

### Podstawowe pojęcia i zasady fizyki kryształów

#### Skalary, wektory, tensory

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

$$m = \rho \cdot V . \quad (12.1)$$

Zarówno masę, jak i objętość kryształu możemy mierzyć 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  $\vec{p}$ , który określa zmianę składowych wektora polaryzacji  $\vec{P}$  przy zmianie temperatury

$$\Delta \vec{P} = \vec{p} \cdot \Delta T . \quad (12.2)$$

Tu własność fizyczna - piroelektryczność, którą opisuje wektor  $\vec{p}$ , zdefiniowana jest, zgodnie z (12.2), jako związek między dwiema mierzalnymi wielkościami: temperaturą  $T$  (skalar) i polaryzacją  $\vec{P}$  (wektor).

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  $\vec{j}$ :

$$\vec{j} \leftrightarrow \vec{E} . \quad (12.3)$$

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

$$\vec{j} = \sigma \cdot \vec{E} . \quad (12.4a)$$

albo dla składowych wektorów

$$j_i = \sigma E_i , \quad (12.4b)$$

gdzie wielkość  $\sigma$  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

$$j_1 = \sigma_{11}E_1, \quad j_2 = \sigma_{21}E_1, \quad j_3 = \sigma_{31}E_1 . \quad (12.5a)$$

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

$$j_1 = \sigma_{12}E_2, \quad j_2 = \sigma_{22}E_2, \quad j_3 = \sigma_{32}E_2 . \quad (12.5b)$$

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

$$j_1 = \sigma_{13}E_3, \quad j_2 = \sigma_{23}E_3, \quad j_3 = \sigma_{33}E_3 . \quad (12.5c)$$

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

$$j_1 = \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3 , \quad (12.6a)$$

$$j_2 = \sigma_{21}E_1 + \sigma_{22}E_2 + \sigma_{23}E_3 , \quad (12.6b)$$

$$j_3 = \sigma_{31}E_1 + \sigma_{32}E_2 + \sigma_{33}E_3 , \quad (12.6c)$$

albo

$$j_i = \sum_{k=1,2,3} \sigma_{ik} E_k . \quad (12.6d)$$

Ze wzorów (12.6) widać, że w celu określenia przewodnictwa kryształu musimy określić dziewięć współczynników  $\sigma_{ik}$  ( $i, k = 1, 2, 3$ ). Możemy je dla wygody zapisać w postaci macierzy kwadratowej

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} . \quad (12.7)$$

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

Dlatego, żeby zdefiniować pojęcie tensora przypomnijmy sobie najpierw regułę transformacji 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  $\vec{e}_k$

$$\alpha_{i'k} \equiv \alpha_{ki'} = (\vec{e}'_i \cdot \vec{e}_k) = \cos \angle \vec{e}'_i \vec{e}_k , \quad (12.8)$$

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  $\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3$ .

Założmy 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  $Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3$ . Przez składowe, wektor  $\vec{b}$  możemy zapisać w postaci

$$\vec{b} = b_1 \vec{e}_1 + b_2 \vec{e}_2 + b_3 \vec{e}_3 , \quad (12.9)$$

$$\vec{b} = b'_1 \vec{e}'_1 + b'_2 \vec{e}'_2 + b'_3 \vec{e}'_3 . \quad (12.10)$$

Mnożąc (12.9) skalarnie przez  $\vec{e}'_1, \vec{e}'_2, \vec{e}'_3$  i uwzględniając (12.8), oraz że

$$b'_1 = (\vec{e}'_1 \cdot \vec{b}), \quad b'_2 = (\vec{e}'_2 \cdot \vec{b}), \quad b'_3 = (\vec{e}'_3 \cdot \vec{b}), \quad (12.11)$$

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

$$b'_i = \sum_{k=1,2,3} \alpha_{i'k} b_k. \quad (12.12a)$$

Powtarzając rozumowanie dla (12.10) otrzymujemy

$$b_i = \sum_{k=1,2,3} \alpha_{ik'} b'_k. \quad (12.12b)$$

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

$$\alpha_{ik'} \alpha_{k'j} = \delta_{ij}, \quad \alpha_{ki'} \alpha_{j'k} = \delta_{i'j'}. \quad (12.13)$$

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

Rozpatrzmy dalej związek (12.6d) 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

$$j'_i = \sum_{k=1,2,3} \sigma'_{ik} E'_k. \quad (12.14)$$

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  $\sigma_{ik}$  i  $\sigma'_{ik}$  posłużmy się wzorami (12.12) przekształcenia składowych wektora. Korzystając z (12.12a) możemy zapisać

$$j'_i = \sum_{m=1,2,3} \alpha_{i'm} j_m. \quad (12.15)$$

Podstawiając (12.6d) do (12.15) znajdujemy

$$j_i' = \sum_{m=1,2,3} \alpha_{i'm} \sum_{l=1,2,3} \sigma_{ml} E_l . \quad (12.16)$$

Dalej, ze związku (12.12b) mamy

$$E_l = \sum_{k=1,2,3} \alpha_{k'l} E_k' . \quad (12.17)$$

Podstawiając (12.17) do (12.16) otrzymujemy

$$j_i' = \sum_{k=1,2,3} \left( \sum_{m=1,2,3} \sum_{l=1,2,3} \alpha_{i'm} \alpha_{k'l} \sigma_{ml} \right) \cdot E_k' . \quad (12.18)$$

Z porównania wzorów (12.14) i (12.18) wynika, że

$$\sigma_{ik}' = \sum_{m,l} \alpha_{i'm} \alpha_{k'l} \sigma_{ml} . \quad (12.19)$$

Powtarzając rozumowanie dla transformacji odwrotnej znajdziemy

$$\sigma_{ik} = \sum_{m,l} \alpha_{m'i} \alpha_{l'k} \sigma_{ml}' . \quad (12.20)$$

Prawa transformacji (12.19) i (12.20) 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

$$T_{ik}' = \sum_{m,l} \alpha_{i'm} \alpha_{k'l} T_{ml} , \quad (12.21)$$

$$T_{ik} = \sum_{m,l} \alpha_{m'i} \alpha_{l'k} T_{ml}' . \quad (12.22)$$

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

$$b_i = \sum_{k=1,2,3} \alpha_{ik} c_k \equiv \alpha_{ik} c_k , \quad (12.23a)$$

$$b_{ik} = \sum_{m,l} \alpha_{mi} \alpha_{lk} c_{ml} \equiv \alpha_{mi} \alpha_{lk} c_{ml} , \quad (12.23b)$$

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

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:

$$T'_{k_1 k_2 \dots k_n} = \alpha_{k'_1 k_1} \alpha_{k'_2 k_2} \dots \alpha_{k'_n k_n} T_{k_1 k_2 \dots k_n} \quad (12.24a)$$

$$T_{k_1 k_2 \dots k_n} = \alpha_{k'_1 k_1} \alpha_{k'_2 k_2} \dots \alpha_{k'_n k_n} T'_{k_1 k_2 \dots k_n} \quad (12.24b)$$

Tu skorzystaliśmy z konwencji sumowania Einsteina.

### Symetria własności fizycznych. Zasada Neumanna

Jak wynika z określenia tensora (patrz wzory (12.24)) 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 kryształ 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:

$$G_p \subset G_f \quad (12.25)$$

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.

Przykłady niektórych tensorów opisujących właściwości fizyczne kryształów podano w tabelicy 12.1.

Tabela 12.1. 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 elektrokaloryczny	$\Delta T = q_i \Delta E_i$
<b>B. Tensory drugiego rzędu łączące dwa wektory</b>	
Przenikalność dielektryczna	$D_i = \varepsilon_{ij} E_j$
Dielektryczna nieprzenikalność	$E_i = \eta_{ij} D_j$
Podatność dielektryczna	$P_i = \varepsilon_{ij}^{\zeta} E_j$
Przenikalność magnetyczna	$B_i = \mu_{ij} H_j$
Podatność magnetyczna	$J_i = \mu_{ij}^{\chi} H_j$
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	$r_{jk} = \gamma_{ijk} E_i E_l$

Jako przykład zastosowania zasady Neumanna udowodnimy, że własności wektorowe (efekt piroelektryczny; efekt zmiany temperatury kryształu na skutek zmiany natężenia pola

elektrycznego - efekt elektrokaloryczny; polaryzacja kryształu pod wpływem ciśnienia hydrostatycznego - efekt piezoelektryczny itp.) mogą powstać tylko w kryształach klas polarnych: 1, 2, 3, 4, 6,  $m$ ,  $mm2$ ,  $3m$ ,  $4mm$ ,  $6mm$ .

Grupa punktowa symetrii wektora polarnego jest  $\infty m$  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 (12.25) 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 (12.25) musi być skierowany tylko wzdłuż osi 2. Dla kryształów klasy  $m$  relacja (12.25) 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).

#### *Zadania do Wykładu 12*

12.1. Płytką z kryształu KDP ( $KH_2PO_4$ , grupa punktowa  $\bar{4}2m$ ) jest umieszczona w polu elektrycznym o natężeniu  $20 \text{ kV/cm}$ . 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)  $\Delta T = 0$ .

12.2. Z kryształu turmalinu ( $(Na, Ca)(Mg, Li, Al)_3 Al_6 (BO_3)(Si_6 O_{18})$ , grupa punktowa  $3m$ ) została wycięta płytka. 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:  $\epsilon_3 = 1 + \zeta_3$ ,  $E = P / \epsilon_0 \zeta_3$  ( $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ Fm}^{-1}$ ).

12.3. 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  $60^\circ$ ; 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  $\sigma$  jest liczbowo równa polaryzacji  $P$ .

12.4. Płytką z kryształu kwasu winowego ( $C_4H_6O_6$ , 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 przeciwległymi płytki. (Wartość współczynnika

piezoelektrycznego kwasu winowego wynosi  $p = -1.3 \cdot 10^{-6} \text{ Cm}^{-2} \text{ K}^{-1}$ , a tensor przenikalności dielektrycznej ma składowe:  $\varepsilon_{11} = 6.44$ ,  $\varepsilon_{22} = 5.80$ ,  $\varepsilon_{33} = 6.49$ ,  $\varepsilon_{13} = 0.005$ ).

*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,  $C = \varepsilon_0 \varepsilon S/d$  - pojemność kondensatora.

12.5. Wykazać, że składowymi głównymi tensora symetrycznego drugiego rzędu  $S_{ij}$  są trzy pierwiastki równania trzeciego stopnia względem  $\lambda$

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

zwanego *równaniem wielowym*. Kierunek osi głównej  $x'_1, x'_2, x'_3$ , odpowiadającej pierwiastkowi  $\lambda'$ , szukamy przez rozwiązanie układu równań

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

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

12.6. Udowodnić twierdzenie: 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  $T_{k_1 k_2 \dots k_n}$ .

12.7. Tensor rozszerzalności cieplnej  $\alpha_{ij}$  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  $\alpha_{ij}$  w układzie osi głównych.

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

*Wskazówka:* Skorzystać ze wzorów zadania 12.5.

12.8. Jak musimy wyciąć płytkę z kryształu kalcytu ( $\text{CaCO}_3$ , grupa punktowa  $\bar{3}m$ ; główne współczynniki rozszerzalności cieplnej są równe:  $\alpha_1 = \alpha_2 = -5.6 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ,  $\alpha_3 = 25 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ) aby przy ogrzewaniu jej grubość się nie zmieniała?

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

12.9. 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.

12.10. Macierz  $\alpha_{i'j}$  transformacji układu współrzędnych przy obrocie o kąt  $60^{\circ}$  dookoła osi  $Ox_3$  ma postać

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

Znaleźć postać tensora drugiego rzędu, określającego właściwość fizyczną kryształów układu heksagonalnego ma postać.

12.11. Między okładkami kondensatora płaskiego zaciśnięta jest płytka z gipsu ( $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ , grupa punktowa  $2/m$ ) o grubości  $0.4 \text{ cm}$ . 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:*  $C = 1.4 \cdot 10^{-12} F$ .

12.12. 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

$$\vec{E} = \vec{E}_{zew} + \vec{E}_{pol}.$$

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.

12.13. Wektor normalny do płytki z winianu sodowo-potasowego (sól Seignette'a,  $NaKC_4H_4O_6 \cdot 4H_2O$ , grupa punktowa 222, główne współczynniki rozszerzalności cieplnej są równe:  $\alpha_1 = 58.3 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ ,  $\alpha_2 = 35.5 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ ,  $\alpha_3 = -136.1 \cdot 10^{-6} K^{-1}$ ) tworzy z osiami krystalofizycznymi kąty  $30^\circ$ ,  $70^\circ$ ,  $68,6^\circ$ . Znaleźć współczynnik rozszerzalności cieplnej płytki w kierunku normalnym do jej powierzchni.

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