

## Wykład 4

---

### Symetria Własności Fizycznych. Zasada Neumanna

---

Wcześniej 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 4.1.

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. W niniejszym skrypcie będziemy rozpatrywali tylko tensorowe właściwości fizyczne.

Jak wynika z określenia tensora (patrz wzór 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 własności 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 własności fizycznej musi mieć tę samą postać. Związek między symetrią kryształu a symetrią własności fizycznych kryształów stanowi zasadniczy postulat fizyki kryształów, znany jako **zasada Neumanna**: 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:

$$G_p \subset G_f . \quad (4.1)$$

Tabela 4.1. Przykłady tensorów opisujących właściwości fizyczne kryształów

Nazwa właściwości fizycznej	Równanie określające własność fizyczną
<b>A. Tensory pierwszego rzędu łączące skalar i wektor</b>	
Piroelektryczność	$\Delta P_i = p_i \Delta T$
Efekt elektrokalityczny	$\Delta T = q_i \Delta E_i$
<b>B. Tensory drugiego rzędu łączące dwa wektory</b>	
Przenikalność dielektryczna	$D_i = \epsilon_0 \epsilon_{ij} E_j$
Dielektryczna nieprzenikalność	$E_i = \eta_0 \eta_{ij} D_j$
Podatność dielektryczna	$P_i = \epsilon_0 \zeta_{ij} E_j$
Przenikalność magnetyczna	$B_i = \mu_0 \mu_{ij} H_j$
Podatność magnetyczna	$J_i = \mu_0 \chi_{ij} H_j$
Przewodnictwo elektryczne	$j_i = \sigma_{ij} E_j$
Opór elektryczny	$E_i = \rho_{ik} j_k$
<b>C. Tensory drugiego rzędu łączące skalar z tensorem drugiego rzędu</b>	
Rozszerzalność cieplna	$r_{ij} = \alpha_{ij} \Delta T$
<b>D. Tensory trzeciego rzędu łączące wektor z tensorem drugiego rzędu</b>	
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	$\Delta \eta_{ij} = r_{ijk} E_k$
<b>E. Tensory czwartego rzędu łączące dwa tensory drugiego rzędu</b>	
Współczynniki sprężystości	$r_{ij} = s_{ijkl} t_{kl}$
Współczynniki sztywności	$t_{ij} = c_{ijkl} r_{kl}$
Współczynniki elastooptyczne	$\Delta \eta_{ij} = p_{ijkl} r_{kl}$
Współczynniki piezooptyczne	$\Delta \eta_{ij} = \pi_{ijkl} t_{kl}$
Elektrostrykcja	$r_{jk} = \gamma_{ijk} E_i E_l$

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 4.1.* 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  $\infty m$  (patrz przykład II.2.2) i zawiera oś dowolnej krotności ( $\infty$ ) 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  $\infty m$  symetrii wektora polarnego. Zatem, zgodnie z (4.1) 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 (4.1) musi być skierowany tylko wzdłuż osi 2. Dla kryształów klasy  $m$  relacja (4.1) 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  $4mm$  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 4.2.* 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  $S_{ij} = S_{ji}$ . 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 Fumiego), która polega na twierdzeniu, że składowe tensora transformują się przy przejściu od jednego układu współrzędnych do drugiego jak odpowiednie iloczyny współrzędnych dowolnego punktu.

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

$$x_1 \rightarrow x'_1 = -x_1, \quad x_2 \rightarrow x'_2 = -x_2, \quad x_3 \rightarrow x'_3 = -x_3, \quad (4.2)$$

gdzie symbol  $\rightarrow$  oznacza "transformuje się w".

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

$$S_{ij} \equiv S'_{ij} . \quad (4.3)$$

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  $180^\circ$  prowadzi do przekształceń

$$x_1 \rightarrow x'_1 = -x_1, \quad x_2 \rightarrow x'_2 = x_2, \quad x_3 \rightarrow x'_3 = -x_3, \quad (4.4)$$

Po dokonaniu podstawień wskazanych przez wzór (4.4) zobaczymy, że iloczyny  $x_1 x_2$  ( $x_2 x_1$ ),  $x_2 x_3$  ( $x_3 x_2$ ) po transformacji zmieniają swoje znaki

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

Stąd dla składowych tensora  $S_{ij}$  otrzymujemy

$$\begin{aligned} S_{12} &\rightarrow S'_{12} = -S_{12}, \quad S_{21} \rightarrow S'_{21} = -S_{21}, \\ S_{23} &\rightarrow S'_{23} = -S_{23}, \quad S_{32} \rightarrow S'_{32} = -S_{32}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

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

$$S_{ij} \rightarrow S'_{ij} = S_{ij} . \quad (4.6)$$

Transformacje (4.5) i (4.6) 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

$$\begin{bmatrix} S_{11} & 0 & S_{13} \\ 0 & S_{22} & 0 \\ S_{31} & 0 & S_{33} \end{bmatrix} . \quad (4.7)$$

Łatwo sprawdzić, że tensor  $S_{ij}$  ma również postać (4.7) 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  $180^\circ$  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

$$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix} , \quad (4.8)$$

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 rombów  $mm2$  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  $90^\circ$  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

$$\begin{aligned} S_{11} \rightarrow S'_{11} = S_{22}, \quad S_{22} \rightarrow S'_{22} = S_{11}, \quad S_{33} \rightarrow S'_{33} = S_{33} \\ S_{12} \rightarrow S'_{12} = -S_{21}, \quad S_{21} \rightarrow S'_{21} = -S_{12} . \end{aligned} \quad (4.9)$$

Ponieważ przy przekształceniach układu współrzędnych względem elementów symetrii punktowej grupy kryształu tensor  $S_{ij}$  musi transformować się w siebie samego, ze wzoru (4.9), uwzględniając iż  $S_{ij} = S_{ji}$ , znajdujemy

$$S_{12} = S_{21} = 0, \quad S_{11} = S_{22} \equiv S_1, \quad S_{33} \equiv S_3 . \quad (4.10)$$

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

$$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_1 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}, \quad (4.11)$$

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.4.1).

Przy obrocie o kąt  $120^\circ$  dookoła osi 3 - krotnej (kierunek  $[111]$ ) następuje kolejna zmiana trzech osi współrzędnych zgodnie ze schematem (rys.4.1a)

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

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

$$S_{11} \rightarrow S'_{11} = S_{22}, \quad S_{12} \rightarrow S'_{12} = S_{23}, \quad S_{13} \rightarrow S'_{13} = S_{21},$$

$$S_{21} \rightarrow S'_{21} = S_{32}, \quad S_{22} \rightarrow S'_{22} = S_{33}, \quad S_{23} \rightarrow S'_{23} = S_{31},$$

$$S_{31} \rightarrow S'_{31} = S_{12}, \quad S_{32} \rightarrow S'_{32} = S_{13}, \quad S_{33} \rightarrow S'_{33} = S_{11} .$$

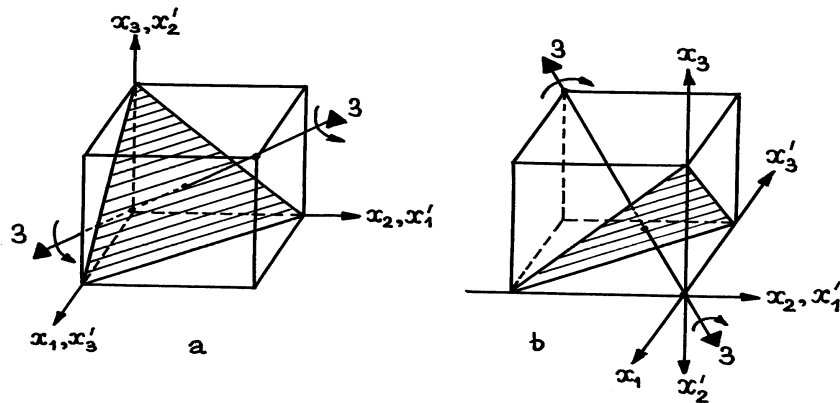
Ponieważ jednak, kryształ posiada oś 3, transformacja ta nie może zmieniać składowych tensora  $S_{ij}$ . Stąd

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

$$S_{12} = S_{23} = S_{31}, \quad S_{13} = S_{21} = S_{32} . \quad (4.12)$$

Przy obrocie o kąt  $120^\circ$  dookoła innej osi 3 - krotnej (kierunek  $[\bar{1}\bar{1}1]$ ) następuje przekształcenie (rys.4.1b) 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. 4.1. a) Transformacja osi współrzędnych przy obrocie układu o kąt  $120^\circ$  dookoła kierunku  $[111]$ ; b) transformacja osi współrzędnych przy obrocie układu o kąt  $120^\circ$  dookoła kierunku  $[\bar{1}\bar{1}1]$ .

Stąd dla składowych tensora  $S_{ij}$  mamy



$$S_{12} \rightarrow S'_{12} = -S_{23}, \quad S_{13} \rightarrow S'_{13} = -S_{21}. \quad (4.13)$$

Ze wzorów (4.12) i (4.13) otrzymujemy

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

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

$$\begin{bmatrix} S & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & S \end{bmatrix}, \quad (4.14)$$

Ze wzoru (4.14) 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 (4.14) 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.4.2 widać, że macierz  $\alpha_{ij}$  transformacji dla obrotu o kąt  $120^\circ$  dookoła osi  $Ox_3$  ma postać

$$[\alpha_{i'/j}] = \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (4.15)$$

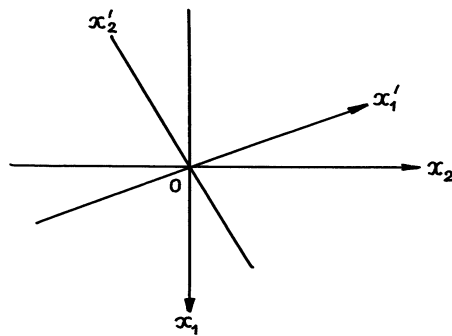
Gdy zastosujemy tą transformację do współrzędnych dowolnego punktu, otrzymujemy

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

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

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

Stąd dla składowych tensora  $S_{ij}$  mamy



Rys. 4.2. Transformacja osi współrzędnych układu przy obrocie o kąt  $120^\circ$  dookoła osi symetrii 3 - krotnej dla kryształów klasy 3

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

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

$$\begin{aligned}
S_{12} &\rightarrow S'_{12} = \frac{\sqrt{3}}{4}S_{11} + \frac{1}{4}S_{12} - \frac{3}{4}S_{21} - \frac{\sqrt{3}}{4}S_{22} , \\
S_{21} &\rightarrow S'_{21} = \frac{\sqrt{3}}{4}S_{11} - \frac{3}{4}S_{12} + \frac{1}{4}S_{21} - \frac{\sqrt{3}}{4}S_{22} , \\
S_{33} &\rightarrow S'_{33} = S_{33} , \quad S_{13} \rightarrow S'_{13} = -\frac{1}{2}S_{13} + \frac{\sqrt{3}}{2}S_{23} ,
\end{aligned} \tag{4.16}$$

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

Ponieważ kryształ posiada oś 3, wszystkie strzałki we wzorach (4.16) możemy traktować jako znaki równości. Kładąc w tych wzorach  $S_{ij} = S'_{ij}$  otrzymujemy 6 niezależnych równań

$$\begin{aligned}
\sqrt{3}(S_{11} - S_{22}) + (S_{12} + S_{21}) &= 0 , \\
(S_{11} - S_{22}) - \sqrt{3}(S_{12} + S_{21}) &= 0 , \\
S_{13} + \sqrt{3}S_{23} &= 0 , \quad \sqrt{3}S_{13} - S_{23} = 0 , \\
\sqrt{3}S_{31} - S_{32} &= 0 , \quad S_{31} + \sqrt{3}S_{32} = 0 .
\end{aligned}$$

Ich rozwiązanie daje

$$S_{11} = S_{22} \equiv S_1 , \quad S_{13} = S_{31} = S_{23} = S_{32} = 0 , \quad S_{12} = -S_{21} = 0 . \tag{4.17}$$

Więc jeżeli tensor drugiego rzędu  $S_{ij}$  jest tensorem symetrycznym, to zgodnie z (4.17) dla kryształów klasy 3 tensor  $S_{ij}$  ma postać

$$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_1 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix} . \tag{4.18}$$

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 (4.18). Istnienie innych elementów symetrii w grupach punktowych układu heksagonalnego nie zmienia postaci (4.18) tensora  $S_{ij}$ .