = \alpha_{k'/k} T_k, \quad T_k = \alpha_{k/k'} T'_{k'}. \quad (3.19)$$

A więc tensor pierwszego rzędu jest wektorem.

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 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 . Korzystając ze wzoru

$$x'_i = \alpha_{i'm} x_m, \quad (3.20)$$

otrzymujemy

$$x'_i x'_k = \alpha_{i'm} \alpha_{k'l} x_m x_l. \quad (3.21)$$

Z porównania wzorów (3.21) i (3.16a) widzimy, że iloczyn ($x_m x_l$) transformuje się tak samo jak składowa T_{ml} tensora drugiego rzędu. Udowodnienie twierdzenia dla dowolnego iloczynu ($x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_n}$) jest oczywiste.

Zasada Curie. Symetria pól fizycznych

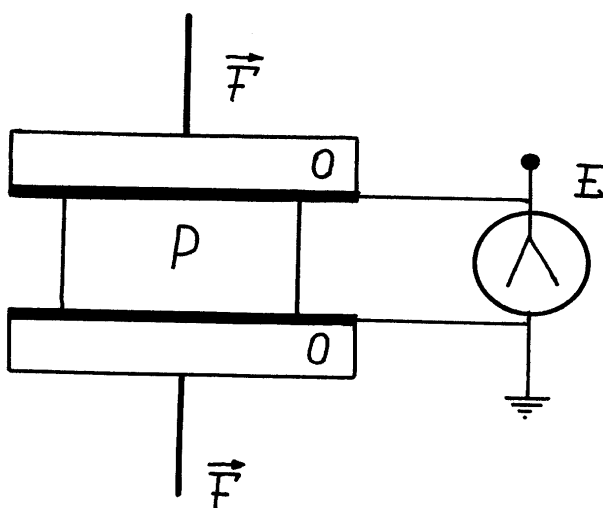
O związkach między symetrią przyczyn a symetrią skutków które występują w przyrodzie, po raz pierwszy wypowiedział się w 1894 roku Piotr Curie: “Gdy kilka różnych zjawisk natury nakłada się nawzajem, tworząc jeden układ, ich dyssymetrie sumują się. W rezultacie pozostają tylko te elementy symetrii, które są wspólne dla każdego zjawiska wziętego oddzielnie”. Stwierdzenie to nosi nazwę **zasady Curie**. W stosunku do kryształów zasadę Curie możemy sformułować następująco: 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

$$G_p \cap G_w . \quad (3.22)$$

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

Przykład 3.1. W pewnych kryształach pod wpływem naprężeń mechanicznych powstaje polaryzacja elektryczna, co przejawia się wystąpieniem na przeciwległych powierzchniach kryształu ładunków elektrycznych.

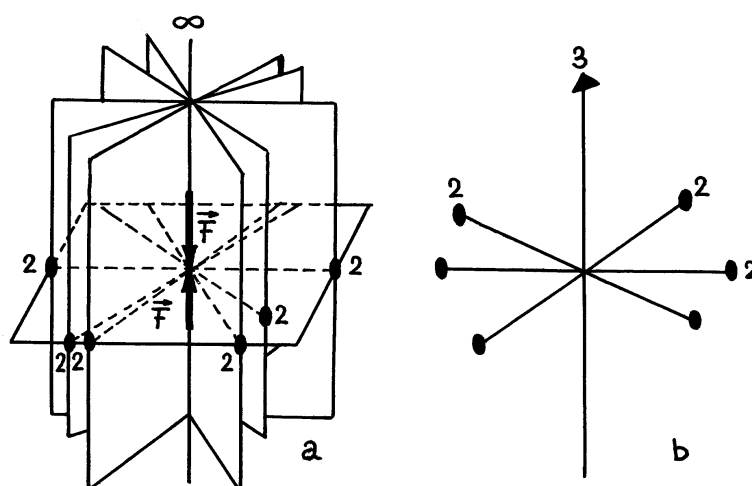


Rys.3.1. Schemat pomiaru efektu piezoelektrycznego

Zjawisko piezoelektryczne 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.3.1). 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 prostopadłe do osi symetrii 3 - krotnej nie wykazuje 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.3.1). Łatwo zauważyć, że ta para sił pozostaje niezmienniczą względem obrotu o dowolny kąt dookoła prostej wzdłuż której przyłożona para sił. Oś ta jest osią nieskończenie krotną, a zatem ma symbol ∞ (rys.3.2a). 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.3.2a). Obecność osi ∞ - krotnej powoduje, że takich płaszczyzn symetrii jest nieskończenie wiele.



Rys. 3.2. a) Elementy symetrii ścisknięcia płytki wzdłuż osi.

b) Elementy symetrii grupy punktowej kwarcu.

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.3.2a). Stosując reguły zapisu symbolu grupy punktowej, grupę symetrii ścisknięcia 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.3.2b). 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. W grupie ∞/mmm osie 2 - krotne leżą w płaszczyźnie prostopadłej do osi 3 - krotnej. Zatem dla płytki z kwarcu ściśniętej wzdłuż osi 3 relacja (3.22) 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?

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 3.2. 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 niezmienny: 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).