ИЗДАТЕЛЬСТВО
«МИР»

PHYSICAL PROPERTIES OF CRYSTALS

THEIR REPRESENTATION BY TENSORS AND MATRICES

by

J. F. NYE, M. A., Ph. D.

Lecturer in Physics in the University of Bristol

OXFORD AT THE CLARENDON PRESS

1964

Дж. Най

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

И ИХ ОПИСАНИЕ ПРИ ПОМОЩИ ТЕНЗОРОВ И МАТРИЦ

Второе издание

Перевод с английского
Л. А. ШУВАЛОВА

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»
Москва 1967

УДК 539.2

Настоящая книга, написанная известным английским кристаллографом Дж. Наем, посвящена вопросам связи физических свойств кристаллов с их симметрией. Изложены основы геометрической кристаллографии, теория электрических, магнитных, тепловых, упругих и оптических свойств кристаллов; имеются полезные задачи и упражнения. Эта книга является единственным в мировой литературе учебным пособием по современной тензорной кристаллофизике, широко используемым при изучении физики твердого тела, кристаллофизики и отдельных их разделов в ряде университетов и физико-технических вузов. Кроме того, она стала необходимым справочным руководством для специалистов по кристаллофизике и физике твердого тела,

В настоящем втором издании учтены изменения, внесенные автором при переизданиях книги в Англии.

Индекс 2-3-2.

Редакция литературы по физике

ПРЕДИСЛОВИЕ ПЕРЕВОДЧИКА

Потребности техники, открытие дифракции рентгеновских лучей в кристаллах, разработка методов рентгеноструктурного анализа и возникновение других новых методов исследования структуры твердых тел привели к тому, что кристаллография — наука, почти остановившаяся в своем развитии к началу этого века, — обрела затем как бы вторую молодость и вновь стала быстро развиваться. Однако, если ранее для кристаллографии была характерна наибольшая близость к геолого-минералогическим наукам, то теперь кристаллография тесно переплелась со многими разделами физических, химических и технических наук. Центр кристаллографии все больше смещается в сторону кристаллофизики; вместе с этим повышается роль математических методов в исследовании кристаллов, расширяются области применения кристаллов в технике — все это выдвигает новые требования к подготовке специалистов, как исследователей, так и инженеров, и вызывает необходимость в учебной литературе по кристаллофизике, кристаллохимии и структурному анализу, отвечающей современному уровню науки.

К сожалению, в имеющейся учебной литературе по кристаллографии плохо отражено изменяющееся и развивающееся содержание современной кристаллофизики. Одни учебники по кристаллографии с этой точки зрения уже устарели; другие курсы являются слишком краткими и имеют традиционно минералогический характер. Учебника же по кристаллофизике, несмотря на острую его необходимость, не появлялось со времени выхода известной книги Вустера [1]) ни в отечественной, ни в зарубежной литературе [2]).

---

[1]) N. Wooster, A text-book on crystall physics, Cambridge, 1938.

[2]) Нельзя, разумеется, не упомянуть еще фундаментальный труд Фойгта (W. Voigt, Lehrbuch der Krystallphysik, Leipzig, 1910), который сохранил до сих пор известное значение как справочное издание, подытоживающее первый этап развития кристаллофизики.

Первой и довольно удачной попыткой создания современного учебника по физической кристаллографии является предлагаемая читателю в переводе книга английского кристаллографа Дж. Ная „Физические свойства кристаллов". В основу книги положен курс лекций, читавшихся автором для студентов Кембриджского университета. По стилю изложения и содержанию эта книга является именно курсом физической кристаллографии, а не курсом физики кристаллов, так как свойства кристаллов рассматриваются в ней с кристаллографических позиций, т. е. основное внимание уделяется симметрии явлений, их связи с симметрией кристаллов, характеристическим поверхностям и т. п. (Предполагается, что читатель знаком с геометрической кристаллографией и что основные сведения о методах и результатах экспериментального исследования свойств кристаллов известны ему из общего курса физики.)

Построение курса является весьма удачным и в общем соответствует построению раздела физической кристаллографии в известном учебнике кристаллографии Шубникова, Флинта и Бокия[1]) и курса кристаллофизики, читаемого на физическом факультете МГУ. Автор во введении подробно излагает план построения книги, поэтому мы не будем на нем останавливаться. Укажем лишь, что к несомненным достоинствам книги следует отнести последовательно проведенное применение тензорного аппарата и подробное изложение основ матричного аппарата. Следует отметить так же как достоинство книги включение глав, посвященных нестационарным явлениям в кристаллах (тепло- и электропроводности и термоэлектрическим явлениям). Некоторую односторонность раздела кристаллооптики можно объяснить тем, что традиционные вопросы оптической кристаллографии (двойное лучепреломление и т. д.) автор предполагает известными читателю.

Нельзя не отметить также, что книга написана с большим педагогическим мастерством. Автор, не перегружая основного материала, выносит в приложения рассмотрение многочисленных дополнительных вопросов, заключает каждую главу очень полезными резюме, приводит много упражнений и задач, а также указывает выбор глав для первого чтения.

---

[1]) А. В. Шубников, Е. Е. Флинт, Г. Б. Бокий, Основы кристаллографии, Изд. АН СССР, М., 1940.

К сожалению, в книге имеется ряд недостатков и пробелов. Например, в главах, посвященных магнитной восприимчивости и электрической поляризации, следовало бы уделить внимание специфике ферромагнитных свойств кристаллов и более подробно рассмотреть сегнетоэлектрические свойства — эти вопросы очень важны и в теоретическом и в практическом отношении. Автор совершенно не использует и даже не упоминает понятия антисимметрии, оказавшегося весьма плодотворным для ряда разделов кристаллофизики. Без достаточных оснований автор не включил в курс вопрос о предельных группах симметрии; при этом из рассмотрения почти полностью выпали и текстуры. Автор, к сожалению, не уделил внимания применению методов теории групп, постепенно завоевывающих в кристаллофизике все более важное место.

Следует также отметить, что автору не удалось избежать неоднозначности в употреблении термина „физическое свойство", понимаемого то как количественная характеристика вещества, то как способность тела реагировать на внешнее воздействие. Нечетко также и употребление термина „тензор", трактуемого то как физическое свойство, то как математическая величина. Надо сказать, что исключить эту неоднозначность довольно трудно.

Однако следует подчеркнуть, что отмеченные недостатки отнюдь не снижают ни научной ценности книги, ни ее достоинств как учебного пособия.

Перевод книги сделан без сокращений и изменений, если не считать замены некоторых не употребляющихся в советской кристаллографической литературе терминов, что большей частью не оговаривается. Дано несколько примечаний, хотя число их мы постарались свести к минимуму.

Библиография, приводимая автором, содержит ссылки почти исключительно на книги и статьи на английском языке; это можно объяснить тем, что книга является учебником для английских студентов. В переводе отсутствие ссылок на литературу на русском языке, естественно, выглядит недостатком. Поэтому ссылки автора в ряде случаев дополнены ссылками на соответствующие курсы советских авторов, а в конце книги приведена дополнительная библиография, содержащая преимущественно литературу на русском языке. Эти дополнения отнюдь не претендуют на полноту, а приводятся лишь для облегчения ознакомления с материалом или более глубокого изучения отдельных вопросов.

Книга Дж. Ная, несомненно, найдет широкий круг читателей и будет полезным пособием не только для студентов и аспирантов (в первую очередь физиков), но и для многих научных работников и инженеров, желающих овладеть применяемыми в кристаллофизике феноменологическими методами исследования физических свойств кристаллов.

Сентябрь 1960 г.

Книга Ная и в самом деле быстро завоевала всеобщее признание как отличный учебник и как справочное руководство, необходимое для специалистов.

В Англии она уже выдержала еще два издания (в 1960 г. и 1964 г.). Первое русское издание (вышедшее в 1960 г.) сразу же стало библиографической редкостью. Настоящее второе русское издание печатается с матриц первого. Поэтому в тексте учтены лишь небольшие изменения, внесенные автором при переизданиях книги в Англии и исправлены замеченные опечатки. По этой же причине пришлось отказаться от расширения списка дополнительной литературы за счет работ, появившихся в последние годы.

Можно надеяться, что переиздание книги Дж. Ная будет с одобрением встречено быстро расширяющимся кругом читателей литературы по кристаллофизике и твердому телу.

Л. Шувалов

Декабрь 1966 г.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Цель настоящего учебника — дать систематическое описание физических свойств кристаллов в тензорной записи и объяснить таким путем, что такое тензоры и как они применяются. В данной книге не изучаются конкретные свойства кристаллов и их связь со структурой; в ней рассматривается главным образом единое представление тензорных свойств кристаллов в аспектах общих математических основ этих свойств и термодинамических соотношений между ними.

Изложение математических основ начинается с введения понятий о тензорах первого и второго рангов (часть I); затем показано, какими тензорами может быть представлено то или иное свойство. Тензоры более высокого ранга и матричный метод вводятся позднее как естественное развитие теории. Последующее изложение разделено на три части, в которых рассматриваются равновесные свойства (часть II), свойства, связанные с процессами переноса (часть III), и кристаллооптика (часть IV).

В основу настоящей книги положен курс кристаллофизики, читавшийся автором в Кембриджском университете для студентов второго курса, изучающих кристаллографию (как часть общего курса минералогии и кристаллографии). Уровень изложения в основной части книги рассчитан на студентов-физиков второго и следующего курсов, но автор имел в виду также аспирантов и научных работников в области физики твердого тела и металлургии, которым приходится использовать в своей работе элементы тензорного и матричного исчисления. Автор старался излагать математические вопросы как можно проще, особенно в первых главах, в которых детально объясняются тензорные обозначения и математические операции. В приложениях приведены необходимые для понимания основного текста сведения о теории симметрии, хотя эти сведения и не потребуются читателю, уже знакомому с симметрией кристаллов. Глава, посвященная термоэлектричеству, может оказаться несколько более трудной, чем остальные. Последнее объясняется тем, что дать удовлетворительное изложение теории термоэлектричества на уровне остальной части книги оказалось невозможным. Однако это явление настолько естественно укладывается в нашу схему рассмотрения, что было, по-видимому, правильным включить его описание в книгу.

Автор не стремился дать полный обзор опубликованных работ; в список литературы включены лишь книги, которые могут быть рекомендованы для более детального изучения вопроса, и использованные источники.

Во всей книге используется рационализированная система MKS. Такая система единиц выбрана главным образом потому, что она позволяет избежать появления неудобных множителей 4π, которые в противном случае усложняют многие формулы теории электричества и магнетизма. Вообще говоря, можно было бы использовать любую рационализированную систему, но мы остановились на системе MKS, которая обладает особыми преимуществами и очень широко применяется физиками.

Я считаю своим приятным долгом выразить благодарность д-ру Р. Эвансу и д-ру Н. Генри (факультет минералогии и петрологии Кембриджского университета), которые побудили меня написать эту книгу и критически рассмотрели первые варианты всех глав. Их советы всегда приносили мне большую пользу. Я хочу также поблагодарить других своих друзей и коллег, прочитавших и обсуждавших рукопись: проф. Ф. Франка (прочитавшего гл. I — X), проф. К. Лонсдейл (прочитавшую первый набросок глав I — III, VIII и IX) и сэра Э. Булларда. Д-р Полдер оказал мне помощь в написании гл. XII, а д-р Ф. Фуми — гл. XIV.

Эта книга была начата, когда я работал в лаборатории фирмы „Белл телефон компани" (Нью-Джерси); я очень ценю большое содействие, оказанное мне там. Особую помощь оказали мне трое моих коллег по работе в этой фирме: В. Бонд, познакомивший меня со своим неопубликованным методом „наименьших квадратов для восьмиугольного диска" и снабдивший меня численными примерами приложения матричного метода, использованными мной в § 7 гл. IX, д-р А. Холдейн, который также разрешил мне воспользоваться результатами его неопубликованных работ, приведенными на стр. 220 — 1, и прочел гл. X, и д-р К. Герринг, который оказал мне помощь при изложении вопроса об электрической и магнитной энергии.

Обозначения, использованные в таблицах матриц свойств кристаллов всех 32 кристаллографических классов, взяты с небольшими изменениями из неопубликованного „Руководства по пьезоэлектричеству" К. Ван Дайка и Г. Гордона с любезного разрешения авторов.

Некоторые упражнения, приведенные в книге, взяты непосредственно или с небольшими изменениями из сборника задач, используемого преподавателями факультета минералогии и петрологии Кембриджского университета, которым я приношу свою благодарность.

Я хотел бы выразить мою признательность д-ру В. Вустеру, ибо одной из причин, побудивших меня написать эту книгу, был тот интерес, который вызвал его курс лекций на факультете минералогии и петрологии Кембриджского университета, где я прежде работал.

Бристоль
Июль 1955 г.

Дж. Най

ВВЕДЕНИЕ

Физические свойства кристаллов описываются соотношениями между измеримыми величинами. Плотность, например, определяется из соотношения между массой и объемом. Поскольку масса и объем не зависят от направления, то плотность есть свойство, не зависящее от направления. Наоборот, такое свойство кристаллов, как удельная электропроводность, определяется соотношением между двумя величинами (напряженностью электрического поля и плотностью тока), каждая из которых характеризуется как величиной, так и направлением. Следовательно, мы можем предполагать, что физическое свойство такого типа будет зависеть от направления, в котором оно измеряется; действительно, эксперименты показывают, что электропроводность многих кристаллов меняется с направлением. В таких случаях говорят, что кристалл *анизотропен* в отношении рассматриваемых свойств.

Тогда возникает вопрос: как описывать физические свойства кристаллов, которые могут зависеть от направления, поскольку очевидно, что с помощью обычных чисел этого сделать нельзя. Кроме того, нужно знать, как связан способ описания таких свойств с симметрией кристалла. В настоящей книге даются ответы на эти вопросы и затрагиваются некоторые связанные с ними проблемы.

Электропроводность — лишь одно из многих свойств кристаллов, которые могут зависеть от направления измерения. Можно привести множество других примеров: распространение тепла, вызванное градиентом температур (теплопроводность); поляризация, возникающая в диэлектриках, помещенных в электрическое поле (диэлектрическая восприимчивость); поляризация кристаллов под действием механического напряжения (пьезоэлектричество); деформация, вызванная механическим напряжением (упругость); двойное лучепреломление под влиянием электрического поля (электрооптический эффект) и под влиянием механического напряжения (фотоупругость) и др.

В отношении многих свойств, таких, как плотность, все кристаллы изотропны. Кубические кристаллы изотропны также и в отношении еще целого ряда свойств (проводимости, показателя преломления и др.); это иногда приводит к ошибочному мнению, что кубические кристаллы изотропны в отношении любых свойств. Между тем элементы симметрии кубического кристалла не совпадают

с элементами симметрии полностью изотропного тела; так, например, кубические кристаллы анизотропны в отношении упругости, фотоупругости и ряда других свойств. Следовательно, мы должны рассматривать кубические кристаллы как *потенциально* анизотропные; тогда мы можем продолжать считать, что для *определенных* свойств эти кристаллы изотропны. Все кристаллы анизотропны в отношении каких-либо их свойств.

В настоящей книге мы будем изучать, как описываются физические свойства кристаллов. Большое число этих свойств описывается математическими величинами, называемыми *тензорами*; в дальнейшем будут рассматриваться только такие свойства. Перечень их дается в приложении 3; кроме того, чтобы читатель мог составить себе более полное представление, там же дается перечень некоторых других свойств, которые не могут быть непосредственно представлены с помощью тензоров. Одной из задач физики, безусловно, является вычисление этих тензоров для конкретных кристаллов в зависимости от их атомной и кристаллической структуры. Но это в некотором смысле следующая ступень. Здесь мы не ставим себе такой цели, а будем интересоваться больше формой и общими свойствами тензоров, чем их реальными численными значениями. Нам достаточно рассматривать кристалл, не учитывая его структуры, т. е. просто как анизотропный континуум, имеющий определенные свойства симметрии. Более того, во всех случаях, кроме одного, мы будем считать кристалл однородным, т. е. предполагать, что его свойства одинаковы во всех точках (исключение сделано для одного конкретного свойства, — термоэлектричества).

Содержание книги. Тензоры классифицируются по их *рангу*. В гл. I вводится понятие тензора и показывается, как тензоры нулевого, первого и второго рангов могут быть использованы при изучении свойств кристаллов. В гл. II содержится дальнейшее развитие математического аппарата. В гл. III—VI тензорные методы применяются к описанию различных физических свойств. В гл. VII и VIII вводятся тензоры третьего и четвертого рангов, которые используются для рассмотрения пьезоэлектрических явлений и упругости. В гл. IX содержится описание другого способа представления физических свойств кристаллов — с помощью матриц; матричное исчисление особенно удобно при выполнении численных расчетов. Все физические свойства в этих главах описываются применительно к равновесному состоянию и термодинамически обратимым изменениям. Единый подход к физическим свойствам и термодинамическим соотношениям между ними дается в гл. X. В гл. XI и XII мы переходим к изучению проводимости и термоэлектрических явлений. Последние рассматриваются после равновесных свойств потому, что они связаны с явлениями переноса, т. е. необратимы, и их термодинамика нуждается в специальном подходе. Две последние

главы, XIII и XIV, посвящены кристаллооптике, главным образом электрооптическому эффекту, явлениям фотоупругости и вращения плоскости поляризации.

Выбор глав для первого чтения. Для первого чтения книги предлагаются следующие главы, которые содержат более или менее цельное изложение предмета:

Гл. I. Основы кристаллофизики.
Гл. III. Парамагнитная и диамагнитная восприимчивости.
Гл. IV. Электрическая поляризация.
Гл. V. Тензор механических напряжений.
Гл. VI. Тензор деформаций и тепловое расширение.
Гл. VII. Пьезоэлектричество. Тензоры третьего ранга.
Гл. VIII. Упругость. Тензоры четвертого ранга.
Гл. XI. Теплопроводность и электропроводность (до конца § 4).

Часть I

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Глава I

ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОФИЗИКИ

§ 1. Скаляры, векторы и тензоры второго ранга

а) Скаляры. В физике мы часто имеем дело с такими величинами, как плотность или температура тела, которые не связаны с направлением. При определении плотности или температуры бессмысленно говорить об измерении этих величин в каком-либо конкретном направлении. Такие ненаправленные физические величины называются *скалярами*. Отметим, что значение скаляра полностью определяется заданием одного числа. Скаляры называются также *тензорами нулевого ранга*; причина подобного наименования будет разъяснена ниже.

б) Векторы. В отличие от скаляров существует другой тип физических величин, называемых *векторами*, которые могут быть определены только по отношению к направлению. Механическая сила — хорошо известный пример такой величины. Чтобы полностью определить силу, приложенную в некоторой точке, необходимо задать как ее величину, так и направление. Силу удобно изображать стрелкой определенной длины и направления.

Другими примерами векторов могут служить напряженность электрического поля в точке, момент магнитного диполя, температурный градиент в точке и т. д. В настоящей книге мы будем обозначать векторы полужирными курсивными буквами: так, $\boldsymbol{E}$ будет обозначать напряженность электрического поля в точке. Модуль или длина вектора $\boldsymbol{p}$ будет обозначаться через p.

Можно определить вектор не только заданием его величины и направления. Вместо этого можно выбрать три взаимно перпендикулярные оси Ox_1, Ox_2 и Ox_3 и задать *компоненты* вектора вдоль них. Компоненты вектора — это просто проекции вектора на данные оси. Если вектор $\boldsymbol{E}$ имеет компоненты E_1, E_2, E_3, то мы можем записать

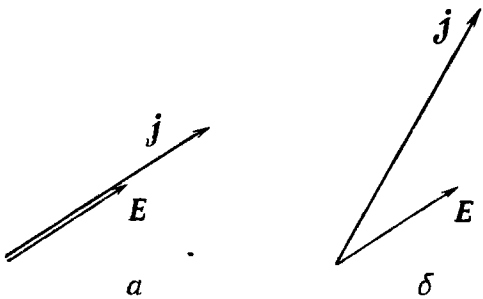
$$\boldsymbol{E} = [E_1,\ E_2,\ E_3].$$

Таким образом, когда оси координат выбраны, вектор полностью определяется заданием значений трех его компонент вдоль этих осей. Векторы называются также *тензорами первого ранга*; подробнее об этом будет сказано ниже.

Методы операций с векторами составляют предмет *векторного анализа*. В дальнейшем мы почти не будем применять векторный анализ, но время от времени будем использовать некоторые его положения. Предполагается, что читатель уже знаком с правилами скалярного и векторного произведений и понятиями градиента скаляра, дивергенции вектора и ротора вектора (см., например, [1][1])). Сводка векторных обозначений и формул дана в приложении 1.

в) Тензоры второго ранга. Теперь нам необходимо расширить понятие вектора. Рассмотрим следующий пример. Пусть электрическое поле, заданное вектором E, действует на проводник; тогда по проводнику течет ток. Плотность тока (ток через единицу поверхности, перпендикулярной направлению тока) обозначим через вектор j. Если проводник изотропен и выполняется закон Ома, то вектор j параллелен E (фиг. 1, *а*) и модуль j пропорционален модулю E. Поэтому можно записать

$$j = \sigma E, \qquad (1.1)$$



Фиг. 1. Соотношение между плотностью электрического тока j и напряженностью электрического поля E.

а — в изотропном проводнике; *б* — в анизотропном проводнике.

где σ — удельная электропроводность. Если в осях координат Ox_1, Ox_2, Ox_3 вектор $j = [j_1, j_2, j_3]$ и вектор $E = [E_1, E_2, E_3]$, то, следовательно,

$$j_1 = \sigma E_1, \quad j_2 = \sigma E_2, \quad j_3 = \sigma E_3. \qquad (1.2)$$

Каждая компонента j пропорциональна соответствующей компоненте E.

Если же проводник представляет собой кристалл, то соотношение между компонентами j и E не будет таким простым, потому что кристаллы в общем случае анизотропны в отношении электропроводности. (Кубические кристаллы образуют особую группу кристаллов, электропроводность которых изотропна; однако на время, как упомянуто во введении, мы будем считать кубические кристаллы потенциально анизотропными и подобными всем другим кристаллам, а в § 5, п. 1, покажем, что в действительности кубические кристаллы изотропны в отношении электропроводности.) Для кристаллов соотношения (1.2) заменяются следующими:

$$\begin{aligned} j_1 &= \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3, \\ j_2 &= \sigma_{21}E_1 + \sigma_{22}E_2 + \sigma_{23}E_3, \\ j_3 &= \sigma_{31}E_1 + \sigma_{32}E_2 + \sigma_{33}E_3, \end{aligned} \qquad (1.3)$$

[1]) См. также [105, 117]. — *Прим. перев.*

где σ_{11}, σ_{12}, ... — константы. Каждая компонента $\boldsymbol{j}$ теперь линейно зависит от всех трех компонент $\boldsymbol{E}$. Отсюда следует, что вектор $\boldsymbol{j}$ не совпадает по направлению с $\boldsymbol{E}$ (фиг. 1, *б*).

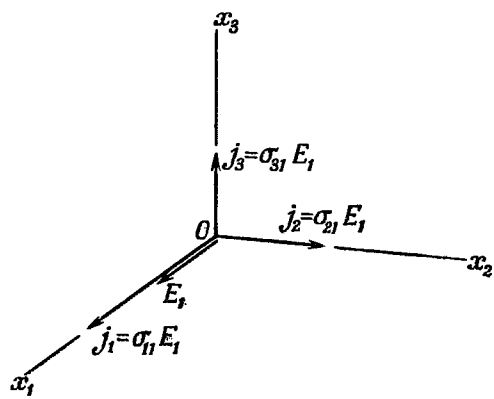
Каждый из коэффициентов σ_{11}, σ_{12}, ... в уравнениях (1.3) имеет определенный физический смысл. Например, если поле приложено вдоль x_1 [1]) (фиг. 2), то $\boldsymbol{E} = [E_1, 0, 0]$ и уравнения (1.3) принимают вид

$$j_1 = \sigma_{11} E_1,$$
$$j_2 = \sigma_{21} E_1,$$
$$j_3 = \sigma_{31} E_1.$$

Следовательно, теперь имеются компоненты $\boldsymbol{j}$ не только вдоль x_1, а также и вдоль двух других осей. Продольная компонента $\boldsymbol{j}$ определяется коэффициентом σ_{11}, а две поперечные — коэффициентами σ_{21} и σ_{31}. Аналогично, коэффициент σ_{23} определяет компоненту $\boldsymbol{j}$, параллельную x_2, когда поле приложено вдоль оси x_3.

Итак, для того чтобы определить электропроводность кристалла, мы должны задать девять коэффициентов σ_{11}, σ_{12}, ... Для удобства их можно записать в виде квадратной таблицы следующим образом:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}. \quad (1.4)$$



Фиг. 2. Компоненты плотности тока при поле, приложенном вдоль Ox_1.

Эта таблица, заключенная в квадратные скобки, обозначает *тензор второго ранга* [2]), а σ_{11}, σ_{12}, ... представляют собой *компоненты* этого тензора. Легко видеть, что первый индекс указывает строку, а второй — столбец, в котором стоит компонента. На *главной диагонали* стоят компоненты σ_{11}, σ_{22} и σ_{33}.

Сравним теперь три типа введенных величин.

а) Тензор нулевого ранга (скаляр) определяется одним числом, не зависящим от выбора осей координат.

---

[1]) Вместо Ox_1, Ox_2, Ox_3 для обозначения направления осей координат мы иногда будем использовать символы x_1, x_2, x_3, когда последние нельзя спутать с координатами точки, которые также обозначаются через x_1, x_2, x_3.

[2]) Термин *тензор* был впервые использован Фойгтом для описания механического напряжения. Термин *ранг* мы предпочитаем термину *порядок*, который будет использоваться в его обычном значении в выражениях типа „член второго порядка", „эффект второго порядка".

б) Тензор первого ранга (вектор) определяется тремя числами (компонентами), каждое из которых связано с одной из осей координат.

в) Тензор второго ранга определяется девятью числами (компонентами), каждое из которых связано с парой осей координат (взятых в определенном порядке).

Принятые нами обозначения подчеркивают это различие. Скаляр записывается без индексов (например, плотность ρ); компоненты вектора имеют по одному индексу (например, E_2); компоненты тензора второго ранга имеют по два индекса (например, σ_{12}). *Число индексов равно рангу тензора.*

В настоящей главе мы не будем иметь дело с тензорами ранга выше второго. Однако позднее при рассмотрении таких физических свойств, как пьезоэлектричество и упругость (см. гл. VII и VIII), будут введены понятия тензоров третьего и четвертого рангов, которые являются естественным расширением понятий тензоров нулевого, первого и второго рангов.

Кроме электропроводности, которая была приведена в качестве первого примера, кристаллофизика имеет дело с многими другими тензорами второго ранга. В общем случае, если свойство T связывает два вектора $\boldsymbol{p}=[p_1, p_2, p_3]$ и $\boldsymbol{q}=[q_1, q_2, q_3]$ таким образом, что

$$\begin{aligned} p_1 &= T_{11}q_1 + T_{12}q_2 + T_{13}q_3, \\ p_2 &= T_{21}q_1 + T_{22}q_2 + T_{23}q_3, \\ p_3 &= T_{31}q_1 + T_{32}q_2 + T_{33}q_3, \end{aligned} \tag{1.5}$$

ТАБЛИЦА 1

Некоторые примеры тензоров второго ранга, связывающих два вектора

Тензорное свойство	Заданный вектор	Индуцированный вектор
Удельная электропроводность	Напряженность электрического поля	Плотность электрического тока
Коэффициенты теплопроводности	Температурный градиент (отрицательный)	Плотность теплового потока
Диэлектрическая проницаемость	Напряженность электрического поля	Электрическая индукция
Диэлектрическая восприимчивость	То же	Диэлектрическая поляризация
Магнитная проницаемость	Напряженность магнитного поля	Магнитная индукция
Магнитная восприимчивость	То же	Намагниченность

где T_{11}, T_{12}, ... — константы, то говорят, что T_{11}, T_{12}, ... образуют тензор второго ранга

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix}. \tag{1.6}$$

В табл. 1 приводятся несколько примеров свойств, описываемых тензорами второго ранга.

Полный перечень всех упоминаемых в данной книге свойств кристаллов, описываемых тензорами, приведен в приложении 2 в конце книги.

1. Запись с индексами суммирования. Теперь удобно перейти к сокращенной записи тензорных соотношений. Уравнения (1.5) можно записать в виде

$$\begin{aligned} p_1 &= \sum_{j=1}^{3} T_{1j} q_j, \\ p_2 &= \sum_{j=1}^{3} T_{2j} q_j, \\ p_3 &= \sum_{j=1}^{3} T_{3j} q_j, \end{aligned} \tag{1.7}$$

или еще более компактно в виде

$$p_i = \sum_{j=1}^{3} T_{ij} q_j \qquad (i = 1,\ 2,\ 3). \tag{1.8}$$

Теперь опустим знак суммирования

$$p_i = T_{ij} q_j \qquad (i,\ j = 1,\ 2,\ 3) \tag{1.9}$$

и введем следующее правило суммирования (по Эйнштейну): *если в одном и том же члене индекс повторяется дважды, то автоматически подразумевается суммирование по этому индексу.* В соответствии с этим правилом уравнения (1.7) — (1.9) представляют собой эквивалентные способы записи первоначальных уравнений (1.5). Индекс j в уравнениях (1.9) называется *индексом суммирования* (*немым индексом*). Очевидно, совершенно безразлично, какую букву мы используем для этой цели, лишь бы она не встречалась еще

где-либо в этом же члене. Так, например,

$$p_i = T_{ik}q_k = T_{ij}q_j.$$

Здесь важно *положение* повторяющегося индекса. Индекс i в уравнениях (1.9) является *свободным индексом*[1]).

В уравнении, записанном в такой сокращенной форме, свободные индексы должны быть одинаковыми во всех членах в обеих частях, тогда как индексы суммирования должны встречаться по два раза в каждом члене. Это логически вытекает из смысла обозначений. Например, мы можем иметь уравнение такого вида

$$A_{ij} + B_{ik}C_{kl}D_{lj} = E_{ik}F_{kj};$$

здесь i и j — свободные индексы, а k и l — индексы суммирования. Отметим, что при таких обозначениях порядок сомножителей в произведении не играет роли. Например, второй член в левой части приведенного уравнения может быть записан в виде $C_{kl}B_{ik}D_{lj}$. Часто удобно располагать индексы суммирования попарно рядом, как делаем мы, однако это зависит исключительно от нашего выбора. [Позднее мы будем иметь дело с матричным исчислением (см. гл. IX), где порядок сомножителей в произведении уже важен.]

Возвращаясь теперь к уравнениям (1.9), мы видим, что они суммируют соотношение между векторами $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$ в кристалле. Соответствующее уравнение для изотропного тела будет иметь вид

$$p_i = Tq_i, \tag{1.10}$$

где T — константа. Сокращенно мы будем записывать тензор (1.6) в виде $[T_{ij}]$; однако в тех случаях, когда это не может привести к недоразумениям, мы будем, следуя обычной практике, обозначать тензор просто через T_{ij} без скобок. Таким же образом, вектор $\boldsymbol{p} = [p_1, p_2, p_3]$, если мы хотим обратить особое внимание на его компоненты, можно записать в виде $[p_i]$ или просто как p_i. Конечно, безразлично, какую букву использовать в качестве индекса в символах $[p_i]$ или p_i.

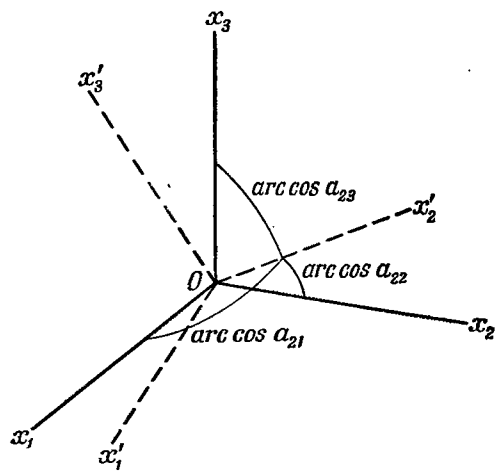
---

[1]) Расположение индексов в уравнениях (1.9) следует установленному правилу: индекс при q совпадает со *вторым* индексом у T_{ij}, так что, когда q записано после T, между индексами суммирования не стоит никакого другого индекса. Мы расположили индексы при T в уравнениях (1.5) так, чтобы обеспечить выполнение этого условия. Читатель, знакомый с книгой Вустера [96], может заметить, что там употребляется обратный традиционному порядок индексов: в обозначениях Вустера уравнения (1.9) запишутся в виде

$$p_i = T_{ji}q_j.$$

§ 2. Преобразования

В уравнениях (1.5) постоянные коэффициенты T_{ij} определяют, как изменяются три компоненты p_i при изменении значений компонент q_j. Важно отметить, что направления осей координат выбираются произвольно; они должны лишь быть взаимно ортогональны. При переходе к другой системе координат необходимо найти другую совокупность коэффициентов для уравнений (1.5). Однако *обе* совокупности коэффициентов одинаково хорошо представляют *одну и ту же* физическую величину (в нашем примере — электропроводность). Следовательно, между обеими совокупностями коэффициентов должны быть определенные соотношения. Если в некоторой выбранной системе координат заданы все коэффициенты, то тем самым рассматриваемое физическое свойство полностью определено. Поэтому можно найти коэффициенты и в любой другой системе координат, связь которой с первоначальной системой известна. Короче говоря, при изменении системы координат изменяется только способ представления данного физического свойства; само по себе свойство остается неизменным.



Фиг. 3. Преобразование осей координат.

Наша следующая задача — найти, как изменяются значения всех девяти коэффициентов T_{ij} при преобразовании системы координат. Чтобы решить эту задачу, мы должны сначала определить правила преобразования осей координат и затем рассмотреть, как преобразуются при переходе к новым осям компоненты векторов $[p_i]$ и $[q_i]$ (см. § 2, п. 1 и 2).

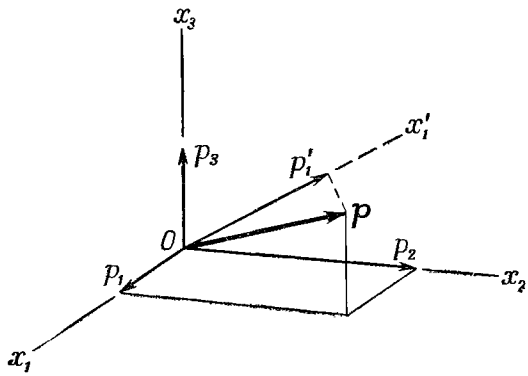
1. Преобразования осей координат. Под преобразованием осей координат мы будем понимать переход от одной системы взаимно ортогональных осей координат к другой с тем же началом. Масштабные отрезки вдоль каждой из осей всегда остаются неизменными. Обозначим первоначальную систему осей координат через x_1, x_2, x_3 и новую систему через x_1', x_2', x_3' (фиг. 3). Углы между новыми и

старыми осями определяются таблицей направляющих косинусов:

		Старые оси		
		x_1	x_2	x_3
Новые оси	x_1'	a_{11}	a_{12}	a_{13}
	x_2'	a_{21}	a_{22}	a_{23}
	x_3'	a_{31}	a_{32}	a_{33}.

(1.11)

Так, например, направляющие косинусы углов между осью x_2' и осями x_1, x_2, x_3 равны a_{21}, a_{22}, a_{23}, а направляющие косинусы углов между осью x_3 и осями x_1', x_2', x_3' равны a_{13}, a_{23}, a_{33}. Первый индекс при символе a относится к новым осям, а второй — к старым; так, a_{ij} — косинус угла между осями x_i' и x_j[1]). Таблица косинусов a_{ij}, обозначаемая в целом через (a_{ij}), есть пример *матрицы*.



Фиг. 4. Преобразование компонент вектора.

Девять коэффициентов a_{ij} не независимы друг от друга; в гл. II, § 1, п. 1, мы выведем соотношения между ними. Отметим, что $a_{ij} \neq a_{ji}$.

2. Преобразование компонент вектора. Предположим теперь, что мы имеем некоторый вектор $\boldsymbol{p}$ с компонентами p_1, p_2, p_3 в системе осей x_1, x_2, x_3 (фиг. 4). Найдем его компоненты p_1', p_2', p_3' в новой системе осей x_1', x_2', x_3'. Компонента p_1' получается проектированием p_1, p_2, p_3 (рассматриваемых как векторы, направленные соответственно вдоль x_1, x_2, x_3) на новую ось x_1', т. е.

$$p_1' = p_1 \cos \widehat{x_1 x_1'} + p_2 \cos \widehat{x_2 x_1'} + p_3 \cos \widehat{x_3 x_1'}.$$

[1]) Некоторые авторы употребляют обратный порядок индексов при a_{ij}; по этому вопросу нет единой точки зрения.

Отсюда, используя обозначения (1.11), получаем

$$p'_1 = a_{11}p_1 + a_{12}p_2 + a_{13}p_3; \tag{1.12а}$$

аналогично, находим

$$p'_2 = a_{21}p_1 + a_{22}p_2 + a_{23}p_3, \tag{1.12б}$$

$$p'_3 = a_{31}p_1 + a_{32}p_2 + a_{33}p_3. \tag{1.12в}$$

Используя сокращенные обозначения (см. § 1, п. 1), переход от компонент в старой системе координат к компонентам в новой записываем в виде

$$p'_i = a_{ij}p_j. \tag{1.13}$$

Повторяя подобные рассуждения для обратного преобразования и снова используя (1.11), получаем

$$\begin{aligned} p_1 &= a_{11}p'_1 + a_{21}p'_2 + a_{31}p'_3, \\ p_2 &= a_{12}p'_1 + a_{22}p'_2 + a_{32}p'_3, \\ p_3 &= a_{13}p'_1 + a_{23}p'_2 + a_{33}p'_3. \end{aligned} \tag{1.14}$$

В сокращенной записи связь старых компонент с новыми имеет вид

$$p_i = a_{ji}p'_j. \tag{1.15}$$

Аналогично, для другого вектора q

$$q_i = a_{ji}q'_j. \tag{1.16}$$

Заметим, что *при переходе от старой системы к новой* [*формула* (*1.13*)] *индексы суммирования стоят рядом. При обратном преобразовании* (*1.15*) *индексы суммирования отделены друг от друга.*

3. Преобразование координат точки. Координаты (x_1, x_2, x_3) точки P относительно системы осей Ox_1, Ox_2, Ox_3 являются одновременно компонентами вектора $\boldsymbol{OP}$. Из уравнений (1.12а) — (1.12в) следует, что новые координаты точки (x'_1, x'_2, x'_3) в системе Ox'_1, Ox'_2, Ox'_3 задаются уравнениями

$$\begin{aligned} x'_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3, \\ x'_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3, \\ x'_3 &= a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3, \end{aligned} \tag{1.17}$$

или

$$x'_i = a_{ij}x_j. \tag{1.18}$$

Из уравнений (1.14) получаем также

$$x_1 = a_{11}x'_1 + a_{21}x'_2 + a_{31}x'_3,$$
$$x_2 = a_{12}x'_1 + a_{22}x'_2 + a_{32}x'_3, \qquad (1.19)$$
$$x_3 = a_{13}x'_1 + a_{23}x'_2 + a_{33}x'_3,$$

или

$$x_i = a_{ji}x'_j. \qquad (1.20)$$

4. Преобразование компонент тензора второго ранга. Вернемся теперь к соотношению между векторами $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$, выраженному тремя уравнениями (1.5). Заметим еще раз, что конкретные значения коэффициентов T_{ij} в этих уравнениях зависят от выбора системы осей координат x_1, x_2, x_3. Возьмем теперь новую систему осей x'_1, x'_2, x'_3, связанных со старыми осями направляющими косинусами (1.11). Векторы $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$ в новой системе будут иметь компоненты p'_i и q'_i. Мы хотим найти соотношения между этими новыми компонентами; чтобы сделать это, используем следующую последовательность уравнений:

$$p' \xrightarrow{(1.13)} p \xrightarrow{(1.9)} q \xrightarrow{(1.16)} q';$$

здесь стрелка заменяет слова „выражается через...“ (т. е. направлена от функции к аргументу). Поскольку, как уже указывалось, в качестве индекса суммирования можно взять любую букву, уравнение (1.13) можно записать в виде

$$p'_i = a_{ik}p_k. \qquad (1.13a)$$

Используя k в качестве свободного индекса, а l в качестве индекса суммирования, перепишем уравнение (1.9) следующим образом:

$$p_k = T_{kl}q_l. \qquad (1.9a)$$

Аналогично, из уравнения (1.16), заменяя свободный индекс i на l, получаем

$$q_l = a_{jl}q'_j. \qquad (1.16a)$$

Теперь, комбинируя (1.9а), (1.13а) и (1.16а), получаем

$$p'_i = a_{ik}p_k = a_{ik}T_{kl}q_l = a_{ik}T_{kl}a_{jl}q'_j,$$

или

$$p'_i = T'_{ij}q'_j; \qquad (1.21)$$

здесь T'_{ij} — коэффициент при q'_j в i-м уравнении. Таким образом, окончательно имеем

$$T'_{ij} = a_{ik}a_{jl}T_{kl}. \qquad (1.22)$$

Уравнение (1.21) выражает связь p'_i и q'_i. Сравним его с уравнением (1.9). Мы можем сказать, что при замене осей координат девять коэффициентов T_{ij} преобразуются в девять коэффициентов T'_{ij}, подобно тому как компоненты p_i и q_i преобразуются в p'_i и q'_i. Итак, мы доказали, что соотношение между этими коэффициентами — *закон преобразования тензора второго ранга* — записывается в виде уравнения (1.22). Это очень важный результат, поэтому весьма существенно, чтобы его значение было правильно понято; мы будем подробно обсуждать его в § 3.

Было уже отмечено, что в уравнении (1.22) k и l — индексы суммирования, а i и j — свободные индексы. Об этом необходимо помнить, например, при развертывании уравнения (1.22), которое производится сначала по одному индексу, затем по другому (порядок роли не играет). Развертывая по l, получаем

$$T'_{ij} = a_{ik}a_{j1}T_{k1} + a_{ik}a_{j2}T_{k2} + a_{ik}a_{j3}T_{k3}.$$

Теперь k есть индекс суммирования в каждом члене. Следовательно, дальнейшее развертывание дает

$$T'_{ij} = a_{i1}a_{j1}T_{11} + a_{i1}a_{j2}T_{12} + a_{i1}a_{j3}T_{13} + a_{i2}a_{j1}T_{21} + a_{i2}a_{j2}T_{22} + a_{i2}a_{j3}T_{23} + a_{i3}a_{j1}T_{31} + a_{i3}a_{j2}T_{32} + a_{i3}a_{j3}T_{33}. \quad (1.23)$$

Каждой паре значений i и j соответствует одно такое уравнение. Легко видеть, что во всех членах расположение индексов, определяемое уравнением (1.22), сохраняется (например, второй и пятый индексы всегда одинаковы). Целесообразность обозначений с индексами суммирования теперь очевидна, потому что уравнение (1.22) представляет собой совокупность девяти уравнений, каждое из которых имеет девять членов в правой части.

Уравнение, выражающее старые компоненты тензора через новые, может быть получено из обратного преобразования, которое, как легко видеть, задается такой же самой таблицей a_{ij}, но с индексами, стоящими в обратном порядке. В результате имеем

$$T_{ij} = a_{ki}a_{lj}T'_{kl}. \quad (1.24)$$

Предоставляем читателю в качестве упражнения доказать уравнение (1.24) из последовательности уравнений

$$p \to p' \to q' \to q,$$

где стрелка заменяет слова „выражается через ...“.

Следующее правило облегчает запоминание: *в преобразовании (1.22), которое выражает новые компоненты через старые, индексы суммирования стоят как можно ближе друг к другу, в обратном же преобразовании (1.24), наоборот, они стоят как можно дальше друг от друга.*

Уравнения (1.22) и (1.24) можно сравнить с законами преобразования вектора (1.13) и (1.15). Мы повторно приводим эти законы в табл. 2, куда включен также закон преобразования скаляра φ. Для полноты здесь приведены также законы преобразования тензоров третьего и четвертого рангов, однако последние будут обсуждаться только в гл. VII и VIII. Табл. 2 может быть неограниченно продолжена для тензоров высшего ранга.

Эти законы преобразования имеют фундаментальное значение и, как мы увидим в § 3, могут быть использованы для строгого определения тензора. Сходство между ними является причиной отнесения скаляров и векторов к тензорам.

ТАБЛИЦА 2

Законы преобразования тензоров

Наименование	Ранг тензора	Закон преобразования	
		новые компоненты через старые	старые компоненты через новые
Скаляр	0	$\varphi' = \varphi$	$\varphi = \varphi'$
Вектор	1	$p_i' = a_{ij} p_j$ (1.13)	$p_i = a_{ji} p_j'$ (1.15)
—	2	$T_{ij}' = a_{ik} a_{jl} T_{kl}$ (1.22)	$T_{ij} = a_{ki} a_{lj} T_{kl}'$ (1.24)
—	3	$T_{ijk}' = a_{il} a_{jm} a_{kn} T_{lmn}$	$T_{ijk} = a_{li} a_{mj} a_{nk} T_{lmn}'$
—	4	$T_{ijkl}' = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{lp} T_{mnop}$	$T_{ijkl} = a_{mi} a_{nj} a_{ok} a_{pl} T_{mnop}'$

5. Закон преобразования произведения координат. Мы нашли (см. § 2, п. 2), что закон преобразования тензора первого ранга

$$p_i' = a_{ij} p_j \tag{1.13}$$

одинаков с законом преобразования координат точки

$$x_i' = a_{ij} x_j. \tag{1.18}$$

Аналогично, закон преобразования тензора второго ранга совпадает с законом преобразования *произведения* координат. Это можно доказать следующим образом.

Рассмотрим произведения $x_i' x_j'$, образованные координатами x_i' некоторой точки в системе осей Ox_i'. Координаты этой же точки в системе осей Ox_i будут x_l. С помощью уравнений (1.18) произведения $x_i' x_j'$ могут быть выражены через x_l. При этом получается выражение

$$x_i' x_j' = a_{ik} x_k a_{jl} x_l = a_{ik} a_{jl} x_k x_l, \tag{1.25}$$

связывающее произведения старых координат с произведениями новых координат. Читатель может проверить уравнение (1.25), взяв развернутые уравнения (1.17) и выписав полностью выражение для какого-либо произведения, скажем $x_1'x_2'$. Как закон преобразования уравнение (1.25) формально совпадает с уравнением (1.22); поэтому можно сказать, что *компонента тензора T_{ij} преобразуется так же, как произведение x_ix_j*. К этому утверждению следует добавить одно ограничение. Записав правую часть уравнения (1.25) в развернутой форме, можно сгруппировать попарно члены с $k \neq l$; например,

$$a_{i1}a_{j2}x_1x_2 + a_{i2}a_{j1}x_2x_1 = (a_{i1}a_{j2} + a_{i2}a_{j1})\,x_1x_2.$$

Соответствующая группировка членов в уравнении (1.22) возможна только тогда, когда $T_{kl} = T_{lk}$ (это будет иметь место в случае симметричности тензора; см. § 3, п. 2). Вообще говоря, произведения координат преобразуются подобно компонентам тензора при условии, что группировка членов не произведена, т. е. учтено различие x_1x_2 и x_2x_1 и т. д.

Аналогия между компонентами тензора и произведениями координат распространяется и на тензоры более высокого ранга, чем второй (см. гл. VII и VIII). Мы будем широко пользоваться этим, анализируя влияние симметрии кристалла на компоненты тензора.

§ 3. Определение тензора

Важность приведенных в табл. 2 законов преобразования тензоров состоит в том, что они могут быть использованы в качестве определений. *Определим* теперь вектор как величину, которая в некоторой системе координат x_i имеет три компоненты p_i, преобразующиеся согласно уравнениям (1.13). Исследуем это определение более внимательно [34]. Мы имеем три числа: p_1, p_2, p_3, которые связываем с некоторой системой координат. Что произойдет с этими числами при изменении системы координат? Если бы мы больше ничего не задали, то такой вопрос был бы бессмысленным: коль скоро с этими числами не производится никаких действий, то при преобразовании осей они останутся без изменений. Если же эти три числа рассматривать как компоненты некоторой физической величины (например, электрического поля) вдоль осей координат, то тогда мы имеем правило, указывающее, как найти эти числа при любом заданном положении осей координат. Вполне законно возникает вопрос: преобразуются ли взятые нами три числа согласно уравнению (1.13) или нет? Существенно иметь в виду, что компоненты вектора есть компоненты *физической величины*, которая остается неизменной, тогда как оси координат могут изменяться.

Аналогично, *определим* теперь тензор второго ранга как физическую величину, описываемую в некоторой системе координ-

нат x_i девятью компонентами T_{ij}, которые преобразуются согласно уравнениям (1.22). Говоря о преобразовании компонент, мы предполагаем, что имеется независимый от уравнений (1.22) способ, позволяющий найти компоненты в любой заданной системе координат. Так, для нахождения компонент электропроводности (см. пример на стр. 18) можно измерить компоненты плотности тока j, когда поле E направлено поочередно вдоль каждой из осей [см. уравнение (1.3)]. Тензор второго ранга, подобно вектору, описывает некоторую *физическую величину* (в нашем случае электропроводность), которая не зависит от сделанного нами выбора конкретной системы координат. Повторяем, что при замене осей физическая величина не изменяется, а изменяется только наш способ ее представления. Подобные определения, основанные на свойствах преобразования, применимы к тензорам любого ранга.

Теперь возникает вопрос: как убедиться, что уравнение (1.22) действительно является определением? Для этого достаточно сказать, что если в произвольной системе координат девять коэффициентов T_{ij} линейно связывают компоненты векторов p_i и q_i, то при переходе от одной системы координат к другой T_{ij} преобразуются согласно (1.22) и, *следовательно*, образуют тензор второго ранга.

1. Различие между преобразованиями матрицы (a_{ij}) и тензора $[T_{ij}]$. Хотя и (a_{ij}) и $[T_{ij}]$ представляют собой таблицы из девяти коэффициентов, это в сущности единственное сходство между ними. В других отношениях они совершенно различны. Последнее ясно из их определений: (a_{ij}) — таблица коэффициентов, связывающих две системы осей координат; $[T_{ij}]$ — физическая величина, которая в одной заданной системе осей координат представляется девятью числами. Таким образом, (a_{ij}) связывает две системы осей координат, тогда как $[T_{ij}]$ относится только к одной системе. Нельзя, например, говорить о преобразовании матрицы (a_{ij}) к другой системе осей координат, так как это выражение не имеет никакого смысла.

2. Симметричные и антисимметричные тензоры. Говорят, что тензор $[T_{ij}]$ является *симметричным*, если $T_{ij} = T_{ji}$. Так,

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 & -3 \\ 2 & 8 & 4 \\ -3 & 4 & 12 \end{bmatrix}$$

есть симметричный тензор.

Говорят, что тензор $[T_{ij}]$ является *антисимметричным*, или *кососимметричным*, если $T_{ij} = -T_{ji}$. Это означает, что $T_{11} = T_{22} = T_{33} = 0$. Так, например,

$$\begin{bmatrix} 0 & -\gamma & \beta \\ \gamma & 0 & -\alpha \\ -\beta & \alpha & 0 \end{bmatrix}$$

есть типичный антисимметричный тензор (причина указанного распределения знаков минус в таблице будет выяснена в гл. II, § 2).

Важно отметить, что свойство симметричности и антисимметричности тензора не зависит от выбора осей координат, т. е. если $T_{ij} = \pm T_{ji}$, то и $T'_{ij} = \pm T'_{ji}$. Доказательство этого достаточно просто, и мы предоставляем его читателю.

§ 4. Характеристическая поверхность второго порядка [1])

Мы видели на примерах, приведенных в табл. 1, что многие свойства кристаллов, значения которых зависят от направления их измерения, представляются тензорами второго ранга. Другие свойства кристаллов описываются тензорами более высокого или более низкого ранга (а некоторые вообще не тензорами). Найдем теперь геометрическую интерпретацию тензора второго ранга.

Рассмотрим уравнение

$$S_{ij}x_i x_j = 1, \tag{1.26}$$

где S_{ij} — коэффициенты; мы не будем пока говорить, что S_{ij} — компоненты тензора. Выполняя суммирование по i и по j, получаем из (1.26)

$$S_{11}x_1^2 + S_{12}x_1x_2 + S_{13}x_1x_3 + S_{21}x_2x_1 + S_{22}x_2^2 + S_{23}x_2x_3 + \\ + S_{31}x_3x_1 + S_{32}x_3x_2 + S_{33}x_3^2 = 1.$$

Положив $S_{ij} = S_{ji}$ и объединив подобные члены, получим

$$S_{11}x_1^2 + S_{22}x_2^2 + S_{33}x_3^2 + 2S_{23}x_2x_3 + 2S_{31}x_3x_1 + 2S_{12}x_1x_2 = 1.$$

Это выражение есть общее уравнение поверхности второго порядка (квадрики) с центром, находящимся в начале координат. Эта поверхность в общем случае будет эллипсоидом или гиперболоидом [2]).

Уравнение (1.26) может быть преобразовано к новым осям Ox'_i с помощью уравнений (1.20):

$$x_i = a_{ki}x'_k \quad \text{и} \quad x_j = a_{lj}x'_l.$$

При этом получается уравнение

$$S_{ij}a_{ki}a_{lj}x'_k x'_l = 1,$$

---

[1]) Далее автор везде использует термин „квадрика", а не „поверхность второго порядка". Так как термин „квадрика" не получил пока распространения в отечественной кристаллографической литературе, он при переводе заменен термином „поверхность второго порядка", а термин „характеристическая квадрика" — термином „характеристическая поверхность второго порядка", или просто „характеристическая поверхность" (когда это не может вызвать недоразумений). — *Прим. перев.*

[2]) Свойства поверхностей второго порядка см. в книгах [6] или [36]. (См. также [112]. — *Прим. перев.*)

которое может быть записано в виде

$$S'_{kl}x'_k x'_l = 1,$$

где

$$S'_{kl} = a_{ki}a_{lj}S_{ij}.$$

Если сравнить это выражение с уравнением преобразования тензора второго ранга

$$T'_{ij} = a_{ik}a_{jl}T_{kl}, \tag{1.22}$$

то легко видеть их идентичность в смысле относительного положения индексов, а только это и имеет значение.

Поскольку мы положили $S_{ij} = S_{ji}$, то на основании полученного результата можно сказать, что *коэффициенты S_{ij} поверхности второго порядка (1.26) преобразуются подобно компонентам симметричного тензора второго ранга.* Таким образом, законы преобразования симметричного тензора второго ранга совпадают с законами преобразования поверхностей второго порядка; чтобы найти, как преобразуются компоненты такого тензора, достаточно рассмотреть преобразование соответствующей поверхности второго порядка. Поэтому поверхность (1.26) называется *характеристической поверхностью второго порядка* для тензора S_{ij} [1]).

Все тензоры второго ранга, приведенные в табл. 1, симметричны; вообще все тензоры второго ранга, описывающие свойства кристаллов, упоминаемые в данной книге, симметричны, за исключением одного — термоэлектрического тензора. Так, например, для тензора удельной электропроводности имеем

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \tag{1.27}$$

Доказательство симметричности тензора всегда включает термодинамическое рассмотрение, и мы отложим его до последующих глав [2]). Пока отметим, что это заключение не является очевидным. Для случая электропроводности, например, оно означает, что коэффициент электропроводности σ_{21}, определяемый из измерения компоненты $\boldsymbol{j}$ в направлении x_2 при приложении поля $\boldsymbol{E}$ вдоль x_1, равен коэффициенту σ_{12}, определенному из измерения компоненты $\boldsymbol{j}$ в направлении x_1 при поле $\boldsymbol{E}$, приложенном вдоль x_2.

Сформулируем кратко полученный нами результат: *характеристическая поверхность второго порядка может быть использо-*

---

[1]) Физическая размерность x_1, x_2, x_3 в уравнении (1.26) определяется размерностью S_{ij} и равна $1/\sqrt{(\text{Размерность } S_{ij})}$. Это не должно вызывать затруднений, если вспомнить, что в физике вообще принято строить графики, в которых вдоль осей откладываются не простые числа, а масса, скорость, температура и т. д.

[2]) Термодинамически обратимые свойства рассматриваются на стр. 78—80, 96 и 222, необратимые — на стр. 246—53.

вана для описания любого симметричного тензора второго ранга и, в частности, для описания любого свойства кристаллов, представляемого таким тензором.

1. Главные оси. Важным свойством поверхностей второго порядка является то, что они обладают *главными осями* — тремя лежащими под прямыми углами друг к другу направлениями, по отношению к которым (если их выбрать за оси координат) общее уравнение поверхности второго порядка (1.26) приводится к упрощенной форме

$$S_1x_1^2+S_2x_2^2+S_3x_3^2=1. \tag{1.28}$$

Мы не будем здесь доказывать, что преобразование, приводящее к такому упрощению, существует [1]), но в гл. II, § 3 покажем, как можно найти направления осей и соответствующие им масштабные отрезки (практический метод описывается в гл. IX, § 7, п. 2).

Симметричный тензор второго ранга, так же как и любая поверхность второго порядка, при приведении к главным осям принимает простейшую форму. Так, когда тензор

$$[S_{ij}]=\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{31} \\ S_{12} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{23} & S_{33} \end{bmatrix}$$

преобразован к его главным осям, то он записывается в виде

$$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix};$$

эта таблица образована коэффициентами уравнения (1.28). Числа S_1, S_2, S_3 называются *главными компонентами* тензора $[S_{ij}]$ или свойства, которое он описывает.

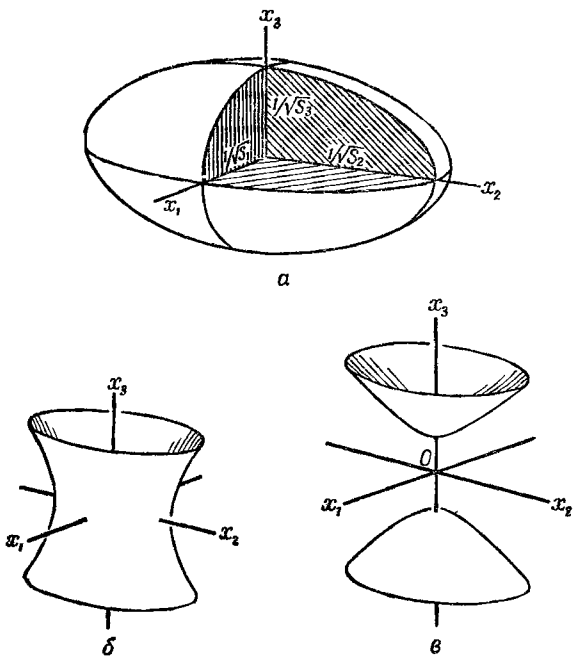
Из сравнения (1.28) с каноническим уравнением

$$\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}+\frac{z^2}{c^2}=1$$

ясно, что полуоси характеристической поверхности второго порядка имеют длину $1/\sqrt{S_1}$, $1/\sqrt{S_2}$, $1/\sqrt{S_3}$ (фиг. 5, *а*). Когда величины S_1, S_2 и S_3 положительны, поверхность (1.28) представляет собой эллипсоид (фиг. 5, *а*). Если два коэффициента положительны, а один отрицателен, поверхность (1.28) является однополостным гиперболоидом (фиг. 5, *б*); нетрудно видеть, что два главных сечения этой поверхности (главные сечения — это центральные сечения, перпендикулярные главным осям) — гиперболы, а одно — эллипс. Если один

[1]) Строгое доказательство существования главных осей см. в книге Эйзенхарта [36].

коэффициент положителен, а два отрицательны, поверхность (1.28) представляет собой двуполостный гиперболоид (фиг. 5, *в*); при этом два главных сечения — гиперболы, а одно — мнимый эллипс. Если все три коэффициента отрицательны, то поверхность есть мнимый эллипсоид. (У симметричного тензора, отнесенного к произвольным осям, число



Фиг. 5. Характеристические поверхности для тензора $[S_{ij}]$.

а — эллипсоид; *б* — однополостный гиперболоид; *в* — двуполостный гиперболоид.

независимых компонент равно шести. Если тензор приведен к его главным осям, то число независимых компонент уменьшается до трех; тем не менее число „степеней свободы" остается равным шести, так как три независимые величины нужны для определения направления осей и три — для задания значений главных компонент.)

2. Упрощение уравнений при приведении к главным осям. Вернемся теперь к уравнению (1.9), в котором тензор $[T_{ij}]$ связывает вектор $\boldsymbol{p}$ с вектором $\boldsymbol{q}$. Если $[T_{ij}]$ — симметричный тензор, мы можем заменить его на $[S_{ij}]$ и записать

$$p_i = S_{ij} q_j. \tag{1.29}$$

Если теперь привести $[S_{ij}]$ к главным осям, то уравнение (1.29) в развернутом виде принимает вид

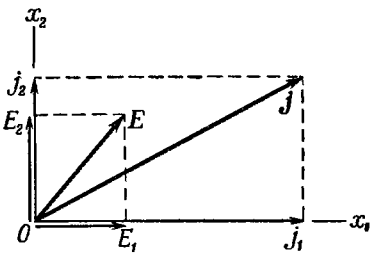
$$p_1 = S_1 q_1, \quad p_2 = S_2 q_2, \quad p_3 = S_3 q_3 \tag{1.30}$$

[ср. эти уравнения с уравнениями (1.5)].

Чтобы проиллюстрировать результаты такого упрощения, рассмотрим снова пример с электропроводностью (см. стр. 18). Мы имеем

$$j_1 = \sigma_1 E_1, \quad j_2 = \sigma_2 E_2, \quad j_3 = \sigma_3 E_3, \tag{1.31}$$

где σ_1, σ_2, σ_3 — главные компоненты тензора удельной электропроводности, или сокращенно *главные электропроводности*. Если поле $\boldsymbol{E}$ параллельно оси Ox_1, так что $E_2 = E_3 = 0$, то $j_2 = j_3 = 0$. Следовательно, в этом случае вектор $\boldsymbol{j}$ также параллелен оси Ox_1. Таким образом, когда поле $\boldsymbol{E}$ направлено вдоль любой из трех главных осей, ситуация особенно проста: вектор $\boldsymbol{j}$ параллелен $\boldsymbol{E}$, однако вдоль каждой из осей электропроводность различна.



Фиг. 6. Двумерная схема, показывающая, что при $\sigma_1 \neq \sigma_2$ векторы $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{E}$ не параллельны.

Рассмотрим теперь случай, когда поле $\boldsymbol{E}$ не параллельно главным осям. Предположим, что $\boldsymbol{E} = [E_1, E_2, 0]$. Тогда $j_1 = \sigma_1 E_1$, $j_2 = \sigma_2 E_2$, $j_3 = 0$. На фиг. 6 показано соотношение между $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{E}$ для этого случая. Зная вектор $\boldsymbol{E}$, можно найти E_1 и E_2; умножая эти компоненты на σ_1 и σ_2, получаем j_1 и j_2, а по ним строим вектор $\boldsymbol{j}$. Непараллельность векторов $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{E}$ непосредственно следует из того факта, что $\sigma_1 \neq \sigma_2$. В трехмерном случае (при $E_3 \neq 0$) вектор $\boldsymbol{j}$, конечно, тоже не параллелен $\boldsymbol{E}$. На фиг. 6 $\sigma_1 > \sigma_2$, поэтому Ox_1 можно считать „направлением легкой проводимости" и $\boldsymbol{j}$ имеет тенденцию наклоняться в сторону этой оси.

§ 5. Влияние симметрии кристаллов на их свойства

Оставим на время обсуждение свойств тензоров и остановимся на свойствах кристаллов. Рассмотрим вопрос о том, как симметрия кристалла связана с симметрией его физических свойств. Ключом к этому вопросу является фундаментальный постулат кристаллофизики, известный под названием *принципа Неймана*. Этот принцип можно сформулировать следующим образом.

Элементы симметрии любого физического свойства кристалла должны включать элементы симметрии точечной группы кристалла.

Точечная группа кристалла есть группа макроскопических элементов симметрии, которыми обладает его структура. Это понятие лежит в основе разделения кристаллов на 32 класса. В дальнейшем предполагается, что читатель знаком с понятиями „элементы симметрии", „кристаллографический класс" и „кристаллографическая система". Обзор этих и других основных понятий теории симметрии кристаллов дается в приложении 2, в котором, кроме того, приведена таблица элементов симметрии всех 32 кристаллических классов (см. табл. 21).

Отметим следующее существенное обстоятельство: принцип Неймана не утверждает, что элементы симметрии физического свойства кристалла одинаковы с элементами симметрии его точечной группы. Принцип Неймана говорит только, что элементы симметрии физического свойства должны *включать* элементы симметрии точечной группы. Физическое свойство может обладать и часто обладает более высокой симметрией, чем точечная группа кристалла. Как пример выполнения принципа Неймана вспомним тот факт, что кубические кристаллы оптически изотропны. Данное физическое свойство в этом случае полностью изотропно и, таким образом, конечно, обладает элементами симметрии всех кубических точечных групп, как этого требует принцип Неймана. Рассмотрим в качестве другого примера оптические свойства кристалла класса $3m$ тригональной системы, скажем турмалина. Известно, что изменение показателя преломления с направлением изображается индикатрисой, которая в данном случае представляет собой эллипсоид вращения вокруг оси третьего порядка (оптической оси). Этот эллипсоид обладает вертикальной осью третьего порядка и тремя вертикальными плоскостями симметрии, имеющимися у точечной группы $3m$, как этого и требует принцип Неймана. Однако эллипсоид также обладает центром симметрии и некоторыми другими элементами симметрии, которых нет у точечной группы $3m$, что разрешается принципом Неймана.

Рассмотрим более внимательно, что понимается под „симметрией физических свойств". Физическое свойство кристалла — это соотношение между определенными измеримыми величинами, характеризующими кристалл. Например, упругость есть некоторое соотношение между однородным напряжением и однородной деформацией в кристалле. Предположим, что мы теперь желаем знать, обладает ли данное физическое свойство определенными элементами симметрии или нет. Сначала мы измеряем это свойство по отношению к некоторым фиксированным осям. Затем действуем предполагаемым элементом симметрии на кристалл[1]) и снова исследуем соотношение между

[1]) Философски настроенный читатель может возразить, что мы не можем в действительности сделать этого для операций симметрии, включающих отражение или инверсию. Это правильно, и в этой мере наше определение не строго. Однако, когда мы связываем физику с математической теорией симметрии, трудно избежать использования таких невыполнимых операций.

измеряемыми величинами, выполняя измерения в тех же самых направлениях, что и раньше, относительно тех же фиксированных осей. Если это соотношение не изменилось, мы говорим, что рассматриваемое свойство в данном конкретном кристалле обладает предполагавшимся элементом симметрии.

Очевидно, что не имеет значения, действуем ли мы элементом симметрии на кристалл или на измеряемые величины. Так, например, если мы измерили упругие свойства кристалла и хотим выяснить, являются ли они центросимметричными, то мы можем произвести инверсию напряжений и деформаций вместо инверсии кристалла. Если мы произведем инверсию деформаций и напряжений, то они совершенно не изменятся, так как однородные напряжения и деформации уже центросимметричны. Следовательно, измерения дадут такой же результат, как и до инверсии, т. е. характеризующие упругость константы не изменятся. Так будет при любой симметрии кристалла. Поэтому мы говорим, что упругость (описываемая тензором четвертого ранга) есть центросимметричное свойство.

Все свойства, описываемые тензорами второго ранга, центросимметричны. В самом деле, если мы возьмем определяющее уравнение $p_i = T_{ij}q_j$ и изменим направления $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$ на противоположные, то знаки всех компонент p_i и q_i изменятся. Уравнению будут тогда по-прежнему удовлетворять те же самые значения T_{ij}, что и прежде, и поэтому количественные характеристики свойства, выражаемого тензором T_{ij}, не изменятся.

Таким образом, физическое свойство может иметь определенную собственную симметрию, которая проявляется независимо от того, какой симметрией обладает кристалл. Вместе с тем в соответствии с принципом Неймана физическое свойство кристалла должно иметь также и все те элементы симметрии, которыми обладает кристалл. Так, например, упругость гексагонального кристалла не только центросимметрична, но имеет также все элементы симметрии этого кристалла.

1. Влияние симметрии кристалла на его свойства, описываемые тензорами второго ранга. Положения, изложенные выше, применимы ко всем физическим свойствам кристалла. Вернемся теперь к свойствам, выражаемым симметричными тензорами второго ранга. Эти тензоры, как мы уже видели, имеют шесть независимых компонент, когда они отнесены к произвольной системе осей. Однако, когда кристалл обладает симметрией, число независимых компонент уменьшается. Легче всего исследовать этот вопрос, рассматривая характеристическую поверхность второго порядка. Уравнение такой поверхности содержит столько же независимых коэффициентов, сколько независимых компонент имеет симметричный тензор второго ранга, и эта поверхность полностью характеризует описываемое тензором свойство. Симметрия поверхности совпадает с симметрией данного свойства кристалла. При этом следует считать, что характеристическая

ТАБЛИЦА 3

Влияние кристаллографической симметрии на свойства, описываемые симметричными тензорами второго ранга

Оптическая классификация	Системы	Характеризующая симметрия *	Вид характеристической поверхности и ее ориентация	Число независимых коэффициентов	Тензор, приведенный к осям принятой ориентации **
Изотропная среда	Кубическая	Четыре оси третьего порядка	Сфера	1	$\begin{bmatrix} S & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 \\ 0 & 0 & S \end{bmatrix}$
Одноосные кристаллы	Тетрагональная Гексагональная Тригональная	Одна ось четвертого порядка Одна ось шестого порядка Одна ось третьего порядка	Поверхность вращения вокруг главной оси симметрии $x_3\,(z)$	2	$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_1 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}$
Двуосные кристаллы	Орторомбическая	Три взаимно перпендикулярные оси второго порядка; осей высшего порядка нет	Произвольная поверхность второго порядка с осями x_1, x_2, x_3, параллельными осям второго порядка x, y, z	3	$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}$
	Моноклинная	Одна ось второго порядка	Произвольная поверхность второго порядка с одной осью x_2, параллельной оси второго порядка y	4	$\begin{bmatrix} S_{11} & 0 & S_{31} \\ 0 & S_{22} & 0 \\ S_{31} & 0 & S_{33} \end{bmatrix}$
	Триклинная	Центр симметрии или отсутствие симметрии	Произвольная поверхность второго порядка. Положение относительно кристаллографических осей не фиксировано	6	$\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{31} \\ S_{12} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{23} & S_{33} \end{bmatrix}$

* Оси симметрии могут быть поворотными или инверсионными; см. также стр. 335.

** Ориентация осей x_1, x_2, x_3 поверхности второго порядка по отношению к кристаллографическим осям x, y, z и элементам симметрии указана в табл. 4. Добавочные замечания о выборе систем координат см. в приложении 3.

поверхность имеет фиксированную ориентацию по отношению к кристаллу. Рассмотрим, как связана характеристическая поверхность с элементами симметрии кристалла.

Исходя из принципа Неймана, мы должны убедиться, что каждый элемент симметрии кристалла может быть также найден у характеристической поверхности. Сделаем это теперь поочередно для каждого класса кристаллов. (Эта задача аналогична рассматриваемой в кристаллооптике задаче о связи индикатрисы с симметрией кристалла.) Результаты сведены в табл. 3. Составление таблицы упрощается потому, что ограничения, накладываемые симметрией кристалла, оказываются одинаковыми в пределах любой отдельной *кристаллографической системы*. Иначе обстоит дело в случаях несимметричных тензоров второго ранга (см. стр. 271), тензоров первого ранга (см. стр. 100) или тензоров, имеющих ранг выше второго (см. стр. 152, 172, 294).

а) Кубическая система. Характеристическая поверхность второго порядка имеет четыре оси третьего порядка только в том случае, когда она является сферой. Тогда она обладает всеми элементами симметрии, которые могут иметься у кубических кристаллов (см. табл. 21). Соответственное свойство полностью определено, когда задан радиус сферы. При этом не существенно, к какой системе осей отнесен тензор, так как он имеет один и тот же вид при любом выборе осей координат.

б) Группа одноосных систем (тетрагональная, гексагональная и тригональная). Произвольная поверхность второго порядка обладает тремя поворотными осями второго порядка, лежащими под прямыми углами друг к другу, тремя плоскостями симметрии, перпендикулярными осям второго порядка, и центром симметрии (симметрия орторомбического класса *mmm*). Поверхность второго порядка может обладать осью симметрии четвертого, шестого или третьего порядков лишь в том единственном случае, когда такая ось является главной осью, а поверхность второго порядка — поверхностью вращения вокруг нее. Поверхность второго порядка будет тогда автоматически обладать всеми остальными элементами симметрии, которые имеются у различных классов этих трех систем: поворотными осями второго порядка, перпендикулярными главным осям, и плоскостями симметрии, параллельными и перпендикулярными главным осям. Для полного определения характеристической поверхности второго порядка достаточно задать два числа — длины большой и малой полуосей. Для записи компонент тензора выберем ось x_3 параллельной главной оси симметрии кристалла. Все эти системы оптически одноосны.

в) Орторомбическая система. Произвольная поверхность второго порядка уже обладает тремя взаимно перпендикулярными осями второго порядка; мы должны просто расположить эти оси параллельно кристаллографическим осям второго порядка. Более того, поскольку симметрия такой поверхности второго порядка совпадает с симметрией голоэдрического класса *mmm*, характеристическая по-

верхность второго порядка обладает всеми элементами симметрии, которые могут быть у классов орторомбической системы. Характеристическая поверхность полностью определяется длинами трех осей. Если тензор приведен к кристаллографическим осям x, y, z, то он принимает форму, указанную в табл. 3.

г) Моноклинная система. Здесь мы должны направить одну из осей второго порядка произвольной поверхности второго порядка параллельно кристаллографической оси второго порядка; тогда поверхность второго порядка, как легко видеть, будет обладать всеми элементами симметрии, какие можно найти у классов моноклинной системы. Если не считать одной фиксированной оси, то характеристическая поверхность может принимать любую ориентацию. Чтобы определить длины осей характеристической поверхности, а тем самым и ее форму, необходимо задать три числа; для определения ее ориентации нужно задать еще одно число (например, угол, на который указанная поверхность должна быть повернута из некоторого произвольного положения). Расположим оси характеристической поверхности так, чтобы ось x_2 была параллельна кристаллографической оси второго порядка[1]). Тогда в уравнение поверхности второго порядка не будут входить другие члены, содержащие x_2, кроме члена с x_2^2. Число независимых компонент тензора (коэффициентов характеристической поверхности) будет, следовательно, равно 4, как указано в табл. 3. Конечно, перейдя к главным осям, можно уменьшить число компонент до трех, но тогда необходимо добавочное число, указывающее расположение главных осей по отношению к кристаллографическим осям x или z. Смысл этого дополнения становится ясным, если учесть, что для различных свойств главные оси, перпендикулярные оси второго порядка, будут иметь в одном и том же моноклинном кристалле различное направление. Подобное явление имеет место в кристаллооптике: когда моноклинный кристалл нагревается, то главные оси индикатрисы поворачиваются вокруг оси y; они поворачиваются также при изменении длины волны, что приводит к дисперсии угла оптических осей.

д) Триклинная система. Класс 1, который полностью асимметричен, очевидно, не налагает никаких ограничений на характеристическую поверхность второго порядка. То же самое справедливо и для класса $\bar{1}$, потому что характеристическая поверхность уже обладает центром симметрии. Следовательно, число независимых констант, необходимых для определения физического свойства, равно числу независимых компонент тензора. Видно, что число таких компонент равно шести: три задают масштаб вдоль осей характеристической поверхности, а три определяют ориентацию ее осей.

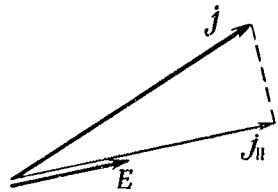
---

[1]) Иногда используется другой выбор системы координат: ось второго порядка параллельна оси x_3.

§ 6. Величина, характеризующая свойство в данном направлении

1. Определение. При рассмотрении свойств кристаллов, описываемых тензорами второго ранга, часто употребляются такие выражения, как „электропроводность в направлении [100]“ или „восприимчивость в направлении [112]“ (или в других направлениях). Понятие значения свойства в заданном направлении нуждается в точном определении, поскольку в общем случае векторы могут быть не параллельны.

Возьмем в качестве примера электропроводность (фиг. 7). Приложим к кристаллу поле $\boldsymbol{E}$. Тогда, вообще говоря, возникнут компоненты $\boldsymbol{j}$ как параллельная, так и перпендикулярная $\boldsymbol{E}$. *Электропроводность σ в направлении $\boldsymbol{E}$ определяется тогда как параллельная $\boldsymbol{E}$ компонента $\boldsymbol{j}$, деленная на E, т. е. как $j_{\parallel}/E$.* Если приложено единичное поле ($E=1$), то электропроводность σ в направлении $\boldsymbol{E}$ просто равна $j_{\parallel}$. Это определение принято потому, что именно $j_{\parallel}$ легко находится из эксперимента. Рассмотрим для примера эксперимент, при котором кристаллическая пластинка помещается между параллельными плоскими электродами, сделанными из хорошо проводящего материала. Если мы разделим ток, текущий через грани пластинки, на разность потенциалов между ними, то получим электропроводность, а отсюда и удельную электропроводность. Можно доказать, что измеренная таким образом величина есть удельная электропроводность в направлении, перпендикулярном граням пластинки. Теория соответствующего эксперимента для теплопроводности подробно описана в гл. XI, § 3; в книге приведено много подобных примеров.



Фиг. 7. Векторная схема, показывающая, что удельная электропроводность в направлении $\boldsymbol{E}$ равна $j_{\parallel}/E$.

Если $p_i = S_{ij}q_j$, то для нахождения величины S, характеризующей свойство $[S_{ij}]$ в определенном направлении, нужно приложить $\boldsymbol{q}$ в этом направлении и измерить величину $p_{\parallel}/q$; здесь $p_{\parallel}$ — компонента $\boldsymbol{p}$, параллельная $\boldsymbol{q}$.

2. Аналитические выражения. Взяв электропроводность в качестве типичного примера, выведем теперь аналитическое выражение для ее значения в заданном направлении.

1) *Выражение для электропроводности при приведении к главным осям.* Возьмем главные оси удельной электропроводности в качестве осей координат. Пусть заданное направление имеет направляющие косинусы l_1, l_2, l_3. Эти косинусы являются компонентами вектора единичной длины (единичного вектора) $\boldsymbol{l}$. Приложив поле $\boldsymbol{E}$ в этом направлении, мы имеем

$$\boldsymbol{E} = [l_1 E, l_2 E, l_3 E].$$

Следовательно, согласно уравнениям (1.31),

$$\boldsymbol{j} = [\sigma_1 l_1 E, \sigma_2 l_2 E, \sigma_3 l_3 E].$$

Компонента $\boldsymbol{j}$, параллельная $\boldsymbol{E}$, равна сумме компонент $\boldsymbol{j}$, спроектированных на направление $\boldsymbol{E}$, т. е.

$$j_\parallel = l_1^2 \sigma_1 E + l_2^2 \sigma_2 E + l_3^2 \sigma_3 E.$$

Таким образом, σ — значение удельной электропроводности в направлении l_i, выражается в виде

$$\sigma = l_1^2 \sigma_1 + l_2^2 \sigma_2 + l_3^2 \sigma_3. \tag{1.32}$$

Важный частный случай уравнения (1.32) имеет место для группы оптически одноосных кристаллических систем (тетрагональной, гексагональной и тригональной). Используя табл. 3, получаем из уравнения (1.32)

$$\sigma = \sigma_1 (l_1^2 + l_2^2) + \sigma_3 l_3^2 = \sigma_1 (1 - l_3^2) + \sigma_3 l_3^2,$$

или

$$\sigma = \sigma_1 \sin^2 \theta + \sigma_3 \cos^2 \theta,$$

где θ — угол между l_i и главной осью симметрии Ox_3.

2) *Уравнение для электропроводности при приведении к произвольным осям.* Чтобы найти выражение, соответствующее выражению (1.32) в случае произвольных осей, поступим следующим образом. Пусть теперь l_i — направляющие косинусы поля $\boldsymbol{E}$ относительно произвольных осей, т. е. $E_i = E l_i$. Компонента $\boldsymbol{j}$, параллельная $\boldsymbol{E}$, есть $(\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E})/E$, или в тензорном обозначении $(j_i E_i)/E$[1]). Следовательно, удельная электропроводность в направлении l_i определяется формулой

$$\sigma = \frac{j_i E_i}{E^2} = \frac{\sigma_{ij} E_j E_i}{E^2},$$

или

$$\sigma = \sigma_{ij} l_i l_j. \tag{1.33}$$

Мы получили общее уравнение для σ, частным случаем которого является уравнение (1.32).

Иногда удобно выбрать новые оси координат x_i' и направить одну из них, скажем x_1', в направлении l_i. Тогда, используя таблицу направляющих косинусов (1.11), мы видим, что $l_i = a_{1i}$. Поэтому уравнение (1.33) принимает вид

$$\sigma = \sigma_{ij} a_{1i} a_{1j} = \sigma_{11}' \tag{1.34}$$

в соответствии с уравнением (1.22). Следовательно, *значение σ в направлении x_1' есть σ_{11}'*. Этот результат очевиден также из определения σ_{11}'.

[1]) См. определение скалярного произведения в приложении 1.

Уравнения, подобные (1.32) — (1.34), можно написать для любого свойства, описываемого симметричным тензором второго ранга; уравнения (1.33) и (1.34) справедливы и для несимметричного тензора.

§ 7. Геометрические свойства характеристической поверхности

1. Длина радиуса-вектора. Мы можем теперь найти геометрическую интерпретацию σ. Пусть P — текущая точка эллипсоида

$$\sigma_{ij}x_i x_j = 1, \tag{1.35}$$

изображенного на фиг. 8. Если l_i — направляющие косинусы вектора OP, то имеем

$$x_i = r l_i,$$

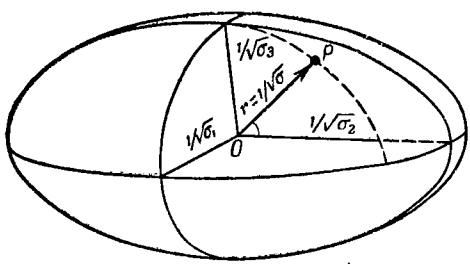
где $OP = r$. Тогда, подставляя это выражение в уравнение (1.35), получаем

$$r^2 \sigma_{ij} l_i l_j = 1$$

или, используя уравнение (1.33),

$$\sigma = \frac{1}{r^2}, \quad r = \frac{1}{\sqrt{\sigma}}. \tag{1.36}$$

Мы уже встречали частный случай этого уравнения, когда получили, что радиусы-векторы в направлениях осей эллипсоида имеют длину $1/\sqrt{\sigma_1}$, $1/\sqrt{\sigma_2}$ и $1/\sqrt{\sigma_3}$.



Фиг. 8. Характеристический эллипсоид удельной электропроводности.
Эллипсоид описывается уравнением $\sigma_{ij}x_i x_j = 1$.

Такое же рассмотрение приложимо к любому свойству, описываемому симметричным тензором второго ранга. В общем случае

$$S = \frac{1}{r^2}, \quad r = \frac{1}{\sqrt{S}}; \tag{1.37}$$

так что можно сказать, что *длина r любого радиуса-вектора характеристической поверхности второго порядка численно равна единице, деленной на корень квадратный из величины S, характеризующей физическое свойство в том же направлении.*

Случай, когда поверхность $S_{ij}x_ix_j=1$ есть гиперболоид. Если характеристическая поверхность $S_{ij}x_ix_j=1$ является гиперболоидом, приведенное выше рассмотрение остается справедливым, но длины некоторых радиусов-векторов становятся мнимыми. Когда это имеет место, удобно рассматривать поверхность второго порядка

$$S_{ij}x_ix_j=-1,$$

радиусы-векторы которой имеют действительные значения [1]). Радиусы-векторы этой поверхности второго порядка, очевидно, таковы, что

$$S=-\frac{1}{r^2}, \qquad r=\frac{1}{\sqrt{-S}}. \tag{1.38}$$

Случай, когда поверхность $S_{ij}x_ix_j=1$ есть мнимый эллипсоид. При этом, очевидно, также более удобно рассмотреть поверхность второго порядка

$$S_{ij}x_ix_j=-1,$$

которая является действительным эллипсоидом.

Итак, в общем случае мы используем действительные ветви поверхности второго порядка

$$S_{ij}x_ix_j=\pm 1 \tag{1.39}$$

и применяем соответственно уравнения (1.37) или (1.38) в зависимости от того, встречает радиус-вектор действительную ветвь поверхностей $S_{ij}x_ix_j=+1$ или $S_{ij}x_ix_j=-1$.

2. Свойство радиуса-вектора и нормали. Так же как в § 6, п. 2, мы используем в качестве примера удельную электропроводность и будем считать Ox_i главными осями σ_{ij}. Как и прежде, пусть $E=[l_1E,\ l_2E,\ l_3E]$; тогда

$$j=[\sigma_1l_1E,\ \sigma_2l_2E,\ \sigma_3l_3E].$$

Следовательно, направляющие косинусы j пропорциональны

$$\sigma_1l_1,\quad \sigma_2l_2,\quad \sigma_3l_3.$$

Если P есть такая точка на поверхности

$$\sigma_1x_1^2+\sigma_2x_2^2+\sigma_2x_3^2=1$$

(фиг. 9), что отрезок OP параллелен E, то $P=(rl_1,\ rl_2,\ rl_3)$, где $OP=r$. Плоскость, касательная к поверхности в точке P, есть

$$rl_1\sigma_1x_1+rl_2\sigma_2x_2+rl_3\sigma_3x_3=1.$$

Следовательно, нормаль в точке P имеет направляющие косинусы, пропорциональные

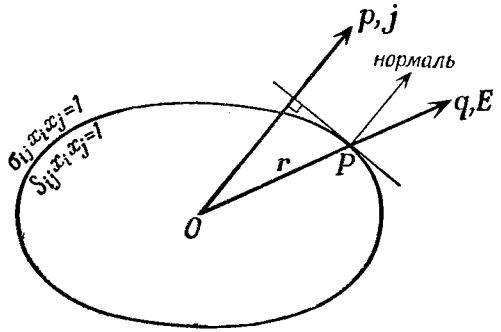
$$l_1\sigma_1,\quad l_2\sigma_2,\quad l_3\sigma_3.$$

[1]) Если поверхность $S_{ij}x_ix_j=1$ есть двуполостный гиперболоид, то поверхность $S_{ij}x_ix_j=-1$ будет однополостным гиперболоидом и наоборот.

Поэтому нормаль в точке P параллельна $\boldsymbol{j}$.

Этот результат, очевидно, носит общий характер. *Если* $p_i = S_{ij}q_j$, *то направление* $\boldsymbol{p}$ *для заданного* $\boldsymbol{q}$ *можно найти построением параллельного* $\boldsymbol{q}$ *радиуса-вектора* OP *характеристической поверхности и затем восстановлением нормали к этой поверхности в точке* P.

Случай, когда поверхность $S_{ij}x_ix_j=1$ *является гиперболоидом.* Если поверхность $S_{ij}x_ix_j = 1$ является гиперболоидом, вектор, проведенный из точки O параллельно $\boldsymbol{q}$, может пересечь характеристическую поверхность в мнимой точке. Тогда лучше, как и прежде, рассмотреть поверхность второго порядка $S_{ij}x_ix_j = -1$. Если радиус-вектор, параллельный вектору $\boldsymbol{q}$, пересекает эту поверхность в точке P, то нормаль в точке P параллельна $\boldsymbol{p}$, как и в рассмотренном выше случае.

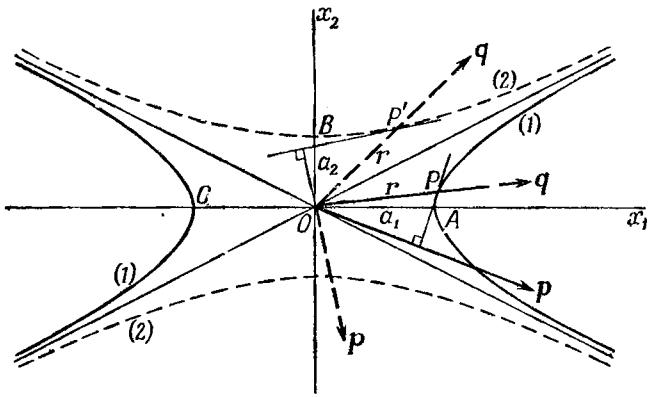


Фиг. 9. Схема, поясняющая свойство радиуса-вектора и нормали характеристического эллипсоида.

Изображено центральное сечение характеристического эллипсоида, содержащее радиус-вектор OP и опущенный из O перпендикуляр к касательной плоскости в точке P. (На чертеже показан лишь след касательной плоскости.)

На фиг. 10 изображено главное гиперболическое сечение гиперболоида $S_{ij}x_ix_j = 1$. Действительная ветвь гиперболоида $S_{ij}x_ix_j = -1$ обозначена штриховой линией. Построение для определения направления $\boldsymbol{p}$ может быть выполнено для двух направлений $\boldsymbol{q}$, а именно для направлений OP и OP'. Точка P лежит на действительной ветви поверхности $S_{ij}x_ix_j = 1$ и нахождение направления $\boldsymbol{p}$ не вызывает трудностей. Точка P' лежит на действительной ветви поверхности $S_{ij}x_ix_j = -1$. Величина S для этого направления отрицательна в соответствии с уравнением (1.38). Следовательно, компонента $\boldsymbol{p}$, параллельная $\boldsymbol{q}$, отрицательна и поэтому вектор $\boldsymbol{p}$ направлен так, как показано на фиг. 10. Если $\boldsymbol{q}$ поворачивается против часовой стрелки от направления OA, то, как можно видеть из фиг. 10, вектор $\boldsymbol{p}$ поворачивается по часовой стрелке. Когда $\boldsymbol{q}$ совпадает с асимпто-

той, p становится перпендикулярным q. После того как q пересечет асимптоту, p продолжает поворачиваться (уже против часовой стрелки) до тех пор, пока радиус-вектор не займет положения OB; тогда p и q становятся антипараллельными соответственно отрицательному значению одной из главных компонент S_{ij}. Когда q продолжает вращаться против часовой стрелки, p снова движется по часовой стрелке; и в конце концов, когда q достигает OC, оба вектора становятся параллельными; это соответствует положительному значению одной из главных компонент S_{ij}.



Фиг. 10. Схема, поясняющая свойства характеристической поверхности второго порядка, являющейся гиперболоидом.

Кривая (1) — сечение гиперболоида, описываемого уравнением

$$S_{ij}x_ix_j=\frac{x_1^2}{a_1^2}-\frac{x_2^2}{a_2^2}+\frac{x_3^2}{a_3^2}=1;$$

Кривая (2) — сечение гиперболоида, описываемого уравнением

$$S_{ij}x_ix_j=\frac{x_1^2}{a_1^2}-\frac{x_2^2}{a_2^2}+\frac{x_3^2}{a_3^2}=-1.$$

Случай, когда поверхность $S_{ij}x_ix_j=1$ *является мнимым эллипсоидом.* Для определения направления p рассматриваем действительный эллипсоид $S_{ij}x_ix_j=-1$ и проводим такое же построение, как и прежде, за исключением того, что направление p теперь будет совпадать с внутренней, а не с внешней нормалью.

3. Сводка геометрических свойств. Мы можем суммировать рассмотренные два свойства характеристической поверхности второго порядка следующим образом (см. фиг. 8—10). Пусть p и q — два вектора, связанные через симметричный тензор второго ранга S_{ij} соотношением $p_i=S_{ij}q_j$. Построим действительные ветви поверхности

второго порядка $S_{ij}x_ix_j = \pm 1$. Отложим радиус длиной r, параллельный q. Тогда:

1) Компонента p, параллельная q, задается соотношением $p_\parallel = Sq$, где $S = \pm 1/r^2$; положительный знак берется, когда радиус откладывается для поверхности $S_{ij}x_ix_j = 1$, и отрицательный, когда он откладывается для поверхности $S_{ij}x_ix_j = -1$.

2) Направление p совпадает с направлением восстановленной в конце радиуса-вектора нормали (внешней для поверхности $S_{ij}x_ix_j = 1$ и внутренней для поверхности $S_{ij}x_ix_j = -1$).

Оба эти результата очевидны, когда вектор q параллелен одной из главных осей.

РЕЗЮМЕ

1. Преобразование осей координат (§ 2, п. 1 и 3). Преобразование одной ортогональной системы координат в другую задается в сокращенной записи уравнением

$$x_i' = a_{ij}x_j. \tag{1.18}$$

2. Определение тензора (§ 3). Тензор есть физическая величина, компоненты которой преобразуются согласно указанным ниже законам.

3. Законы преобразования тензоров (табл. 2).

Для тензора нулевого ранга (скаляра): $\varphi' = \varphi$,

для тензора первого ранга (вектора): $p_i' = a_{ij}p_j$,

для тензора второго ранга: $T_{ij}' = a_{ik}a_{jl}T_{kl}$

и т. д. для тензоров высшего ранга.

Закон преобразования вектора имеет такой же вид, как и закон преобразования координат. Закон преобразования тензора имеет такой же вид, как и закон преобразования произведения координат (§ 2, п. 5).

4. Соотношение между векторами (§ 1, п. 1). Если векторы p_i и q_i связаны линейным соотношением

$$p_i = T_{ij}q_j, \tag{1.9}$$

то коэффициенты T_{ij} образуют тензор второго ранга (§ 3).

Тензоры второго ранга

5. Симметричные и антисимметричные тензоры (§ 3, п. 2). Тензор $[T_{ij}]$ симметричен, если $T_{ij} = T_{ji}$, и антисимметричен, если $T_{ij} = -T_{ji}$.

6. Главные оси (§ 4, п. 1). Симметричный тензор $[S_{ij}]$ имеет главные оси; при приведении к этим осям тензор имеет вид

$$\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}.$$

Линейные соотношения $p_i = S_{ij}q_j$ в этом случае упрощаются (§ 4, п. 2) и записываются следующим образом:

$$p_1 = S_1 q_1, \quad p_2 = S_2 q_2, \quad p_3 = S_3 q_3.$$

7. Величина, характеризующая свойство в данном направлении (§ 6, п. 1). Если $p_i = S_{ij}q_j$, то величину S, характеризующую физическое свойство $[S_{ij}]$ в любом произвольно выбранном направлении, можно определить, прилагая $\boldsymbol{q}$ в этом направлении и измеряя величину $p_\parallel/q$, где $p_\parallel$ — компонента $\boldsymbol{p}$, параллельная $\boldsymbol{q}$. Величина S в направлении l_i определяется уравнением (§ 6, п. 2)

$$S = S_{ij}l_i l_j,$$

или, при приведении к главным осям,

$$S = S_1 l_1^2 + S_2 l_2^2 + S_3 l_3^2.$$

Если ось Ox_1' направлена в выбранном нами направлении, то

$$S = S_{11}'.$$

8. Характеристическая поверхность второго порядка (§ 4). Характеристическая поверхность для симметричного тензора $[S_{ij}]$ определяется уравнением

$$S_{ij}x_i x_j = 1, \tag{1.26}$$

или, при переходе к главным осям (§ 4, п. 1),

$$S_1 x_1^2 + S_2 x_2^2 + S_3 x_3^2 = 1. \tag{1.28}$$

Свойство радиуса-вектора (§ 7, п. 1). Радиус-вектор $\boldsymbol{r}$ характеристической поверхности связан с величиной S, характеризующей свойство в данном направлении, соотношениями

$$S = \frac{1}{r^2}, \qquad r = \frac{1}{\sqrt{S}}.$$

Свойство радиуса-вектора и нормали (§ 7, п. 2). Если $p_i = S_{ij}q_j$ и если радиус-вектор OP характеристической поверхности проведен параллельно $\boldsymbol{q}$, то направление $\boldsymbol{p}$ совпадает с направлением нормали в точке P.

Появления мнимого радиуса-вектора можно избежать, выбрав поверхность второго порядка

$$S_{ij}x_ix_j = -1$$

и изменив соответствующим образом знак (§ 7, п. 3).

9. Влияние симметрии кристалла (§ 5). Форма и ориентация характеристической поверхности второго порядка для свойства кристалла, описываемого тензором второго ранга, определяется кристаллографической симметрией в соответствии с принципом Неймана (см. табл. 3).

З А Д А Ч И

1. Пусть p_i и q_i — векторы, тогда p_1/q_1, p_2/q_2 и p_3/q_3 — три числа, значения которых можно определить в любой системе координат. Будут ли эти числа компонентами вектора?

2. В чем ошибочность следующего умозаключения: способность вызывать дифракцию рентгеновских лучей есть физическое свойство кристалла. С помощью рентгенограммы можно определить *пространственную группу* кристалла. Но принцип Неймана гласит, что симметрия физического свойства зависит от *точечной группы* кристалла. Следовательно, принцип Неймана неприменим к дифракции рентгеновских лучей.

3а. Тензор удельной электропроводности $[\sigma_{ij}]$ некоторого кристалла имеет следующие компоненты в системе координат x_1, x_2, x_3:

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} 25\cdot 10^7 & 0 & 0 \\ 0 & 7\cdot 10^7 & -(3\sqrt{3})\cdot 10^7 \\ 0 & -(3\sqrt{3})\cdot 10^7 & 13\cdot 10^7 \end{bmatrix}.$$

Электропроводность выражена в системе MKS ($ом^{-1}\cdot м^{-1}$). Затем оси преобразованы к новой системе x_1', x_2', x_3', заданной следующими углами:

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

Составить таблицу типа (1.11) для этого преобразования и проверить, что суммы квадратов a_{ij} в каждом столбце и каждой строке равны единице.

3б. Определить значения компонент σ_{ij}' и объяснить полученные результаты.

3в. Начертить на новых осях x_2' и x_3' сечение эллипсоида электропроводности (характеристической поверхности) плоскостью $x_1' = 0$, учитывая, что это главное сечение. Нанести на чертеж старые оси x_2 и x_3.

3г. Провести радиус-вектор OP в направлении, направляющие косинусы которого в старой системе координат равны $(0, 1/2, \sqrt{3}/2)$. Измерить длину этого радиуса-вектора и найти отсюда электропроводность в этом направлении.

3д. Проверить последний результат аналитически.

3е. Предположить, что электрическое поле напряженностью 1 *в/м* приложено в направлении OP. Вычислить компоненты E_i вдоль осей x_i, а отсюда определить компоненты плотности тока j_i.

3ж. Отложить эти компоненты j_l в выбранном масштабе на осях x_1, x_2, x_3 и затем определить графически величину и направление результирующей плотности тока.

3з. При том же заданном электрическом поле, что и в задаче 3е, повторить те же вычисления, заменив оси x_l осями x'_l и пользуясь значением σ'_{ij}, найденным в задаче 3б. Сравнить результат с результатом, полученным в задаче 3ж.

3и. Сравнить найденное направление результирующего тока с направлением нормали к эллипсоиду электропроводности в точке P.

3к. Найти графически параллельную OP компоненту результирующей плотности тока и затем найти σ в этом направлении. Сравнить это значение со значениями, найденными в задачах 3г и 3д.

Глава II

ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И ТЕНЗОРЫ ВТОРОГО РАНГА

Эта глава составляет математическое дополнение к гл. I, и желающие перейти прямо к физическим приложениям могут пропустить ее и приступить к чтению гл. III. Здесь мы вернемся снова к некоторым вопросам, разобранным в гл. I, и продолжим их рассмотрение.

§ 1. Преобразование осей координат

1. Соотношения между направляющими косинусами. В гл. I, § 2, п. 1 было отмечено, что преобразование от одной ортогональной системы координат Ox_i к другой системе Ox'_i задается таблицей

	x_1	x_2	x_3
x'_1	a_{11}	a_{12}	a_{13}
x'_2	a_{21}	a_{22}	a_{23}
x'_3	a_{31}	a_{32}	a_{33}

, (2.1)

где девять коэффициентов a_{ij} не являются независимыми. Это ясно видно из рассмотрения числа степеней свободы преобразования. Если оси Ox_1, Ox_2, Ox_3 заданы, то для определения направления Ox'_1 необходимо знать два угла, например широту и долготу. Новые оси могут быть еще повернуты вокруг Ox'_1, следовательно, надо знать еще один угол — угол поворота вокруг Ox'_1. Таким образом, для определения преобразования нужны только три независимые величины, поэтому должны существовать шесть независимых соотношений между девятью коэффициентами a_{ij}.

Так как каждая строка таблицы (2.1) представляет собой три направляющих косинуса прямой линии по отношению к ортогональным осям Ox_1, Ox_2, Ox_3, то имеем

$$a_{11}^2 + a_{12}^2 + a_{13}^2 = 1, \quad \text{т. е.} \quad a_{1k}a_{1k} = 1; \tag{2.2а}$$

$$a_{21}^2 + a_{22}^2 + a_{23}^2 = 1, \quad \text{т. е.} \quad a_{2k}a_{2k} = 1; \tag{2.2б}$$

$$a_{31}^2 + a_{32}^2 + a_{33}^2 = 1, \quad \text{т. е.} \quad a_{3k}a_{3k} = 1. \tag{2.2в}$$

Следовательно,

$$a_{lk}a_{jk} = 1, \text{ если } l = j. \tag{2.3}$$

Так как каждая пара строк таблицы (2.1) представляет собой направляющие косинусы двух взаимно перпендикулярных прямых, мы имеем

$$a_{21}a_{31} + a_{22}a_{32} + a_{23}a_{33} = 0, \quad \text{т. е.} \quad a_{2k}a_{3k} = 0; \tag{2.4а}$$

$$a_{31}a_{11} + a_{32}a_{12} + a_{33}a_{13} = 0, \quad \text{т. е.} \quad a_{3k}a_{1k} = 0; \tag{2.4б}$$

$$a_{11}a_{21} + a_{12}a_{22} + a_{13}a_{23} = 0, \quad \text{т. е.} \quad a_{1k}a_{2k} = 0 \tag{2.4в}$$

(ср. скалярное произведение двух взаимно перпендикулярных векторов).

Итак,

$$a_{lk}a_{jk} = 0, \quad \text{если} \quad l \neq j. \tag{2.5}$$

Уравнения (2.3) и (2.5), называющиеся *соотношениями ортогональности*, могут быть сведены к простому уравнению

$$a_{lk}a_{jk} = \delta_{lj}, \tag{2.6}$$

если ввести новый символ δ_{lj} (*символ Кронекера*), определяемый следующим образом:

$$\delta_{lj} = \begin{cases} 1 & (l = j), \\ 0 & (l \neq j). \end{cases} \tag{2.7}$$

Замечая, что каждый *столбец* таблицы (2.1) также содержит направляющие косинусы трех взаимно перпендикулярных прямых, на этот раз относительно осей Ox'_l, мы получаем шесть аналогичных соотношений ортогональности и для обратного преобразования

$$a_{kl}a_{kj} = \delta_{lj}. \tag{2.8}$$

Однако можно видеть, что эти соотношения не независимы от соотношений (2.6), так что они не содержат по существу никаких новых сведений.

Замечание о матрицах. Если выписать в виде таблицы значения δ_{lj}, то получится *единичная матрица*

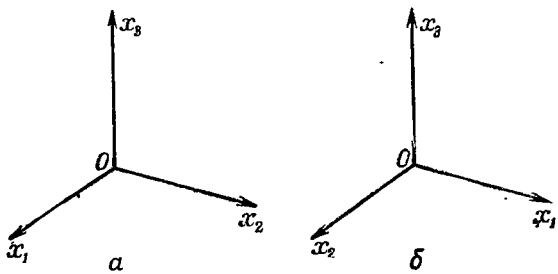
$$\delta_{lj} = \begin{pmatrix} \delta_{11} & \delta_{12} & \delta_{13} \\ \delta_{21} & \delta_{22} & \delta_{23} \\ \delta_{31} & \delta_{32} & \delta_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.9}$$

Мы заключаем матрицы в круглые скобки, чтобы отличить их от тензоров, записанных в виде таблиц. Если $[T_{ij}]$ обозначает всю таблицу компонент T_{ij}, то (δ_{ij}) означает всю таблицу компонент δ_{ij}.

Мы ввели уже две таблицы, (a_{ij}) и (δ_{ij}), названные нами матрицами. Теперь следует разъяснить различие между матрицами и тензорами. Матрица — это по существу математическое понятие; она представляет собой прямоугольную таблицу чисел. (Случайно оказа-

лось, что обе рассмотренные нами матрицы были квадратными; однако позднее мы встретим иные, прямоугольные матрицы.)

Наоборот, тензор есть по существу физическое понятие, ибо, как мы уже видели (см. стр. 29), тензор является физической величиной (например, электропроводностью). Формальное сходство между матрицами и тензорами возникает вследствие того, что для изображения тензора необходимо использовать матричную таблицу коэффициентов. Мы видели, что для заданного тензора второго ранга матрица коэффициентов принимает различную форму в зависимости от выбора осей координат. Все тензоры могут быть изображены с помощью матриц (и для тензоров второго ранга такой способ



Фиг. 11. Две ориентации систем координат.
а — правая система; *б* — левая система.

представления особенно естествен); однако не все матрицы обязательно представляют тензоры.

Свойство матрицы (δ_{ij}). Пусть p_i есть i-я компонента вектора. Образуем выражение $\delta_{ij}p_i$ и произведем суммирование по i. Подставляя значения δ_{ij}, получаем

$$\delta_{ij}p_i = p_j.$$

Следовательно, умножение p_i на δ_{ij} приводит к замене индекса i индексом j. Аналогично,

$$\delta_{ij}p_j = p_i.$$

Тем же способом получаем для компонент тензора T_{jl}

$$\delta_{ij}T_{jl} = T_{il} \quad \text{и} \quad \delta_{il}T_{jl} = T_{ji}.$$

Благодаря этому удобному свойству (δ_{ij}) иногда называют *матрицей замещения*.

2. Значение $|a_{ij}|$. До настоящего момента у нас не было необходимости определять, какая система координат используется — правая или левая. Теперь нужно установить различие между ними. На фиг. 11, *а* показана правая система координат, а на фиг. 11, *б* — левая.

Можно видеть, что в случае правой системы при движении по правилу правого винта вдоль положительного направления оси x_1 поворот на 90° совмещает ось x_2 с осью x_3; аналогично, поворот на 90° при движении по правилу правого винта вдоль положительного направления x_2 совмещает x_3 с x_1 (циклический порядок), а поворот на 90° при движении по правилу правого винта вдоль положительного направления x_3 совмещает x_1 с x_2. Для левой системы остается справедливым то же самое рассуждение, если движение по правому винту заменить движением по левому.

Введение левой системы координат — печальная необходимость, связанная с тем, что мы должны рассматривать такие операции симметрии, как отражение в плоскости и инверсия в точке, которые изменяют правую систему на левую (или наоборот). Покажем теперь, что детерминант [1]) матрицы преобразования (a_{ij}), который мы запишем в виде $|a_{ij}|$, равен $+1$ или -1, в зависимости от того, остается ли при преобразовании система координат правой (левой) или изменяется на левую (правую) [58].

Мы имеем

$$|a_{ij}| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) + a_{12}(a_{23}a_{31} - a_{21}a_{33}) + a_{13}(a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31}). \quad (2.10)$$

Решая (2.4б) и (2.4в) относительно a_{11}, a_{12} и a_{13}, получаем

$$\frac{a_{11}}{a_{32}a_{23} - a_{33}a_{22}} = \frac{a_{12}}{a_{33}a_{21} - a_{31}a_{23}} = \frac{a_{13}}{a_{31}a_{22} - a_{32}a_{21}} = -\frac{1}{k}, \quad (2.11)$$

---

[1]) Детерминант матрицы с двумя строками и двумя столбцами [(2×2)-матрицы] называется *детерминантом второго порядка* и определяется следующим образом. Детерминант $\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}$ означает выражение $(ad - bc)$. Детерминант (3×3)-матрицы, называемый *детерминантом третьего порядка*, может быть определен через детерминанты второго порядка следующим образом. Детерминант

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & k \end{vmatrix}$$

равен

$$a\begin{vmatrix} e & f \\ h & k \end{vmatrix} - b\begin{vmatrix} d & f \\ g & k \end{vmatrix} + c\begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix}.$$

Определения детерминантов высшего порядка могут быть даны аналогично. Общее определение приведено в примечании 2 на стр. 189. Более подробные сведения о детерминантах см. в книгах [2, 38]. (См. также [106, 113]. — *Прим. перев.*)

где k — константа. Следовательно, подставляя значения $(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32})$ и т. д. в уравнение (2.10), имеем с учетом (2.2а)

$$|a_{ij}| = k\left(a_{11}^2 + a_{12}^2 + a_{13}^2\right) = k.$$

Теперь уравнение (2.11) дает

$$\frac{a_{11}^2 + a_{12}^2 + a_{13}^2}{(a_{32}a_{23} - a_{33}a_{22})^2 + (a_{33}a_{21} - a_{31}a_{23})^2 + (a_{31}a_{22} - a_{32}a_{21})^2} = \frac{1}{k^2}.$$

Следовательно, используя (2.2а), получаем

$$(a_{32}a_{23} - a_{33}a_{22})^2 + (a_{33}a_{21} - a_{31}a_{23})^2 + (a_{31}a_{22} - a_{32}a_{21})^2 = k^2.$$

Используя общее тождество

$$(bc' - cb')^2 + (ca' - ac')^2 + (ab' - ba')^2 =$$
$$= (a^2 + b^2 + c^2)\left(a'^2 + b'^2 + c'^2\right) - (aa' + bb' + cc')^2,$$

приводим найденное выражение к виду

$$\left(a_{31}^2 + a_{32}^2 + a_{33}^2\right)\left(a_{21}^2 + a_{22}^2 + a_{23}^2\right) - \left(a_{31}a_{21} + a_{32}a_{22} + a_{33}a_{23}\right)^2 = k^2.$$

Но, согласно (2.2б), (2.2в) и (2.4а), левая сторона этого уравнения равна единице. Поэтому

$$k = |a_{ij}| = \pm 1. \tag{2.12}$$

Если две строки $|a_{ij}|$ меняются местами, то знак детерминанта изменяется. Следовательно, знак $|a_{ij}|$ зависит от выбора нумерации осей. Рассмотрим сначала преобразование, оставляющее оси неизменными, которое называется *тождественным преобразованием*:

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = (\delta_{ij})$$

[согласно уравнению (2.9)]. В этом случае, очевидно, $|a_{ij}| = +1$. Теперь представим себе, что новая система координат поворачивается относительно старой. Так как все a_{ij} изменяются непрерывно, то значение $|a_{ij}|$ не может измениться скачком от $+1$ к -1; отсюда заключаем, что при любом преобразовании, являющемся простым поворотом осей, $|a_{ij}| = +1$. Любая правая система координат может быть совмещена с любой другой правой системой соответствующим поворотом; то же самое справедливо для любых двух левых систем. Итак, для *преобразования, при котором правая система координат остается правой, а левая — левой*, $|a_{ij}| = +1$.

Рассмотрим теперь преобразование

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

которое дает $x_1' = -x_1$, $x_2' = x_2$, $x_3' = x_3$ и для которого $|a_{ij}| = -1$. Из фиг. 11 можно видеть, что это преобразование изменяет правую систему на левую (и наоборот). Теперь представим себе, что новая система координат поворачивается. Детерминант $|a_{ij}|$ не может измениться скачком и поэтому остается равным -1. Если старая система координат — правая, такой поворот переведет новую систему в левую любой желательной ориентации. Аналогичное рассуждение справедливо, если старая система является левой, а новая — правой. Отсюда следует, что для *преобразования, при котором правая система координат становится левой, а левая — правой,* $|a_{ij}| = -1$ [1]).

Положив в уравнении (2.11) $k = \pm 1$, мы находим еще одно полезное свойство

$$\begin{aligned} a_{11} &= \pm (a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}), \\ a_{12} &= \pm (a_{23}a_{31} - a_{21}a_{33}), \\ a_{13} &= \pm (a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31}). \end{aligned} \tag{2.13}$$

Здесь перед скобками будет стоять знак плюс, если преобразование оставляет правую систему правой (или левую левой), и знак минус — в противоположном случае. В общем случае каждый коэффициент a_{ij} равен его минору в детерминанте $|a_{ij}|$, взятому со знаком плюс или минус.

§ 2. Векторное произведение. Полярные и аксиальные векторы

В векторном анализе принято для двух заданных векторов $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$ определять вектор, называемый векторным произведением $\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{q}$. В связи с этим понятием возникают некоторые трудности и особенности, которые нам необходимо сейчас обсудить.

В данной книге мы определим векторное произведение векторов p_i и q_i как величину

$$V_{ij} = -p_i q_j + p_j q_i. \tag{2.14}$$

Легко показать, что V_{ij} подчиняется закону преобразования тензора второго ранга [см. (1.22)]. Мы можем также видеть, что

$$V_{ij} = -(-p_j q_i + p_i q_j) = -V_{ji}.$$

---

[1]) Детерминант $|a_{ij}|$ равен тройному произведению $(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{b}'\boldsymbol{c}')$, определенному как $(\boldsymbol{a}' \times \boldsymbol{b}') \cdot \boldsymbol{c}'$, где $\boldsymbol{a}'$, $\boldsymbol{b}'$, $\boldsymbol{c}'$ — единичные векторы, параллельные осям Ox_i'. Однако для доказательства того, что $|a_{ij}| = \pm 1$, нужно определить знак векторного произведения, поэтому мы отложим это рассмотрение до § 2.

Следовательно, $[V_{ij}]$ есть антисимметричный тензор второго ранга. Выписывая его в развернутом виде, имеем

$$[V_{ij}]=\begin{bmatrix} 0 & -(p_1q_2-p_2q_1) & (p_3q_1-p_1q_3) \\ (p_1q_2-p_2q_1) & 0 & -(p_2q_3-p_3q_2) \\ -(p_3q_1-p_1q_3) & (p_2q_3-p_3q_2) & 0 \end{bmatrix}. \qquad (2.15)$$

Это выражение можно записать в виде

$$\begin{bmatrix} 0 & -r_3 & r_2 \\ r_3 & 0 & -r_1 \\ -r_2 & r_1 & 0 \end{bmatrix},$$

где

$$r_1=p_2q_3-p_3q_2, \quad r_2=p_3q_1-p_1q_3, \quad r_3=p_1q_2-p_2q_1. \qquad (2.16)$$

Мы приписали отрицательные знаки членам, стоящим в верхней побочной диагонали, чтобы сохранить циклический порядок в (2.16).

В векторном анализе r_1, r_2, r_3 рассматриваются как компоненты вектора $\boldsymbol{r}$, однако мы сейчас покажем, что они не образуют вектора в смысле данного нами определения (см. стр. 29).

При переходе от осей x_i к осям x_i' векторы p_i и q_i переходят в p_i' и q_i'. Если уравнение (2.16), определяющее r_i, продолжает оставаться в силе для новых осей, то

$$r_1'=p_2'q_3'-p_3'q_2'=a_{2i}p_ia_{3j}q_j-a_{3j}p_ja_{2i}q_i=a_{2i}a_{3j}(p_iq_j-p_jq_i);$$

[здесь использовано уравнение (1.13)]. Записывая это выражение в развернутом виде, получаем, что каждый член, стоящий в скобках, войдет дважды с противоположными знаками. Следовательно,

$$r_1'=(a_{22}a_{33}-a_{23}a_{32})(p_2q_3-p_3q_2)+(a_{23}a_{31}-a_{21}a_{33})(p_3q_1-p_1q_3)+ \\ +(a_{21}a_{32}-a_{22}a_{31})(p_1q_2-p_2q_1).$$

Используя уравнения (2.13) и (2.16), получаем

$$r_1'=\pm a_{11}r_1\pm a_{12}r_2\pm a_{13}r_3. \qquad (2.17)$$

Здесь положительные знаки берутся при преобразовании, оставляющем правую систему правой (или левую — левой), т. е. при $|a_{ij}|=+1$, и отрицательные знаки — при преобразовании, переводящем правую систему в левую (или наоборот), т. е. при $|a_{ij}|=-1$. Аналогичные уравнения можно написать для r_2' и r_3'. Следовательно, мы получаем

$$r_i'=\pm a_{ij}r_j. \qquad (2.18)$$

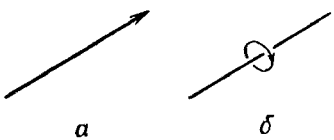
Если бы в уравнении (2.18) не были возможны отрицательные знаки, то r_1, r_2, r_3 преобразовались бы подобно компонентам вектора, а следовательно, были бы таковыми. Однако при переходе от правой системы координат к левой (или наоборот) компоненты r_1, r_2, r_3

изменяются так, что для них не выполняется закон преобразования компонент вектора

$$p_i' = a_{ij}p_j. \tag{2.19}$$

Величины, которые преобразуются согласно правилу (2.18), называются *аксиальными векторами*. Истинные векторы, которые преобразуются согласно правилу (2.19), могут быть названы *полярными векторами*, когда необходимо провести четкое различие.

Сделанные нами выводы можно суммировать следующим образом. Векторное произведение двух полярных векторов не представляет собой истинного (полярного) вектора, а является антисимметричным тензором. Этого можно ожидать на основании уравнения (2.14) [1]). Три независимые компоненты антисимметричного тензора, обозначенные через r_i, преобразуются согласно закону (2.18) и образуют так называемый аксиальный вектор.



а *б*

Фиг. 12. Символические изображения полярного вектора (*а*) и аксиального вектора (*б*).

Полярный вектор можно представить стрелкой, имеющей определенное направление (фиг. 12, *а*). Прежде чем изобразить подобным способом аксиальный вектор, необходимо ввести определение право- и левовинтового движения. Рассмотрим, например, как в векторном анализе задается направление векторного произведения двух векторов. Векторное произведение $\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{q}$ определяется как $pq \sin 0 \cdot \boldsymbol{l}$, где 0 — угол между векторами $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$, а $\boldsymbol{l}$ — единичный вектор, перпендикулярный $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$ так, что $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{q}$ и $\boldsymbol{l}$ образуют *правую* систему. Иначе, векторное произведение $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$ определяется как вектор, компоненты которого в *правой* системе координат имеют вид:

$$[p_2q_3 - p_3q_2, \quad p_3q_1 - p_1q_3, \quad p_1q_2 - p_2q_1].$$

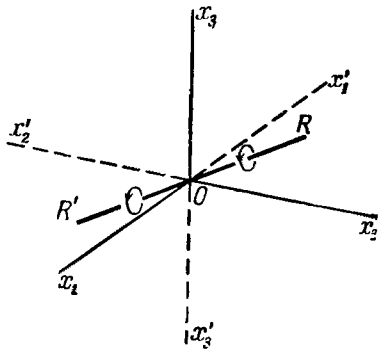
Примерами аксиальных векторов являются угловая скорость, момент количества движения, момент силы, ротор полярного вектора. На фиг. 12, *б* дано представление аксиального вектора, не зависящее от выбора положительного направления винтового движения. Аксиальный вектор изображается отрезком прямой определенной длины и определенной ориентации, которому приписывается вращение в ту или иную сторону.

Чтобы пояснить различие между величинами, символически изображенными на фиг. 12, *а* и *б*, отразим каждый символ в плоскости, перпендикулярной их длине. Легко проверить, что при этом символ,

[1]) Случайно оказалось, что в трех измерениях антисимметричный тензор второго ранга имеет такое же число независимых компонент, как и вектор, но это несправедливо для любого другого числа измерений. Так, например, четырехмерный антисимметричный тензор второго ранга является таблицей 4×4 и имеет 6 независимых компонент, тогда как четырехмерный вектор имеет только 4 компоненты.

изображающий полярный вектор, изменит направление на обратное, а символ аксиального вектора останется неизменным. Если же отразить каждый символ в плоскости, параллельной их длине, то результат будет обратным.

Опишем теперь способ построения символа аксиального вектора по известным компонентам. Чтобы изобразить аксиальный вектор, имеющий в некоторой системе координат компоненты r_1, r_2, r_3, проведем из начала координат прямую, проекциями которой на оси являются r_1, r_2, r_3. Если система координат правая, то положительное направление этой прямой будет определяться движением по правилу правого винта из начала координат. Если система левая, то положительное направление прямой определяется движением по правилу левого винта. Для иллюстрации этих рассуждений представим себе (фиг. 13), что мы построили символ OR аксиального вектора с компонентами r_1, r_2, r_3 в некоторой *правой* системе осей Ox_1, Ox_2, Ox_3. Допустим, что мы теперь перешли к новой, *левой* системе координат, заданной преобразованием $a_{ij} = -\delta_{ij}$ (т. е. изменили направление всех осей на противоположные). Новые компоненты в соответствии с уравнением (2.18) будут иметь вид



Фиг. 13. Преобразование аксиального вектора при переходе от правой системы координат к левой.

$$r_i' = -a_{ij}r_j = \delta_{ij}r_j = r_i,$$

а следовательно, останутся неизменными. Отрезок OR', который мы проведем из начала координат, чтобы изобразить вектор, имеющий эти новые компоненты, будет направлен противоположно OR, но иметь ту же самую длину. Так как система координат теперь левая, то положительное направление OR' определяется правилом левого винта. Легко убедиться, что построенное новое изображение не отличается от первоначального (за исключением трансляции, которая нас не интересует). Итак, символ, изображающий аксиальный вектор, действительно остается неизменным при любом преобразовании осей координат, что, очевидно, является необходимым свойством такого символа.

§ 3. Главные оси тензора

Мы отмечали без доказательства в гл. I, § 4, п. 1, что, производя замену осей, можно упростить уравнение характеристической поверхности второго порядка

$$S_{ij}x_ix_j = 1 \qquad (S_{ij} = S_{ji}) \tag{2.20}$$

и привести его к виду

$$S_1x_1^2+S_2x_2^2+S_3x_3^2=1.$$

Этот вопрос заслуживает дальнейшего обсуждения.

Для удобства будем считать определяющим свойством главных осей то обстоятельство, что в точках их пересечения с характеристической поверхностью нормаль к поверхности параллельна радиусу-вектору. Обозначим через P точку на характеристической поверхности, заданной уравнением (2.20), а через X_i — вектор $\boldsymbol{OP}$. Тогда, если мы образуем вектор $S_{ij}X_j$, то в соответствии со свойством радиуса-вектора и нормали характеристической поверхности этот вектор будет параллелен нормали в точке P. Условие того, что радиус-вектор и нормаль должны быть параллельны, есть условие пропорциональности их соответствующих компонент, т. е.

$$S_{ij}X_j=\lambda X_i, \tag{2.21}$$

где λ — константа. Соотношение (2.21) представляет собой систему трех линейных однородных уравнений в переменных X_i. Эта система имеет отличное от нуля решение лишь в том случае, если детерминант, составленный из коэффициентов уравнений [обозначим его через $F(\lambda)$], равен нулю. Тогда получаем

$$F(\lambda)\equiv\begin{vmatrix} S_{11}-\lambda & S_{12} & S_{31} \\ S_{12} & S_{22}-\lambda & S_{23} \\ S_{31} & S_{23} & S_{33}-\lambda \end{vmatrix}=0, \tag{2.22}$$

что кратко можно записать в виде

$$F(\lambda)\equiv|S_{ij}-\lambda\delta_{ij}|=0. \tag{2.23}$$

Это кубическое уравнение для λ называется *вековым уравнением*. Три его корня (обозначим их через λ', λ'' и λ''') дают три возможных значения λ, при которых система уравнений (2.21) имеет отличное от нуля решение [1]). Каждый из корней определяет направление, в котором радиус-вектор поверхности второго порядка параллелен ее нормали, т. е. определяет направление одной из главных осей.

Можно показать, что эти три направления взаимно ортогональны. Рассмотрим любые два из них, определяемые, например, корнями λ' и λ''. Обозначим соответствующие радиусы-векторы через X_i' и X_i''. Тогда

$$S_{ij}X_j'=\lambda'X_i', \tag{2.24}$$

$$S_{ij}X_j''=\lambda''X_i''. \tag{2.25}$$

---

1) Можно доказать (см. [36]), что так как по определению все S_{ij} вещественны, то и все три корня λ', λ'' и λ''' будут вещественны.

Умножая уравнение (2.24) на X_i'', а уравнение (2.25) на X_i' и вычитая одно из другого, получаем

$$S_{ij}(X_j'X_i'' - X_j''X_i') = (\lambda' - \lambda'')\, X_i'X_i''.$$

Так как $S_{ij} = S_{ji}$, то левая часть этого уравнения равна нулю. Поэтому

$$(\lambda' - \lambda'')\, X_i'X_i'' = 0.$$

Отсюда, если $\lambda' \neq \lambda''$, то скалярное произведение X_i' и X_i'' равно нулю; следовательно, оба вектора взаимно ортогональны.

Направления главных осей. Направления трех главных осей X_i', X_i'' и X_i''' могут быть найдены в конкретном случае следующим образом. Сначала решаем уравнение (2.22) относительно λ. Затем с одним из найденных значений λ, скажем λ', образуем три уравнения (2.24) и решаем их для отношений $X_1' : X_2' : X_3'$. Повторяя эти операции со вторым корнем, например λ'', находим $X_1'' : X_2'' : X_3''$. Третье направление $X_1''' : X_2''' : X_3'''$ может быть теперь найдено построением перпендикуляра к первым двум.

Этот метод нахождения направлений главных осей включает решение кубического уравнения и не очень удобен при численных расчетах. В общем случае для получения численных результатов лучше использовать метод последовательных приближений, как это описано в гл. IX. Для двумерного случая задача значительно упрощается и будет рассмотрена нами в § 4 данной главы.

Длины главных осей. Умножим обе части уравнения (2.24) на X_i'. Тогда получаем

$$S_{ij}X_j'X_i' = \lambda' X_i'X_i' = 1$$

согласно уравнению (2.20), так как X_i' есть радиус-вектор. Следовательно, длина радиуса-вектора, соответствующего корню λ', определяется выражением

$$\sqrt{X_i'X_i'} = \frac{1}{\sqrt{\lambda'}}.$$

Обозначая длины главных осей, как и прежде, через $1/\sqrt{S_1}$, $1/\sqrt{S_2}$, $1/\sqrt{S_3}$ и связывая λ' с S_1 и т. д., получаем, что

$$\lambda' = S_1, \quad \lambda'' = S_2, \quad \lambda''' = S_3. \tag{2.26}$$

Таким образом, три корня уравнения (2.22) являются тремя главными коэффициентами S_1, S_2, S_3.

Для облегчения запоминания можно отметить, что если поверхность второго порядка уже приведена к главным осям, то вековое уравнение упрощается и принимает вид

$$\begin{vmatrix} S_1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & S_2-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & S_3-\lambda \end{vmatrix}=0,$$

т. е.

$$(S_1-\lambda)(S_2-\lambda)(S_3-\lambda)=0,$$

и равенство корней коэффициентам S_1, S_2, S_3 очевидно.

§ 4. Построение окружности Мора

Следующее полезное построение, предложенное О. Мором (1835—1918 гг.), обычно употребляется инженерами при анализе тензоров напряжений и деформаций (см. гл. V и VI), однако его удобно использовать также и для любых других тензоров второго ранга.

1. Поворот вокруг главных осей. Часто случается, что мы хотим преобразовать компоненты симметричного тензора второго ранга от одной системы координат к другой, получающейся из первой простым поворотом вокруг одной из осей координат. В этом случае уравнения преобразования сильно упрощаются.

Предположим, что оси Ox_i' получаются из осей Ox_i, как показано на фиг. 14, *а*, поворотом вокруг Ox_3 на угол θ, измеряемый от Ox_1 в сторону Ox_2. Тогда в соответствии с определением a_{ij} (см. гл. I, § 2, п. 1) имеем

$$(a_{ij})=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \qquad (2.27)$$

Чтобы упростить изложение, рассмотрим сначала случай, когда Ox_1, Ox_2, Ox_3 — главные оси тензора $[S_{ij}]$. Тогда имеем

$$[S_{ij}]=\begin{bmatrix} S_1 & 0 & 0 \\ 0 & S_2 & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix}.$$

Компоненты тензора в системе Ox_i' вычисляются с помощью уравнения (1.22)

$$S_{ij}'=a_{ik}a_{jl}S_{kl} \qquad (S_{ij}'=S_{ji}'). \qquad (2.28)$$

Используя значения a_{ij} и S_{ij}, находим, что преобразованный тензор имеет вид

$$\begin{bmatrix} S'_{11} & S'_{12} & 0 \\ S'_{12} & S'_{22} & 0 \\ 0 & 0 & S_3 \end{bmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} S'_{11} &= S_1 \cos^2\theta + S_2 \sin^2\theta, \\ S'_{22} &= S_1 \sin^2\theta + S_2 \cos^2\theta, \\ S'_{12} &= -S_1 \sin\theta\cos\theta + S_2 \sin\theta\cos\theta. \end{aligned} \tag{2.29}$$

Заметим, что изменились только четыре компоненты в левой верхней части тензора. Уравнения (2.29) можно записать в виде

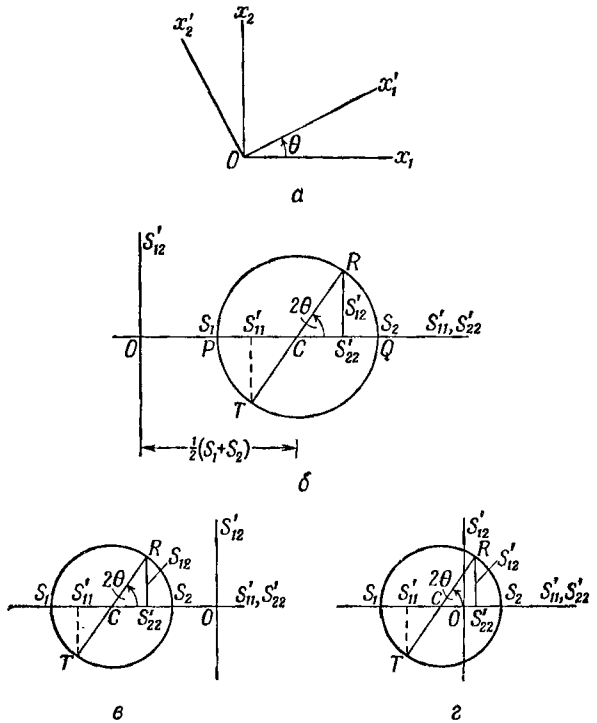
$$\begin{aligned} S'_{11} &= \frac{1}{2}(S_1 + S_2) - \frac{1}{2}(S_2 - S_1)\cos 2\theta, \\ S'_{22} &= \frac{1}{2}(S_1 + S_2) + \frac{1}{2}(S_2 - S_1)\cos 2\theta, \\ S'_{12} &= \frac{1}{2}(S_2 - S_1)\cos 2\theta. \end{aligned} \tag{2.30}$$

Полученный результат можно представить графически (фиг. 14, *б*). Предположим, что $S_1 < S_2$. Отметим на горизонтальной оси две точки P и Q на расстояниях от O, равных соответственно S_1 и S_2. Проведем затем окружность с центром C, взяв PQ в качестве диаметра. Построим радиус CR так, чтобы угол между CR и CQ, измеренный против часовой стрелки, составлял 2θ (угол θ определяется так же, как и на фиг. 14, *а*). Тогда, так как $OC = {}^1/_2(S_1 + S_2)$ и $CR = {}^1/_2(S_2 - S_1)$, на основании уравнений (2.30) получаем, что координаты точки R в системе координат, изображенной на чертеже, будут равны S'_{22} и S'_{12}. Если продолжить RC до пересечения с окружностью в точке T, то абсцисса T равна S'_{11}. Это построение, называемое *построением окружности Мора*, дает наглядную картину изменения S'_{11}, S'_{22} и S'_{12} при повороте осей координат.

Когда Ox'_1 на фиг. 14, *а* поворачивается от Ox_1 к Ox_2, угол θ изменяется от 0 до ${}^1/_2\pi$ и R движется вдоль верхней половины окружности, изображенной на фиг. 14, *б*, от Q до P. Очевидно, что S'_{11} и S'_{22} всегда имеют промежуточные значения между S_1 и S_2 и достигают экстремальных значений, когда точка R совпадает с P или Q, т. е. когда оси Ox'_i совпадают с главными осями. Легко видеть также, что $(S'_{11} + S'_{22})$ имеет неизменное значение при любом положении осей координат; следовательно, $(S'_{11} + S'_{22})$ является *инвариантом* этого преобразования

$$S'_{11} + S'_{22} = S_1 + S_2.$$

Компонента S'_{12} достигает наибольшего значения, равного $^1/_2(S_2-S_1)$, когда $2\theta = {}^1/_2\pi$, или $\theta = {}^1/_4\pi$. Если Ox'_1 вращается в обратном направлении, то точка R тоже движется в обратном направлении. Значение S'_{12} отрицательно, когда R лежит ниже Q.



Фиг. 14. Построение окружности Мора.

а — поворот осей координат; *б* — случай, когда S_1 и S_2 положительны; *в* — случай, когда S_1 и S_2 отрицательны; *г* — случай, когда S_1 и S_2 противоположны по знаку.

На фиг. 14, *б* значения S_1 и S_2 положительны, но построение остается справедливым и в том случае, когда оба значения отрицательны, как показано на фиг. 14, *в*, а также при противоположных знаках S_1 и S_2 (фиг. 14, *г*). Значения S'_{22} и S'_{12} по-прежнему являются координатами R, а значение S'_{11} — абсциссой T; при этом во всех случаях необходимо учитывать знаки.

Если известны значения S'_{11}, S'_{12}, S'_{22}, то можно использовать окружность Мора при нахождении главных компонент S_1 и S_2. Уравнения $R=(S'_{22}, S'_{12})$ и $T=(S'_{11}, -S'_{12})$ определяют окружность;

точки P и Q, в которых окружность пересекает горизонтальную ось, дают значения S_1 и S_2. На практике это построение полезно главным образом как быстрый способ вывода формул. Например, если S'_{11}, S'_{12} и S'_{22} заданы, то из фиг. 14, *б* очевидно, что

$$\begin{aligned} S_1 &= OC - CP = \frac{1}{2}(S'_{11} + S'_{22}) - r, \\ S_2 &= OC + CQ = \frac{1}{2}(S'_{11} + S'_{22}) + r, \end{aligned} \tag{2.31}$$

и

$$\operatorname{tg} 2\theta = \frac{2S'_{12}}{S'_{22} - S'_{11}}, \tag{2.32}$$

где

$$r = CR = \sqrt{\frac{1}{4}(S'_{22} - S'_{11})^2 + S'^2_{12}}.$$

Если нужно рассмотреть две системы координат, скажем Ox'_i и Ox''_i, ни одна из которых не является главной, то, пользуясь окружностью Мора, можно написать формулы, связывающие соответственные компоненты. Кроме того, иногда нужно узнать, как быстро изменяется некоторая компонента при повороте осей координат. Из фиг. 14, *б* ясно, например, что S'_{12} изменяется медленнее всего при $\theta = \pi/4$ и быстрее всего при $\theta = 0$.

При построении фиг. 14, *а — г* мы предполагали, что вращение системы происходит вокруг оси Ox_3 и что $S_1 < S_2$. На практике часто приходится применять это построение для случаев, когда порядок осей не соответствует рассмотренной схеме. Поэтому предлагается следующий общий способ построения. Из двух главных компонент, участвующих в преобразовании, выбирается наибольшая и вертикально вверх проводится соответствующая ось (см. фиг. 14, *а*). Вправо откладывается ось для меньшей компоненты. Затем вводятся любые удобные обозначения осей и даются соответствующие обозначения осей на чертежах фиг. 14, *б*, *в* или *г*.

2. Поворот вокруг произвольной оси. На практике чаще всего используется построение окружности Мора, описанное в § 4, п. 1, однако построение остается справедливым и в том случае, когда ось вращения Ox_3 не является главной осью тензора. Если вспомнить свойства характеристической поверхности второго порядка (см. гл. I, § 4), то можно видеть, что рассмотренное выше построение тесно связано с нахождением главных осей одного из главных сечений характеристической поверхности. Аналогично мы можем рассмотреть произвольное центральное сечение и применить описанное построение для нахождения его главных осей.

В этом случае по-прежнему справедливо преобразование (2.27), но, так как Ox_i не являются больше главными осями, уравнения (2.28) содержат большее число членов. Тензор, приведенный к главным осям Ox_1 и Ox_2 рассматриваемого сечения и обычной оси Ox_3, имеет вид

$$\begin{bmatrix} S_{11} & 0 & S_{31} \\ 0 & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{23} & S_{33} \end{bmatrix}.$$

Компоненты тензора в системе координат Ox'_i записываются в виде

$$\begin{aligned} S'_{11} &= S_{11}\cos^2\theta + S_{22}\sin^2\theta, \\ S'_{22} &= S_{11}\sin^2\theta + S_{22}\cos^2\theta, \\ S'_{33} &= S_{33}, \\ S'_{12} &= -S_{11}\sin\theta\cos\theta + S_{22}\sin\theta\cos\theta, \\ S'_{23} &= -S_{13}\sin\theta + S_{23}\cos\theta, \\ S'_{31} &= S_{13}\cos\theta + S_{23}\sin\theta. \end{aligned} \tag{2.33}$$

Таким образом, для компонент S'_{11}, S'_{22} и S'_{12} безразлично, является ли Ox_3 главной осью или нет, и построение окружности Мора одинаково применимо в обоих случаях.

§ 5. Эллипсоид значений тензора

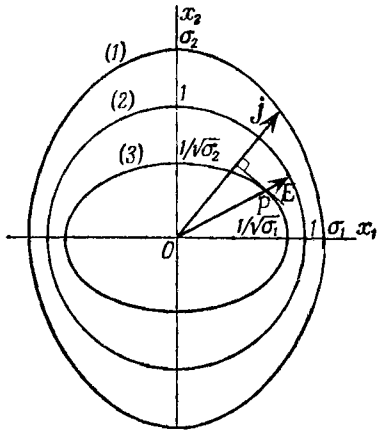
В гл. I, § 4 мы видели, что характеристическая поверхность второго порядка есть геометрическое представление симметричного тензора второго ранга $[S_{ij}]$. Наряду с ней имеется другая представляющая интерес поверхность, связанная с $[S_{ij}]$, а именно поверхность, уравнение которой, приведенное к главным осям $[S_{ij}]$, имеет вид

$$\frac{x_1^2}{S_1^2} + \frac{x_2^2}{S_2^2} + \frac{x_3^2}{S_3^2} = 1. \tag{2.34}$$

Эта поверхность есть эллипсоид (заметим, что она никогда не является гиперболоидом) с полуосями $|S_1|$, $|S_2|$ и $|S_3|$.

Рассмотрим снова в качестве примера удельную электропроводность. Мы знаем (см. стр. 18), что если задано поле $\boldsymbol{E}$ единичной напряженности, приложенное в определенном направлении (фиг. 15), то тем самым определена плотность тока $\boldsymbol{j}$. Если вектор $\boldsymbol{E}$ поворачивается вокруг O, причем его длина остается неизменной, то вектор $\boldsymbol{j}$ тоже будет вращаться, но при этом изменяет свою длину. Докажем теперь, что конец вектора $\boldsymbol{j}$ будет описывать поверхность (2.34),

построенную для тензора удельной электропроводности $[\sigma_{ij}]$ [поверхность (*1*) на фиг. 15].



Фиг. 15. Главные сечения эллипсоида удельной электропроводности (*1*), единичной сферы (*2*) и характеристической поверхности удельной электропроводности (*3*).

Пусть $\boldsymbol{E}=[E_1, E_2, E_3]$. Тогда $\boldsymbol{j}=[j_1, j_2, j_3]=[\sigma_1 E_1, \sigma_2 E_2, \sigma_3 E_3]$. Так как по условию $E_1^2+E_2^2+E_3^2=1$, то

$$\frac{j_1^2}{\sigma_1^2}+\frac{j_2^2}{\sigma_2^2}+\frac{j_3^2}{\sigma_3^2}=1.$$

Следовательно, конец вектора $\boldsymbol{j}$ лежит на эллипсоиде

$$\frac{x_1^2}{\sigma_1^2}+\frac{x_2^2}{\sigma_2^2}+\frac{x_3^2}{\sigma_3^2}=1.$$

Эта поверхность определяет *длину* $\boldsymbol{j}$, если направление $\boldsymbol{j}$ уже известно; чтобы найти *направление* $\boldsymbol{j}$, мы можем использовать свойство радиуса-вектора и нормали характеристической поверхности для удельной электропроводности [поверхность (*3*) на фиг. 15].

РЕЗЮМЕ

Преобразование осей (§ 1). Если Ox_i и Ox_i' — две системы ортогональных координат и закон преобразования одной в другую имеет вид

$$x_i'=a_{ij}x_j,$$

то между направляющими косинусами a_{ij} имеются следующие соотношения, называемые *соотношениями ортогональности*:

$$a_{ik}a_{jk}=\delta_{ij}, \qquad (2.6)$$

$$a_{ki}a_{kj}=\delta_{ij}, \qquad (2.8)$$

где

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j), \\ 0 & (i \neq j). \end{cases} \tag{2.7}$$

Если правая (левая) система координат при преобразовании остается правой (левой), то

$$|a_{ij}| = +1;$$

если же при преобразовании правая система переходит в левую (или наоборот), то

$$|a_{ij}| = -1.$$

Определение векторного произведения (§ 2). Если p_i и q_i — полярные векторы, то векторное произведение p_i и q_i есть антисимметричный тензор V_{ij}, компоненты которого задаются в виде

$$V_{ij} = -p_i q_j + p_j q_i. \tag{2.14}$$

Если три независимые компоненты V_{ij} обозначить через r_i, где

$$r_1 = p_2 q_3 - p_3 q_2, \quad r_2 = p_3 q_1 - p_1 q_3, \quad r_3 = p_1 q_2 - p_2 q_1, \tag{2.16}$$

то r_i преобразуются согласно закону

$$r'_i = \pm a_{ij} r_j; \tag{2.18}$$

знак плюс ставится при преобразовании, сохраняющем правую (левую) систему координат правой (левой); знак минус ставится, когда правая система переходит в левую (или наоборот).

Аксиальные векторы (§ 2). Величины, преобразующиеся по закону (2.18), образуют компоненты так называемого *аксиального вектора*. Истинный (полярный) вектор может быть изображен стрелкой определенной длины и направления (фиг. 12, *а*). Аксиальный же вектор изображается отрезком определенной длины и ориентации с заданным направлением вращения (фиг. 12, *б*).

Главные оси тензора (§ 3). Главные компоненты симметричного тензора S_{ij} являются тремя корнями кубического уравнения для λ

$$|S_{ij} - \lambda\delta_{ij}| = 0, \tag{2.23}$$

называемого *вековым уравнением*. Если λ' — корень этого уравнения, то направление соответствующей главной оси можно определить, находя из уравнений

$$S_{ij} X'_j = \lambda' X'_i \tag{2.24}$$

отношения $X'_1 : X'_2 : X'_3$.

Построение окружности Мора (§ 4). Если система координат Ox'_i симметричного тензора второго ранга S_{ij} повернута вокруг одной из осей, например Ox'_3 (см. фиг. 14, *а*), то преобразованные

компоненты S'_{11}, S'_{22}, S'_{12} находятся из построения, показанного на фиг. 14, *б* — *г*; при этом

$$R=(S'_{22},\ S'_{12}),\quad T=(S'_{11},\ -S'_{12}),\quad \angle RCQ=20.$$

Эллипсоид значений тензора (§ 5). Пусть два вектора p_i и q_l связаны линейными соотношениями

$$p_i=S_{ij}q_j\qquad (S_{ij}=S_{ji}).$$

Тогда, если q_l имеет единичную длину и вращается вокруг начала координат, то конец вектора p_i описывает эллипсоид

$$\frac{x_1^2}{S_1^2}+\frac{x_2^2}{S_2^2}+\frac{x_3^2}{S_3^2}=1. \tag{2.34}$$

З А Д А Ч И

1. Доказать, используя обозначения с индексами суммирования, что квадрат длины вектора $[p_i]$, определяемый как p_ip_i, не изменяется при преобразовании координат. (Такие величины называются *инвариантами*.)

2. Показать с помощью окружности Мора, что

$$\begin{vmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{12} & S_{22} \end{vmatrix}$$

— инвариант для поворота вокруг оси x_3. Дать геометрическую интерпретацию.

3. Используя окружность Мора, решить еще раз задачи 3а — 3д гл. I (см. стр. 49).

4. Привести следующие тензоры к главным осям, используя построение окружности Мора:

а) $\begin{bmatrix} 11{,}06 & 3{,}08 & 0 \\ 3{,}08 & 18{,}94 & 0 \\ 0 & 0 & 43 \end{bmatrix}$, б) $\begin{bmatrix} -6 & -3\sqrt{3} & 0 \\ -3\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 10 \end{bmatrix}$,

в) $\begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{bmatrix}$, г) $\begin{bmatrix} 8 & 0 & -4 \\ 0 & 12 & 0 \\ -4 & 0 & 2 \end{bmatrix}$.

5. Необходимо повернуть тензор

$$\begin{bmatrix} -1 & 3 & 8 \\ 3 & 10 & 6 \\ 8 & 6 & 2 \end{bmatrix}$$

вокруг оси x_3 так, чтобы компонента 22 стала равной нулю. Найти два возможных угла поворота, меньших 90°, и проиллюстрировать решение построением окружности Мора.

6. Доказать, что поверхность, радиус-вектор которой в данном направлении прямо пропорционален величине S, характеризующей свойство в этом направлении, является овалоидом

$$(S_1x_1^2+S_2x_2^2+S_3x_3^2)^2=(x_1^2+x_2^2+x_3^2)^3.$$

(Строго говоря, это уравнение поверхности, построенной вокруг начала координат, вместе с самим началом координат.)

Часть II

РАВНОВЕСНЫЕ СВОЙСТВА

Гл. III—IX посвящены обсуждению некоторых свойств кристаллов в свете положений, развитых в двух предыдущих главах. Рассматриваются лишь такие свойства, которые относятся к равновесным состояниям и термодинамически обратимым процессам. Значение этого положения разъясняется в гл. X, в которой дается единое рассмотрение обсуждаемых физических свойств.

Глава III

ПАРАМАГНИТНАЯ И ДИАМАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

Магнитная восприимчивость парамагнитных и диамагнитных кристаллов является типичным анизотропным свойством, которое описывается тензором второго ранга. В данной главе мы сначала дадим определение этого свойства и затем покажем, как из такого определения получаются выражения, описывающие свойства кристаллов в магнитном поле. Мы не будем касаться ферромагнетизма; это анизотропное свойство кристаллов представляет большой интерес как с теоретической, так и с практической точки зрения, но оно не подходит для рассмотрения в пределах той схемы изложения, которая принята в настоящей книге.

§ 1. Общие соотношения

Предполагается, что читатель знаком с элементарной теорией магнетизма изотропных тел. Мы будем иметь дело со следующими тремя векторами:

$\boldsymbol{H}$ — *интенсивность магнитного поля* или *напряженность поля*;

$\boldsymbol{I}$ — *интенсивность намагничивания* или *намагниченность*, представляющая собой магнитный момент на единицу объема кристалла;

$\boldsymbol{B}$ — *магнитная индукция* или *плотность магнитного потока*.

Эти векторы связаны между собой соотношением

$$\boldsymbol{B} = \mu_0 \boldsymbol{H} + \boldsymbol{I}, \tag{3.1}$$

где μ_0 — скалярная константа, магнитная проницаемость вакуума, со значением в рационализированной системе MKS [1]), равным $4\pi/10^7 = 1{,}257 \cdot 10^{-6}$. Определение векторов $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{I}$ и $\boldsymbol{B}$ можно найти в обычных учебниках, например [1, 82, 83] [2]).

---

[1]) В настоящей книге везде используется рационализированная система MKS. Описание этой системы вместе с таблицами перехода дано в книге Стрэттона [87]. В книге Слетера и Франка [83] имеется полезное обсуждение систем единиц. См. также книгу Сее и Пиддака [79] и более полную книгу Мак-Гриви [67]. (См. также [115]. — *Прим. перев.*)

[2]) См. также [105, 117]. — *Прим. перев.*

Во многих изотропных средах намагниченность прямо пропорциональна напряженности поля (исключая область очень высоких полей), поэтому можно записать

$$\boldsymbol{I} = \mu_0 \psi \boldsymbol{H}, \tag{3.2}$$

где $\boldsymbol{H}$ — напряженность поля в данной среде и ψ — константа, называемая *магнитной восприимчивостью*. Из уравнения (3.1) видно, что $\boldsymbol{I}$ и $\mu_0\boldsymbol{H}$ имеют одинаковую размерность; следовательно, ψ — безразмерная величина. Этим объясняется, почему величина μ_0 включена в уравнение (3.2)[1]). Величина ψ безразмерна, но поскольку $\boldsymbol{I}$ относится к единице объема, ψ в уравнении (3.2) называется *объемной магнитной восприимчивостью*. Если восприимчивость ψ положительна, то среда называется *парамагнитной*; если же она отрицательна—среда диамагнитна.

Хотя ψ и безразмерная величина, численное значение магнитной восприимчивости для данного вещества зависит от того, употребляется ли рационализированная или нерационализированная система единиц. Чтобы получить введенное нами значение объемной восприимчивости в рационализированной системе единиц, надо значение ψ в нерационализированной системе умножить на 4π. В литературе часто используются и другие величины: ψ/ρ — *удельная магнитная восприимчивость*, или *магнитная восприимчивость на единицу массы*, и $A\psi/\rho$ — *атомная* или *молярная магнитная восприимчивость*, где ρ—плотность, а A — атомный или молекулярный вес. Заметим, что эти величины определены здесь в рационализированной системе единиц.

Объединяя уравнения (3.1) и (3.2), получаем

$$\boldsymbol{B} = (1+\psi)\mu_0\boldsymbol{H} = \mu\boldsymbol{H}, \tag{3.3}$$

где

$$\mu = \mu_0(1+\psi). \tag{3.4}$$

Величина μ есть *магнитная проницаемость* среды. Иногда оказывается полезным ввести безразмерное отношение

$$M = \frac{\mu}{\mu_0} = 1+\psi,$$

называемое *относительной магнитной проницаемостью*.

В кристаллах вектор $\boldsymbol{I}$ в общем случае не параллелен $\boldsymbol{H}$ и уравнение (3.2) заменяется на

$$I_i = \mu_0 \psi_{ij} H_j, \tag{3.5}$$

---

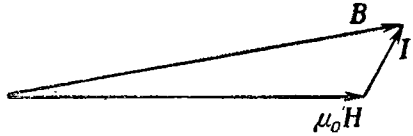
[1]) В отношении обозначений и терминологии разные авторы придерживаются различных взглядов. Некоторые заменяют уравнение (3.1) уравнением $\boldsymbol{B} = \mu_0(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{I})$ и не включают μ_0 в уравнение (3.2); при таком определении сохраняется тот же смысл ψ, но смысл $\boldsymbol{I}$ изменяется. Другие авторы просто опускают μ_0 в уравнении (3.2); в этом случае $\boldsymbol{I}$ имеет такой же смысл, как в данной книге, но значение ψ изменяется; размерность этой величины будет теперь одинакова с размерностью μ_0.

где ψ_{ij} — компоненты *тензора магнитной восприимчивости* [1]. Теперь уравнение (3.1) является общим соотношением, справедливым независимо от того, параллелен вектор I вектору H или нет (фиг. 16). Можно записать в тензорном обозначении, что

$$B_i = \mu_0 H_i + I_i. \qquad (3.6)$$

Следовательно,

$$B_i = \mu_0 (H_i + \psi_{ij} H_j) = \\ = \mu_0 (\delta_{ij} + \psi_{ij}) H_j$$



Фиг. 16. Связь между векторами H, B и I.

в соответствии со свойством символа δ_{ij} (см. стр. 53). Последнее уравнение можно записать в виде

$$B_i = \mu_{ij} H_j, \qquad (3.7)$$

где

$$\mu_{ij} = \mu_0 (\delta_{ij} + \psi_{ij}). \qquad (3.8)$$

Так как $\mu_0 \delta_{ij}$ и $\mu_0 \psi_{ij}$ — тензоры второго ранга, μ_{ij} также является тензором второго ранга — *тензором магнитной проницаемости* [2]. Уравнение (3.8) есть обобщение для анизотропной среды уравнения (3.4). Выписывая его полностью, получаем

$$\begin{bmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} & \mu_{13} \\ \mu_{21} & \mu_{22} & \mu_{23} \\ \mu_{31} & \mu_{32} & \mu_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_0 (1+\psi_{11}) & \mu_0 \psi_{12} & \mu_0 \psi_{13} \\ \mu_0 \psi_{21} & \mu_0 (1+\psi_{22}) & \mu_0 \psi_{23} \\ \mu_0 \psi_{31} & \mu_0 \psi_{32} & \mu_0 (1+\psi_{33}) \end{bmatrix}.$$

[1] Так как плотность электрического тока j есть полярный вектор, то из уравнения электромагнитного поля $\operatorname{rot} H = j + \dot{D}$ следует, что H является аксиальным вектором (различие между полярным и аксиальным векторами см. в гл. II, § 2). Для подтверждения этого отметим, что для определения направления H относительно направления тока необходимо воспользоваться правилом правого винта. Из приведенного выше уравнения (3.1) видно, что I и B также являются аксиальными векторами. Читатель может легко доказать, что, поскольку I_i и H_j в уравнении (3.5) преобразуются как компоненты аксиальных векторов, ψ_{ij} преобразуются как компоненты обычного (полярного) тензора второго ранга.

Тем не менее в заключении о том, что H есть аксиальный вектор, имеется элемент неопределенности. Это заключение зависит от *предположения* о полярности вектора j. Приведенное выше уравнение поля удовлетворяется и в том случае, если j — аксиальный вектор, а H — полярный. Вообще говоря, уравнения электромагнитного поля удовлетворяются как в том случае, когда мы считаем E, D, P, j полярными векторами, а H, B, I — аксиальными, так и при обратном положении. Мы выбрали одну из двух возможностей, считая плотность электрических зарядов скаляром и, следовательно, j — полярным вектором. Однако мы вполне могли бы считать плотность распределения магнитных зарядов скаляром; тогда мы пришли бы к заключению, что H (сила на единицу магнитного заряда) является полярным вектором. Следует отметить, что оба способа описания приводят к одному и тому же закону преобразования и, следовательно, к одинаковому „тензорному характеру“ [ψ_{ij}].

[2] Легко показать, что сумма (или разность) любых двух тензоров одного ранга есть другой тензор этого же ранга.

Тензор относительной магнитной проницаемости кристаллов можно определить как

$$M_{ij} = \frac{\mu_{ij}}{\mu_0} = \delta_{ij} + \psi_{ij}.$$

В § 2 путем рассмотрения энергии намагниченного кристалла доказывается, что μ_{ij} образуют симметричный тензор, т. е.

$$\mu_{ij} = \mu_{ji}. \tag{3.9}$$

Тогда тензор $[\psi_{ij}]$ также симметричен, так как из уравнения (3.8) и соотношения (3.9) следует, что

$$\psi_{ij} = \frac{\mu_{ij}}{\mu_0} - \delta_{ij} = \frac{\mu_{ji}}{\mu_0} - \delta_{ji} = \psi_{ji}.$$

Таким образом, оба тензора $[\mu_{ij}]$ и $[\psi_{ij}]$ могут быть приведены к общим главным осям. *Когда поле* $\boldsymbol{H}$ *направлено вдоль любого из этих трех взаимно ортогональных направлений,* $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{I}$ *и* $\boldsymbol{B}$ *параллельны друг другу так же, как это имеет место для изотропных тел.* Если $\boldsymbol{H}$, например, лежит вдоль главной оси, обозначенной через Ox_1, то мы имеем

$$\boldsymbol{B} = \mu_1 \boldsymbol{H}, \quad \boldsymbol{I} = \mu_0 \psi_1 \boldsymbol{H},$$

$$\mu_1 = \mu_0 (1 + \psi_1).$$

Следовательно, магнитная восприимчивость кристалла полностью определяется значениями и направлениями его главных восприимчивостей ψ_1, ψ_2, ψ_3. Эти восприимчивости, конечно, подчиняются любым ограничениям, которые может накладывать симметрия кристалла (см. табл. 3).

Говорят, что кристалл парамагнитен или диамагнитен вдоль данной главной оси, если величина ψ для этого направления соответственно положительна или отрицательна. Имеется несколько кристаллов, которые парамагнитны вдоль одной оси и диамагнитны вдоль другой. Главные восприимчивости диамагнитных и парамагнитных кристаллов обычно лежат в пределах от -10^{-5} до $+10^{-5}$ соответственно; значения ψ для некоторых кристаллов приведены в табл. 4.

Так как в уравнении (3.8) ψ_{ij} малы по сравнению с единицей, компоненты μ_{ij} мало отличаются от компонент $\mu_0 \delta_{ij}$. Чем меньше значения ψ_{ij}, тем меньше $\boldsymbol{I}$ и тем ближе к нулю угол между $\boldsymbol{B}$ и $\boldsymbol{H}$ (см. фиг. 16). Благодаря малости ψ_{ij} можно сделать важное упрощение, которое мы сейчас рассмотрим.

Когда кристалл помещен в магнитное поле, он намагничивается; при этом возникает его собственное магнитное поле, зависящее от восприимчивости, формы и размеров кристалла. Следовательно, действующее магнитное поле в любой точке пространства как внутри, так и вне кристалла не будет равно приложенному полю. Обозначим собственное поле кристалла через $\boldsymbol{H}_c$, а приложенное поле — через $\boldsymbol{H}_a$.

ТАБЛИЦА 4

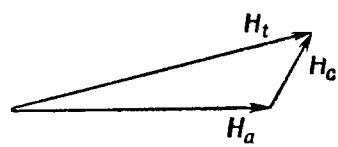
Магнитная восприимчивость парамагнитных и диамагнитных кристаллов *

Кристалл	Система	ψ_1	ψ_2	ψ_3
Арагонит	Орторомбическая . . .	—1,44	—1,42	—1,63
Кварц	Тригональная	—1,51		—1,52
Кальцит	»	—1,24		—1,38
Кадмий	Гексагональная	—1,74		—2,85
Берилл	»	2,76		1,29
Рутил	Тетрагональная	10,5		11,2
Флюорит	Кубическая	—1,14		
Хлорид натрия	»	—1,36		

* Все значения, кроме значения для кадмия, пересчитаны из удельных восприимчивостей, взятых из таблиц [54]; значение для кадмия вычислено по атомной восприимчивости, взятой из работы Бейтса [3]. Умножая значения, приведенные в таблице, на 10^{-6}, получаем объемные восприимчивости в рационализированной системе единиц.

Поле $\boldsymbol{H}_a$ создается источниками, внешними по отношению к кристаллу; оно существовало бы и в отсутствие кристалла. Действующее, или полное, поле (обозначим его $\boldsymbol{H}_t$), существующее в любой точке пространства, есть сумма полей, создаваемых внешними источниками и самим кристаллом (фиг. 17):

$$\boldsymbol{H}_t = \boldsymbol{H}_a + \boldsymbol{H}_c. \qquad (3.10)$$



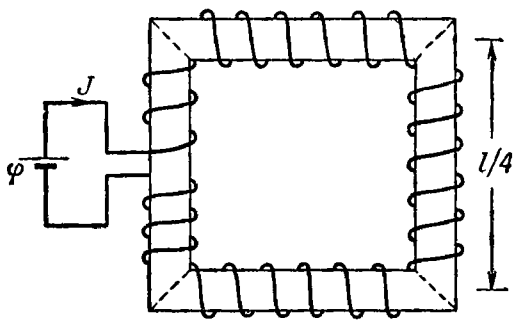
Фиг. 17. Связь между векторами $\boldsymbol{H}_t$, $\boldsymbol{H}_a$ и $\boldsymbol{H}_c$.

Поля $\boldsymbol{H}_a$ и $\boldsymbol{H}_t$ будут в общем случае изменяться от точки к точке и отличаться друг от друга как внутри кристалла, так и вне его.

В уравнения (3.2) и (3.5) входит действующее поле $\boldsymbol{H}_t$. Однако, так как поле кристалла $\boldsymbol{H}_c$ пропорционально I/μ_0, его искажающее влияние на $\boldsymbol{H}_a$ мало и им обычно можно пренебречь. Следовательно, если кристалл помещен в однородное поле, $\boldsymbol{H}_t$ почти совпадает с $\boldsymbol{H}_a$, и поле практически одинаково как внутри кристалла, так и вне его. Таким образом, парамагнитный и диамагнитный эффекты в *однородном поле* почти не зависят от формы кристалла. В § 3, п. 3, будет показано, почему это утверждение справедливо только для однородного поля. Необходимо подчеркнуть, что мы рассматриваем только пара- и диамагнетики и что последний вывод несправедлив для ферромагнетиков.

§ 2. Энергия намагничивания кристалла

Энергию, запасаемую телом при его намагничивании, можно найти, определив работу, которую необходимо совершить, чтобы намагнитить это тело. Последнюю в свою очередь можно получить, вычислив сначала работу, затраченную на малое изменение намагниченности. Намагниченность кристалла можно изменять различными способами. Например, ее можно изменить, перемещая постоянные магниты или меняя ток в соленоиде. Важно уяснить, что работа, необходимая для данного изменения намагниченности тела, может зависеть от того, как это изменение производится. Ниже будет показано (для частного случая), что если это изменение вызывается полем, созданным током



Фиг. 18. Электрическая схема для определения энергии намагниченного кристалла.

соленоида, и если это поле целиком заключено в кристалле, то полная затраченная работа будет $dW = v\boldsymbol{H} \cdot d\boldsymbol{B}$, где v — объем кристалла. Если же изменение поля вызывается перемещением постоянных магнитов, то можно показать, что произведенная работа будет $dW = -v\boldsymbol{I} \cdot d\boldsymbol{H}$. Причина такого различия заключается в том, что работа зависит не только от изменения намагниченности тела, но и от всех изменений поля как внутри кристалла, так и вне его; изменения же поля различны в этих двух случаях. Хотя изменение намагниченности тела в обоих случаях одинаково, изменение энергии системы в целом различно. Полное рассмотрение этого вопроса дано в приложении 6. Для наших целей в настоящей главе достаточно констатировать, что: 1) выражение, которое мы собираемся вывести для dW, не является единственно возможным, 2) наш конечный результат — симметрия $[\mu_{ij}]$ — получится какое бы из различных возможных выражений мы ни использовали.

Рассмотрим теперь следующий простой случай. Длинный кристаллический стержень длиной l и поперечным сечением A разрезан на четыре равные части, которые затем сложены так, что образуют квадратную рамку, показанную на фиг. 18. На рамку навит соленоид,

имеющий сопротивление R и n витков на единицу длины. Через соленоид протекает ток J от батареи, э. д. с. которой равна φ. Если длина l велика по сравнению с A, то поле вдоль каждой стороны рамки практически однородно и всецело заключено в кристалле; неоднородное поле вблизи углов рамки охватывает только очень малые части полного объема. Найдем выражение для работы, затрачиваемой на малое изменение намагниченности кристалла. Поле $\boldsymbol{H}$ целиком определяется током J и действует вдоль оси каждой стороны соленоида

$$H = nJ.$$

В общем случае индукция $\boldsymbol{B}$ в каждой стороне рамки будет направлена наклонно к оси. Пусть B_n — компонента $\boldsymbol{B}$ вдоль оси соленоида в направлении $\boldsymbol{H}$. Тогда в цепи при изменении $\boldsymbol{B}$ будет индуцироваться э. д. с.

$$Anl\frac{dB_n}{dt}.$$

Следовательно, увеличивая э. д. с. в цепи, мы получаем

$$\varphi - Anl\frac{dB_n}{dt} = JR.$$

Работа, затраченная батареей за время dt, будет

$$\varphi Jdt = J^2Rdt + AnlJdB_n = J^2Rdt + AlHdB_n = J^2Rdt + v\boldsymbol{H}\cdot d\boldsymbol{B},$$

где v — объем кристалла ($v = Al$). Направления $\boldsymbol{H}$ и $\boldsymbol{B}$ в последнем уравнении должны быть взяты по отношению к осям кристалла, для того чтобы можно было считать $\boldsymbol{H}$ и $\boldsymbol{B}$ одинаковыми во всех четырех сторонах рамки. Первый член в уравнении для работы представляет собой джоулево тепло. Второй член

$$dW = v\boldsymbol{H}\cdot d\boldsymbol{B} \quad \text{или} \quad dW = vH_i dB_i \tag{3.11}$$

мы интерпретируем как работу, затраченную на изменение намагниченности.

Теперь приравняем это выражение для dW приращению энергии [1]) $d\Psi$ кристалла

$$d\Psi = vH_i dB_i. \tag{3.12}$$

Подставляя уравнение (3.7) в уравнение (3.12), получаем

$$d\Psi = v\mu_{ij}H_i dH_j, \tag{3.13}$$

которое можно записать в развернутом виде

$$d\Psi = v(\mu_{11}H_1dH_1 + \mu_{12}H_1dH_2 + \mu_{13}H_1dH_3 + \mu_{21}H_2dH_1 + \mu_{22}H_2dH_2 + \\ + \mu_{23}H_2dH_3 + \mu_{31}H_3dH_1 + \mu_{32}H_3dH_2 + \mu_{33}H_3dH_3). \tag{3.14}$$

[1]) Строго говоря, для изотермического и обратимого изменения это есть приращение *свободной энергии* (см. приложение 6).

Следовательно,

$$\frac{1}{v}\frac{\partial \Psi}{\partial H_1} = \mu_{11}H_1 + \mu_{21}H_2 + \mu_{31}H_3 \qquad (3.15)$$

и

$$\frac{1}{v}\frac{\partial \Psi}{\partial H_2} = \mu_{12}H_1 + \mu_{22}H_2 + \mu_{32}H_3. \qquad (3.16)$$

Теперь мы получили Ψ как функцию одних только независимых переменных H_1, H_2 и H_3 [1]); можно доказать (см., например, [95]), что для такой функции

$$\frac{\partial}{\partial H_1}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial H_2}\right) = \frac{\partial}{\partial H_2}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial H_1}\right).$$

Отсюда, дифференцируя (3.15) по H_2 и (3.16) по H_1, получаем

$$\mu_{12} = \mu_{21}.$$

Аналогичным путем можно доказать, что

$$\mu_{13} = \mu_{31} \quad \text{и} \quad \mu_{23} = \mu_{32}.$$

Следовательно, тензор $[\mu_{ij}]$ симметричен.

Интегрируя уравнение (3.14), находим выражение для энергии намагниченного кристалла [1])

$$\Psi = v\left(\frac{1}{2}\mu_{11}H_1^2 + \mu_{12}H_1H_2 + \mu_{13}H_1H_3 + \frac{1}{2}\mu_{22}H_2^2 + \right.$$
$$\left. + \mu_{23}H_2H_3 + \frac{1}{2}\mu_{33}H_3^2\right), \qquad (3.17)$$

или в сокращенной записи

$$\Psi = \frac{1}{2}v\mu_{ij}H_iH_j.$$

§ 3. Силы и моменты сил

Определение силы и момента сил, действующих на кристалл в магнитном поле, дает возможность измерять его магнитную восприимчивость [4, 62]. В общем случае сила и момент сил зависят не только от восприимчивости кристалла, но и от его формы, ориентации и объема, а также от напряженности поля и ее изменения вдоль образца. Чтобы упростить изложение, мы будем рассматривать различные случаи по отдельности.

---

[1]) Так как уравнение (3.12) определяет лишь изменение Ψ, сама функция Ψ содержит произвольную константу, которую удобно выбрать так, чтобы Ψ была равна нулю, когда

$$H_1 = H_2 = H_3 = 0.$$

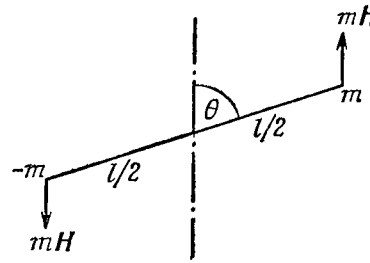
1. Момент сил, действующий на кристалл в однородном магнитном поле. Предположим, что магнитный диполь с моментом $\boldsymbol{M}$ расположен в однородном магнитном поле напряженностью $\boldsymbol{H}$ так, что ось диполя составляет угол θ с направлением $\boldsymbol{H}$ (фиг. 19). Можно представить себе, что диполь состоит из магнитных зарядов $-m$ и m. Если обозначить через $\boldsymbol{l}$ вектор, направленный от $-m$ к m, то $\boldsymbol{M} = m\boldsymbol{l}$. На рассматриваемый диполь будет действовать механический момент, образованный двумя противоположными силами $-m\boldsymbol{H}$ и $m\boldsymbol{H}$ (пара сил), приложенными на расстоянии $l\sin\theta$. Величина этого момента определяется формулой

$$G = mHl\sin\theta = MH\sin\theta.$$

Момент действует так, чтобы повернуть $\boldsymbol{M}$ параллельно $\boldsymbol{H}$. В векторном обозначении

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{M} \times \boldsymbol{H}. \qquad (3.18)$$

Подчеркнем, что здесь $\boldsymbol{H}$ — напряженность поля, создаваемого источниками, внешними по отношению к диполю.



Фиг. 19. Пара сил, действующая на магнитный диполь в однородном магнитном поле.

Формула (3.18) справедлива как в том случае, когда диполь является постоянным, так и в том, когда он индуцирован самим полем. Мы уже видели, что если намагничиваемый кристалл помещен в однородное поле, то индуцированный момент $\boldsymbol{M}$ в общем случае не параллелен $\boldsymbol{H}$, поэтому на такой кристалл будет действовать механический момент. В изотропном же веществе или кубическом кристалле, если влиянием формы можно пренебречь, вектор $\boldsymbol{M}$ параллелен $\boldsymbol{H}$ и поэтому механический момент равен нулю.

В тензорном обозначении формула (3.18) записывается в виде

$$G_{ij} = -M_iH_j + M_jH_i. \qquad (3.19)$$

Тензор G_{ij}, представляющий собой антисимметричный тензор с тремя независимыми ненулевыми компонентами, эквивалентен аксиальному вектору (см. гл. II, § 2). Если v — объем кристалла, то мы имеем

$$M_i = v\mu_0\psi_{ij}H_j. \qquad (3.20)$$

Отсюда

$$G_{ij} = v\mu_0(-\psi_{ik}H_kH_j + \psi_{jk}H_kH_i). \qquad (3.21)$$

Если за оси координат взяты главные оси ψ_{ij}, компоненты G_{ij} упрощаются и принимают вид

$$\begin{bmatrix} 0 & -v\mu_0(\psi_1-\psi_2)H_1H_2 & v\mu_0(\psi_3-\psi_1)H_3H_1 \\ v\mu_0(\psi_1-\psi_2)H_1H_2 & 0 & -v\mu_0(\psi_2-\psi_3)H_2H_3 \\ -v\mu_0(\psi_3-\psi_1)H_3H_1 & v\mu_0(\psi_2-\psi_3)H_2H_3 & 0 \end{bmatrix}.$$

Таким образом, момент сил, действующих на кристалл, зависит только от *разностей* между главными магнитными восприимчивостями и не зависит от их абсолютной величины. Это еще раз показывает, что возникновение механического момента обусловлено анизотропией.

Частный случай. Если поле действует в плоскости ψ_1 и ψ_2, то единственной компонентой момента сил будет момент относительно оси Ox_3; эта компонента равна

$$v\mu_0(\psi_1-\psi_2)H_1H_2 = v\mu_0(\psi_1-\psi_2)H^2\sin\varphi\cos\varphi = \\ = \frac{1}{2}v\mu_0(\psi_1-\psi_2)H^2\sin 2\varphi, \qquad (3.22)$$

где φ — угол между $\boldsymbol{H}$ и Ox_1.

Малый момент, обусловленный влиянием формы и ориентации образца в однородном поле. Строго говоря, $\boldsymbol{H}$ в формуле (3.19) есть $\boldsymbol{H}_a$, в то время как $\boldsymbol{H}$ в формуле (3.20) есть $\boldsymbol{H}_t$. Таким образом, если принять во внимание малое поле $\boldsymbol{H}_c$, обусловленное самим кристаллом, формула (3.21) оказывается неточной. Вследствие наличия поля $\boldsymbol{H}_c$ даже на изотропный образец в однородном поле будет действовать момент сил, если поле $\boldsymbol{H}$ не направлено вдоль оси симметрии, так как вектор $\boldsymbol{M}$, оставаясь параллельным $\boldsymbol{H}_t$, не будет строго параллельным $\boldsymbol{H}_a$. Этот момент обусловлен влиянием формы и ориентации. Действительно, в данном приложенном поле момент, действующий на образцы из изотропного кристалла, имеющие одинаковый объем, но разную форму, или по-разному расположенные, будет иметь различную величину. Этот момент можно оценить следующим образом. Так как собственное поле кристалла имеет величину порядка I/μ_0, угол между $\boldsymbol{M}$ и $\boldsymbol{H}_a$ будет величиной порядка $I/(\mu_0 H) = \psi$. Следовательно, момент составляет $\sim vH^2\mu_0\psi^2$. Для сравнения укажем, что, согласно формуле (3.21), момент, действующий на анизотропный кристалл, равен $\sim vH^2\mu_0\psi$, если считать, что разности между главными магнитными восприимчивостями имеют тот же порядок, что и сами восприимчивости. Таким образом, отношение момента, обусловленного влиянием формы или ориентации, к моменту, обязанному своим возникновением анизотропии, имеет величину порядка восприимчивости ψ, которая, как мы знаем, составляет $\sim 10^{-5}$.

2. Сила, действующая на кристалл в неоднородном магнитном поле. Предположим, что магнитный диполь с моментом $\boldsymbol{M}$ помещен в неоднородное магнитное поле. Как и прежде, мы можем считать, что диполь образован магнитными зарядами $-m$ и m, находящимися на малом расстоянии l; обозначим снова вектор, направленный от $-m$ к m, через $\boldsymbol{l}$. При этом i-я компонента поля, действующая на положительный магнитный заряд, будет превышать i-ю компоненту, действующую на отрицательный магнитный заряд, на величину

$$\frac{\partial H_i}{\partial x_j} l_j.$$

Здесь H_l — поле, обусловленное источниками, внешними по отношению к диполю. Таким образом, на диполь будет действовать сила, i-я компонента которой

$$F_i = m\frac{\partial H_i}{\partial x_j} l_j = M_j \frac{\partial H_i}{\partial x_j}. \tag{3.23}$$

Это уравнение справедливо как для постоянного диполя, так и для диполя, индуцированного самим полем. Следовательно, если малый объем v парамагнитного или диамагнитного кристалла, подчиняющегося закону (3.5), помещен в неоднородное поле, на него будет действовать сила

$$F_i = vI_j \frac{\partial H_i}{\partial x_j}, \tag{3.24}$$

или

$$F_i = v\mu_0\psi_{jk}H_k \frac{\partial H_i}{\partial x_j} \tag{3.25}$$

(собственным полем кристалла пренебрегаем). Так как $\operatorname{rot} \boldsymbol{H} = 0$ и $\psi_{jk} = \psi_{kj}$, получаем окончательно

$$F_i = v\mu_0\psi_{jk}H_k \frac{\partial H_j}{\partial x_i}, \tag{3.26}$$

или

$$F_i = \frac{1}{2} v\mu_0\psi_{jk} \frac{\partial}{\partial x_i}(H_j H_k). \tag{3.27}$$

Как частный случай для иллюстрации применения этих уравнений рассмотрим пример, когда кристалл расположен так, что поле действует параллельно направлению одной из главных магнитных восприимчивостей (пусть это направление Ox_1). Тогда $H_2 = H_3 = 0$, и компоненты силы, согласно уравнению (3.26), будут

$$F_1 = v\mu_0\psi_1 H_1 \frac{\partial H_1}{\partial x_1}, \quad F_2 = v\mu_0\psi_1 H_1 \frac{\partial H_1}{\partial x_2}, \quad F_3 = v\mu_0\psi_1 H_1 \frac{\partial H_1}{\partial x_3}, \tag{3.28}$$

или

$$\boldsymbol{F} = \frac{1}{2} v\mu_0\psi_1 \operatorname{grad}(H^2). \tag{3.29}$$

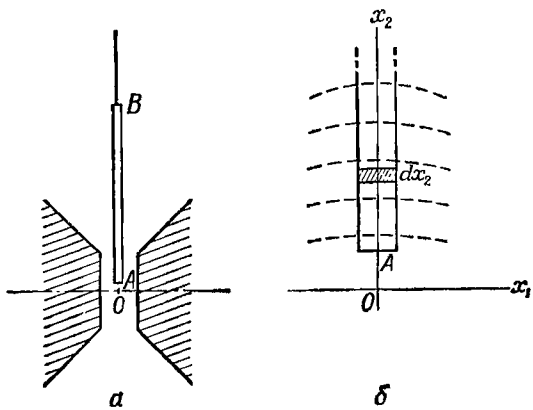
Направление силы в этом случае совпадает с направлением наибольшего изменения H^2 — вывод, который, очевидно, справедлив также и для изотропных тел. Если величина ψ_1 положительна, т. е. кристалл является парамагнетиком в направлении Ox_1, то он будет двигаться в сторону наиболее сильного поля; наоборот, если Ox_1 — диамагнитное направление, кристалл будет стремиться двигаться в сторону наиболее слабого поля.

Измерение силы, действующей на образец в неоднородном поле, часто используется для определения магнитной восприимчивости [4]. Расположение образца схематически показано на фиг. 20, *а*. Длинный тонкий стержень из кристалла подвешивается так, чтобы его ось была вертикальна и нижний конец A находился вблизи средней точки поля между двумя плоскими полюсными наконечниками электро-

магнита, а верхний конец B был вне зазора. Интересно с помощью уравнения (3.26) вычислить силы при таком расположении. Направим оси так, как показано на фиг. 20, *б*; при этом ось x_1 параллельна полю и симметрия поля такова, что вдоль оси Ox_2

$$H_2 = H_3 = 0.$$

Следовательно, в уравнении (3.26) необходимо учитывать только члены с $k = 1$. Дальнейшее рассмотрение показывает, что вдоль направления



Фиг. 20. Схема расположения образца в поле при измерении магнитной восприимчивости.

Ox_2 отлична от нуля только одна первая производная $\partial H_1/\partial x_2 = \partial H_2/\partial x_1$. Следовательно, согласно уравнению (3.26), на каждый элемент объема кристалла dv действуют компоненты силы

$$dF_1 = \mu_0 \psi_{21} H_1 \frac{\partial H_2}{\partial x_1} dv, \quad dF_2 = \mu_0 \psi_{11} H_1 \frac{\partial H_1}{\partial x_2} dv, \quad dF_3 = 0.$$

Положив $dv = \alpha\, dx_2$, где α — площадь поперечного сечения стержня, находим, что компоненты всей силы, действующей на стержень, выражаются в виде

$$F_1 = \mu_0 \int_A^B \alpha \psi_{21} H_1 \left(\frac{\partial H_1}{\partial x_2}\right) dx_2, \quad F_2 = \mu_0 \int_A^B \alpha \psi_{11} H_1 \left(\frac{\partial H_1}{\partial x_2}\right) dx_2, \quad F_3 = 0,$$

или

$$F_1 = \mu_0 \int_A^B \alpha \psi_{21} H_1\, dH_1 = -\frac{1}{2} \mu_0 \alpha \psi_{21} H_0^2; \tag{3.30}$$

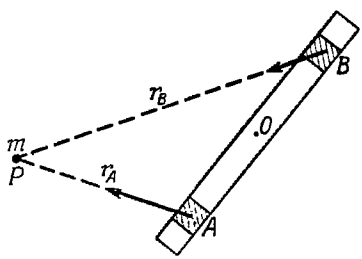
и, аналогично,

$$F_2 = -\frac{1}{2} \mu_0 \alpha \psi_{11} H_0^2. \tag{3.31}$$

где H_0 — поле в точке A. Отрицательный знак у выражения для F_2 показывает, что когда величина ψ_{11} положительна (т. е. в случае парамагнитного кристалла), эта компонента силы направлена вниз.

Происхождение этих двух компонент силы можно объяснить следующим образом. Поле H_1 создает намагниченность, имеющую компоненты вдоль всех трех осей. В частности, вдоль x_1 действует момент, пропорциональный $\psi_{11}H_1$. Сила F_2 возникает в результате действия компоненты поля H_2 на этот момент. Хотя $H_2 = 0$ вдоль оси Ox_2, производная $\partial H_2/\partial x_1$ вдоль этой оси отлична от нуля (за исключением точки O), так как H_2 изменяет знак. Следовательно, H_2 вызывает силу F_2, действующую на момент $\psi_{11}H_1$ и пропорциональную $\psi_{11}H_1(\partial H_2/\partial x_1) = \psi_{11}H_1(\partial H_1/\partial x_2)$. Сила F_1 возникает в результате действия H_1 на момент, пропорциональный $\psi_{21}H_1$ и направленный вдоль x_2. Эта сила пропорциональна $\psi_{21}H_1(\partial H_1/\partial x_2) = \psi_{21}H_1(\partial H_2/\partial x_1)$.

3. Механический момент, действующий на кристалл в неоднородном магнитном поле. Мы рассмотрели момент, действующий на кристалл в однородном поле, и силу, действующую на элемент объема кристалла в неоднородном поле. В неоднородном поле также возникает момент, но он лишь частично обусловлен влиянием анизотропии, обсуждавшимся в § 3, п. 1. В остальном появление этого момента объясняется влиянием размеров и формы кристалла. Это эффект первого порядка, совершенно отличный от рассмотренного в § 3, п. 1, эффекта формы, являющегося эффектом второго порядка. Чтобы понять, как возникает этот эффект, нужно лишь учесть, что выражение (3.24) применимо к каждому элементу кристалла и что вследствие конечных размеров кристалла силы, действующие на различные части кристалла, будут в общем случае отличаться как по величине, так и по направлению. В результате на образец будет действовать не только сила, но и момент.



Фиг. 21. Силы, действующие на длинный изотропный парамагнитный стержень, находящийся в поле магнитного заряда.

Как частный случай, мы можем рассмотреть (фиг. 21) два элемента A и B длинного изотропного парамагнитного стержня, симметрично расположенных относительно свободной оси вращения O. Пусть поле создается магнитным зарядом m, находящимся в точке P. Тогда силы, действующие на A и B, направлены по радиусам и пропорциональны значениям $\psi\,\mathrm{grad}\,(H^2)$ в точках A и B. Так как $H = m/(4\pi\mu_0 r^2)$, где r — расстояние до точки P, на каждый элемент действует сила, пропорциональная $\psi m/r^5$ и направленная в сторону P.

(Мы пренебрегаем полем, вызванным различными частями самого стержня.) Элемент A расположен ближе к P, чем элемент B, поэтому сила, действующая на A, больше силы, действующей на B. Более того, из фиг. 21 можно видеть, что плечо силы, приложенной к A, относительно точки O больше, чем плечо силы, приложенной к B. Поэтому стержень будет стремиться повернуться параллельно полю. [Читатель может легко показать, что отношение моментов относительно O для сил, действующих на A и B, равно соответственно $(r_B/r_A)^6$.] Наоборот, если бы стержень был диамагнитным, он стремился бы повернуться перпендикулярно полю.

§ 4. Магнитная восприимчивость порошка

Если порошок, состоящий из произвольно ориентированных анизотропных кристаллических зерен, помещен в магнитное поле, каждое зерно будет в общем случае приобретать момент, направление которого не совпадает с направлением $\boldsymbol{H}$. Однако из соображений симметрии очевидно, что результирующий момент всей совокупности частиц должен быть направлен вдоль $\boldsymbol{H}$; следовательно, перпендикулярные $\boldsymbol{H}$ компоненты $\boldsymbol{I}$, возникающие в отдельных зернах, должны в среднем уничтожаться. Продольная компонента $\boldsymbol{I}$ для зерна определяется выражением

$$\mu_0\psi H = \mu_0(\psi_1 l_1^2 + \psi_2 l_2^2 + \psi_3 l_3^2) H,$$

где (l_1, l_2, l_3) — направляющие косинусы $\boldsymbol{H}$ по отношению к направлениям главных восприимчивостей зерна, а ψ — восприимчивость в направлении (l_1, l_2, l_3) (см. гл. I, § 6). Среднее значение $\boldsymbol{I}$ для порошка есть среднее значение этих продольных компонент, определенных для всех возможных значений l_1, l_2, l_3. Оно должно иметь вид

$$\mu_0\alpha(\psi_1 + \psi_2 + \psi_3) H,$$

где α — численный коэффициент, так как средние значения l_1^2, l_2^2 и l_3^2 должны быть равны друг другу. Но формула должна быть справедлива и для изотропного случая, т. е. при

$$\psi_1 = \psi_2 = \psi_3 = \psi.$$

В этом случае, как мы знаем, $I = \mu_0\psi H$, поэтому α, очевидно, равно $^1/_3$.

Итак, магнитная восприимчивость порошка равна $^1/_3(\psi_1 + \psi_2 + \psi_3)$, или при произвольном выборе осей, $^1/_3\psi_{ii}$. Последнее выражение, конечно, является инвариантом (см. стр. 69).

РЕЗЮМЕ

Общие соотношения (§ 1). Во всех случаях

$$B_i = \mu_0 H_i + I_i. \tag{3.1}$$

Для парамагнитных и диамагнитных кристаллов имеется добавочное уравнение

$$I_i = \mu_0 \psi_{ij} H_j \tag{3.5}$$

(исключая область очень сильных полей), где тензор второго ранга $[\psi_{ij}]$ есть (*объемная*) *магнитная восприимчивость*. Отсюда следует, что

$$B_i = \mu_{ij} H_j, \tag{3.7}$$

где $\mu_{ij} = \mu_0(\delta_{ij} + \psi_{ij})$. Тензор второго ранга $[\mu_{ij}]$ есть *магнитная проницаемость*.

Энергия намагничивания кристалла (§ 2). Работа, затраченная на изменение намагниченности кристалла, когда поле создается током, текущим в соленоиде, и заключено в кристалле, равна $vH_i\,dB_i$, где v — объем кристалла. С учетом (3.7) это приводит к уравнению

$$d\Psi = v\mu_{ij} H_i\, dH_j \tag{3.13}$$

для приращения (свободной) энергии. То обстоятельство, что $d\Psi$ является полным дифференциалом, позволяет доказать симметричность тензора $[\mu_{ij}]$, а следовательно, и $[\psi_{ij}]$. При соответствующем выборе произвольной постоянной получаем

$$\Psi = \frac{1}{2} v\mu_{ij} H_i H_j. \tag{3.17}$$

Будучи симметричными тензорами, $[\mu_{ij}]$ и $[\psi_{ij}]$ могут быть приведены к их (общим) главным осям (§ 1). Кристалл называют парамагнитным или диамагнитным вдоль одного из направлений главных восприимчивостей, если величина ψ вдоль этого направления соответственно положительна или отрицательна.

Так как главные восприимчивости парамагнитных и диамагнитных кристаллов обычно значительно меньше единицы ($\sim 10^{-5}$), поле, создаваемое намагниченным кристаллом, мало по сравнению с внешним полем, и им обычно можно пренебречь.

Силы и моменты сил (§ 3). На каждый элемент объема v кристалла, находящегося в магнитном поле, действуют момент (§ 3, п. 1)

$$G_{ij} = v\mu_0(-\psi_{ik} H_k H_j + \psi_{jk} H_k H_i) \tag{3.21}$$

и силы (§ 3, п. 2)

$$F_i = \frac{1}{2} v\mu_0 \psi_{jk} \frac{\partial}{\partial x_i}(H_j H_k). \tag{3.27}$$

В большом кристалле изменение силы от точки к точке может привести к дальнейшему возрастанию момента (§ 3, п. 3), зависящему от формы кристалла.

Восприимчивость порошка (§ 4). Восприимчивость порошка равна $^1/_3\psi_{ii}$, или при приведении к главным осям,

$$\frac{1}{3}(\psi_1+\psi_2+\psi_3).$$

ЗАДАЧИ

1. Пусть на кристалл действует поле напряженностью H_1, направленное вдоль оси Ox_1, а затем накладывается добавочное поле вдоль Ox_2 напряженностью H_2. Вычислить произведенную работу, используя уравнения (3.7) и (3.12). Пусть теперь эксперимент повторен, но сначала налагается поле H_2 вдоль оси Ox_2, а затем поле H_1 вдоль Ox_1. Снова вычислить произведенную работу и показать, что произведенная работа при приложении полного поля $H=[H_1, H_2, 0]$ одинакова для обоих случаев только при $\mu_{12}=\mu_{21}$.

2. Небольшой парамагнитный кристалл помещен в неоднородное поле электромагнита и благодаря бифилярной подвеске образует маятник, могущий качаться в плоскости, перпендикулярной горизонтальным силовым линиям. Длина маятника равна 20 *см*. Направление максимальной восприимчивости кристалла параллельно магнитному полю. Отклонение кристалла, наблюдаемое при выключении магнита, равно 1,20 *мм*. Значение $H\,dH/dx$, где dH/dx — градиент поля в направлении движения кристалла, постоянно и равно 10^{13} ед. MKS. Плотность кристалла равна $2{,}7\cdot 10^3$ *кг/м*^{3}. Вычислить наибольшую главную восприимчивость.

3. Монокристалл кадмия (гексагональная система) в виде длинной проволоки радиусом 1 *мм* подвешен к плечу весов таким образом, что он находится в продольной и поперечной плоскостях симметрии электромагнита. Главная ось кристалла наклонена под углом θ к оси проволоки и лежит в продольной плоскости симметрии магнита. Когда магнит включен, верхний конец проволоки находится в пренебрежимо малом поле, а нижний — в поле напряженностью $4{,}00\cdot 10^5$ ед. MKS (*ампервитков/м*). При этих условиях найдено, что сила, действующая на проволоку, параллельна ее длине и равна $8{,}11\times 10^{-6}$ ед. MKS (*ньютон*). Зная, что главные объемные восприимчивости кадмия в рационализированной системе имеют значения

$$\psi_1=\psi_2=-17{,}4\cdot 10^{-6},\qquad \psi_3=-28{,}5\cdot 10^{-6},$$

определить угол θ.

4. Маленький кристалл объемом 1 *мм*^{3}, главные восприимчивости которого в рационализированной системе единиц имеют значения

$$\psi_1=1{,}0\cdot 10^{-5},\quad \psi_2=0{,}6\cdot 10^{-5},\quad \psi_3=2{,}0\cdot 10^{-5},$$

помещен в неоднородное постоянное магнитное поле. Компоненты поля и некоторые их градиенты вдоль направлений главных осей имеют значения (в единицах MKS)

$$H_1=1{,}0\cdot 10^6,\qquad H_2=0{,}5\cdot 10^6,\qquad H_3=2{,}0\cdot 10^6,$$
$$\frac{\partial H_1}{\partial x_1}=1{,}0\cdot 10^8,\qquad \frac{\partial H_1}{\partial x_2}=1{,}2\cdot 10^8,\qquad \frac{\partial H_1}{\partial x_3}=0{,}5\cdot 10^8,$$
$$\frac{\partial H_2}{\partial x_2}=0{,}8\cdot 10^8,\qquad \frac{\partial H_2}{\partial x_3}=2{,}0\cdot 10^8.$$

Определить величину и направления результирующей силы и момента, действующих на кристалл.

Глава IV

ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ

Диэлектрическая восприимчивость, характеризующая поляризацию в электрическом поле, — еще один пример анизотропного свойства кристаллов, описываемого тензором второго ранга. Формальный анализ поляризации во многом аналогичен рассмотрению намагниченности, проведенному в предыдущей главе, но имеются также и некоторые различия, на которых мы должны будем остановиться.

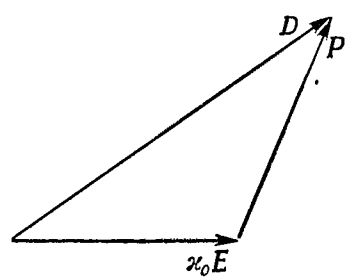
§ 1. Общие соотношения

Следующие три вектора аналогичны соответственно векторам H, I и B:

E — *интенсивность электрического поля*, или *напряженность поля*;

P — *поляризация*, равная электрическому моменту на единицу объема (или поляризационному заряду на единицу площади, перпендикулярной направлению поляризации);

D — *диэлектрическое смещение*, или *индукция*.



Фиг. 22. Связь между векторами D, E и P.

Соответственно уравнению (3.1) мы имеем

$$D = \varkappa_0 E + P, \qquad (4.1)$$

где $\varkappa_0$ — скалярная константа, представляющая собой диэлектрическую проницаемость вакуума и равная в рационализированной системе MKS $8{,}854 \cdot 10^{-12}$ [1]). Это векторное соотношение иллюстрируется фиг. 22.

Для *изотропных* сред имеет место уравнение

$$P = \varkappa_0 \chi E, \qquad (4.2)$$

[1]) См. книги, указанные в примечании на стр. 73.

аналогичное уравнению (3.2) (исключая область очень сильных полей), где $\boldsymbol{E}$ — напряженность поля в среде, а χ — *диэлектрическая восприимчивость* [1]). Аналогично уравнению (3.3) имеем

$$\boldsymbol{D} = \varkappa \boldsymbol{E}, \tag{4.3}$$

где $\varkappa$ — *диэлектрическая проницаемость*,

$$\varkappa = \varkappa_0 (1 + \chi).$$

Часто бывает более удобно выражать диэлектрическую проницаемость среды через проницаемость вакуума. Для этой цели введем безразмерную константу

$$K = \frac{\varkappa}{\varkappa_0}, \tag{4.4}$$

называемую *относительной диэлектрической проницаемостью*, или *диэлектрической постоянной*.

Для *анизотропных* сред вместо уравнения (4.2) имеем

$$P_i = \varkappa_0 \chi_{ij} E_j, \tag{4.5}$$

где χ_{ij} — *тензор диэлектрической восприимчивости*; вместо уравнения (4.3) имеем

$$D_i = \varkappa_{ij} E_j, \tag{4.6}$$

где $\varkappa_{ij}$ — *тензор диэлектрической проницаемости*, определяемый следующим образом:

$$\varkappa_{ij} = \varkappa_0 (\delta_{ij} + \chi_{ij}).$$

Для диэлектрической постоянной, которая теперь тоже является тензором, имеем вместо уравнения (4.4)

$$K_{ij} = \frac{\varkappa_{ij}}{\varkappa_0}. \tag{4.7}$$

В § 4 на основе энергетических соображений доказывается, что $\varkappa_{ji} = \varkappa_{ij}$; следовательно, $K_{ij} = K_{ji}$ и $\chi_{ij} = \chi_{ji}$. Поэтому $[\varkappa_{ij}]$, $[K_{ij}]$ и $[\chi_{ji}]$ могут быть приведены к общим главным осям; соотношения между главными компонентами очевидны:

$$\varkappa_1 = \varkappa_0 K_1 \text{ и т. д.}$$

и

$$\chi_1 = K_1 - 1 \text{ и т. д.}$$

Таким образом, диэлектрические свойства кристалла могут быть охарактеризованы значениями и направлениями трех главных диэлектрических проницаемостей (диэлектрических постоянных) или диэлектрических восприимчивостей. Эти значения и направления будут

[1]) Если кристалл обладает спонтанной поляризацией (см. § 7 и 8), $\boldsymbol{P}$ можно интрепретировать как изменение этой поляризации, вызванное полем.

в общем случае зависеть от частоты электрического поля; кроме того, они, конечно, должны всегда подчиняться всем ограничениям, накладываемым симметрией кристаллов, в соответствии с табл. 3. Значения диэлектрических постоянных для некоторых кристаллов приведены в табл. 5.

ТАБЛИЦА 5

Диэлектрические постоянные кристаллов *

Кристаллы	Система	K_1	K_2	K_3	Частота, *гц*
Гипс	Моноклинная . . .	9,9	5,1	5,0	$3 \cdot 10^8$
Арагонит	Орторомбическая .	9,8	7,7	6,6	$4 \cdot 10^8$
Кварц	Тригональная . . .	4,5		4,6	$50—5 \cdot 10^6$
Кальцит	» . . .	8,5		8,0	$4 \cdot 10^8$
Рутил	Тетрагональная . .	89		173	$4 \cdot 10^8$
Хлорид цезия	Кубическая	6,3			$2 \cdot 10^5$
Хлорид натрия	»	5,6			$2 \cdot 10^6$

* Приведенные значения взяты из таблиц [54, 61], а также из книги Кэди [24].

§ 2. Различие между электрической поляризацией и намагниченностью

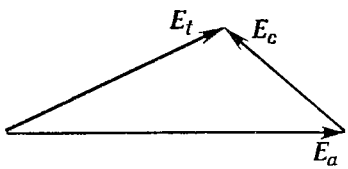
При принятом нами способе рассмотрения поляризация и намагниченность являются аналогичными величинами. Однако следует иметь в виду, что эта аналогия носит лишь формальный характер. В отличие от электрических зарядов магнитные заряды не существуют в действительности, хотя введение представления о таких зарядах значительно облегчает рассуждение. При физически реальном подходе следовало бы признать с самого начала общее происхождение электрического и магнитного полей. При этом следовало бы считать, что магнитные поля и моменты создаются за счет движения электрических зарядов, а именно орбитальным и спиновым моментами электронов, а не неподвижными магнитными зарядами. Отсутствие полного параллелизма между электрической поляризацией и намагниченностью подчеркивается тем фактом, что главные магнитные восприимчивости могут быть положительными и отрицательными, в то время как главные диэлектрические восприимчивости всегда положительны. Имеются также два следующих важных практических различия.

1. Эффект деполяризации. Если поляризуемый кристалл помещен в поле E_a, то при этом возникает собственное поле кристалла

(обозначим его через $\boldsymbol{E}_c$). Тогда полное поле в любой точке (фиг. 23) определяется выражением

$$\boldsymbol{E}_t = \boldsymbol{E}_a + \boldsymbol{E}_c. \tag{4.8}$$

Для парамагнетиков и диамагнетиков искажающее влияние кристалла, на поле, как мы видели, мало вследствие малых значений восприимчивости. Это не имеет места для ферромагнетиков, а также для диэлектриков, потому что в этом случае значения χ_{ij} наверняка не малы по сравнению с единицей (см. табл. 5), и, следовательно, $\boldsymbol{E}_c$ и $\boldsymbol{E}_a$ часто имеют одинаковый порядок величины. Поле $\boldsymbol{E}_c$ зависит от формы кристалла. Так, если два образца из одного и того же кристалла, отличающиеся лишь формой, поместить в идентичные поля, то $\boldsymbol{E}_c$, а следовательно, и $\boldsymbol{E}_t$ будут различны. Так как внутри кристалла существует поле $\boldsymbol{E}_t$, которое и определяет $\boldsymbol{P}$ [уравнение (4.5)], то эти два образца будут обнаруживать различную поляризацию.



Фиг. 23. Связь между векторами $\boldsymbol{E}_t$, $\boldsymbol{E}_a$ и $\boldsymbol{E}_c$.

Для иллюстрации можно здесь напомнить без доказательства выражения для $\boldsymbol{E}_c$, $\boldsymbol{E}_t$ и $\boldsymbol{P}$ в следующих трех простых случаях, детально разобранных в учебниках:

а) Длинный изотропный стержень в однородном поле $\boldsymbol{E}_a$, параллельном его длине.

$$\boldsymbol{E}_c = 0 \quad \text{и} \quad \boldsymbol{E}_t = \boldsymbol{E}_a;$$

следовательно,

$$\boldsymbol{P} = \varkappa_0 \chi \boldsymbol{E}_a.$$

б) Плоский изотропный диск в однородном поле $\boldsymbol{E}_a$, перпендикулярном его плоскости.

Внутри диска

$$\varkappa_0 \boldsymbol{E}_c = -\boldsymbol{P} \quad \text{и} \quad \boldsymbol{E}_t = \boldsymbol{E}_a - \frac{\boldsymbol{P}}{\varkappa_0}.$$

Следовательно,

$$\boldsymbol{P} = \varkappa_0 \chi \left(\boldsymbol{E}_a - \frac{\boldsymbol{P}}{\varkappa_0} \right) \quad \text{или} \quad \boldsymbol{P} = \frac{1}{1+\chi} \varkappa_0 \chi \boldsymbol{E}_a.$$

в) Изотропная сфера в однородном поле $\boldsymbol{E}_a$.

Внутри сферы

$$\varkappa_0 \boldsymbol{E}_c = -\frac{1}{3} \boldsymbol{P} \quad \text{и} \quad \boldsymbol{E}_t = \boldsymbol{E}_a - \frac{\boldsymbol{P}}{3\varkappa_0}.$$

Следовательно,

$$\boldsymbol{P} = \varkappa_0 \chi \left(\boldsymbol{E}_a - \frac{\boldsymbol{P}}{3\varkappa_0} \right) \quad \text{или} \quad \boldsymbol{P} = \left(\frac{3}{3+\chi} \right) \varkappa_0 \chi \boldsymbol{E}_a.$$

В каждом случае поле внутри тела, вызванное поляризацией, действует противоположно приложенному полю, вследствие чего наблюдаемая поляризация понижается. Поэтому поле $\boldsymbol{E}_c$ внутри тела называется *деполяризующим полем*.

2. *Утечка заряда.* Измерения в диэлектриках осложняются наличием „диэлектрических аномалий", вызываемых тем обстоятельством, что диэлектрики не являются идеальными непроводниками. Рассмотрим следующий пример.

Пусть тонкая пластинка диэлектрика помещена между двумя параллельными обкладками плоского конденсатора и отделена от них узкими зазорами. В § 3 мы покажем, что если бы диэлектрик был идеальным непроводником, то диэлектрическая постоянная равнялась бы отношению емкости конденсатора с диэлектриком к емкости конденсатора без диэлектрика. Предположим, что обкладки конденсатора остаются подсоединенными к батарее. Сначала при введении кристалла в конденсатор на поверхности кристалла появляются поляризационные заряды, но свободные заряды отсутствуют. Однако с течением времени к пластинке будут притекать заряды того же знака, что и поляризационные. Так будет продолжаться до тех пор, пока не будет достигнуто предельное состояние, при котором внутри пластинки $\boldsymbol{E} = 0$ — значит, диэлектрик в этом случае может считаться подобным идеальному проводнику. Емкость будет теперь равна просто емкости двух узких зазоров. Таким образом, если измерение емкости используется для определения диэлектрической постоянной пластинки, наблюдаемая диэлектрическая постоянная будет зависеть от того, в какой момент времени производились измерения, и от проводимости образца.

Если бы зазор между обкладками и пластинкой отсутствовал (этого можно достичь, например, путем применения напыленных электродов), то в идеальном случае не было бы миграции свободных зарядов. Однако практически кристалл никогда не бывает совершенно однородным: в нем имеются небольшие трещины и области концентрации примесей, на которых могут скопляться заряды. Миграция заряда облегчается тем обстоятельством, что проводимость этих областей обычно выше проводимости идеальных частей кристалла. Поэтому даже такие кристаллы, как сера или слюда, обладающие очень малой объемной электропроводностью, могут обнаруживать значительные диэлектрические аномалии вследствие проводимости подобных небольших областей.

Миграция зарядов происходит и в том случае, когда кристалл подвешен в электрическом поле так, что может свободно вращаться. При включении поля кристалл ориентируется в нем определенным образом, но постепенно заряд стекает, и кристалл поворачивается в иное положение. Вследствие этого факта были искажены результаты многих первых измерений диэлектрической проницаемости, при которых она определялась по моменту, действующему на кристалл в статическом или низкочастотном поле.

§ 3. Соотношение между D, E и P в плоском конденсаторе

Если между обкладками плоского конденсатора поместить пластинку из диэлектрика, то емкость конденсатора возрастет. В учебниках электростатики показывается, что отношение емкостей конденсатора с диэлектриком и без него равно диэлектрической постоянной материала, из которого сделана пластинка:

$$\frac{\text{Емкость с диэлектриком}}{\text{Емкость без диэлектрика}} = \frac{\text{Проницаемость диэлектрика}}{\text{Проницаемость вакуума}} =$$

$$= \text{Диэлектрическая постоянная}$$

Рассмотрим теперь случай, когда диэлектрик является анизотропным кристаллом произвольной ориентации. Здесь уже возникает вопрос о том, какие „диэлектрическая проницаемость" и „диэлектрическая постоянная" входят в приведенное уравнение. При рассмотрении этого вопроса мы должны сначала найти соотношение между $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{P}$.

На фиг. 24, *а* показаны обкладки конденсатора с введенной пластинкой кристалла, а на фиг. 24, *б* — без нее. При этом предполагается, что обкладки конденсатора и грани кристаллической пластинки имеют достаточно большие размеры по сравнению с толщиной кристалла l. Чтобы уяснить соотношение между $\boldsymbol{D}$ и $\boldsymbol{E}$, полезно представить себе, что между кристаллом и обкладками конденсатора имеются узкие зазоры. Ширина этих зазоров должна быть бесконечно мала по сравнению с толщиной кристалла. Пусть между обкладками приложена постоянная разность потенциалов φ. Примерное соотношение между векторами $\varkappa_0\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{P}$ и $\boldsymbol{D}$ представлено на фиг. 24, *а* и *б* длиной стрелок. Пусть $\boldsymbol{D}_c$, $\boldsymbol{E}_c$ и $\boldsymbol{D}_v$, $\boldsymbol{E}_v$ относятся соответственно к кристаллу и вакуумному зазору, показанным на фиг. 24, *а*, а $\boldsymbol{D}'$ и $\boldsymbol{E}'$ — к пространству между обкладками для случая, когда между обкладками нет кристалла (фиг. 24, *б*). Далее, пусть σ и σ' — заряд на единицу площади обкладок конденсатора в этих двух случаях. Так как обкладки конденсатора имеют большие размеры и потенциал на каждой из них имеет постоянную величину, то эквипотенциальные поверхности должны располагаться параллельно им. Следовательно, векторы $\boldsymbol{E}_v$, $\boldsymbol{E}_c$ и $\boldsymbol{E}'$ перпендикулярны обкладкам конденсатора. Применяя теорему Гаусса, получаем

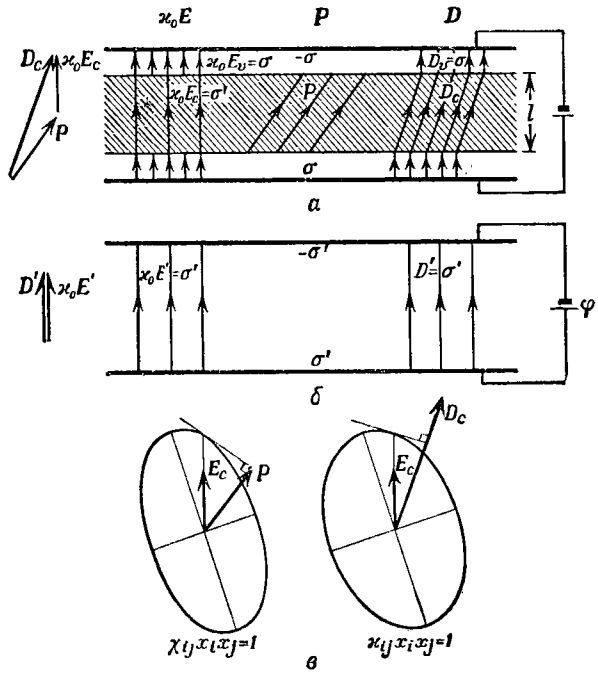
$$\sigma = \varkappa_0 E_v \quad \text{и} \quad \sigma' = \varkappa_0 E',$$

и, так как зазор очень узок,

$$E_c = \frac{\varphi}{l} = E' = \frac{\sigma'}{\varkappa_0}.$$

Отметим, что при этом удовлетворяется требование непрерывности тангенциальной компоненты $\boldsymbol{E}$ (в частности, она может быть равна нулю) при переходе через поверхность кристалла. В зазоре вектор $\boldsymbol{D}$,

конечно, параллелен E, но в кристалле он направлен под углом к E. Согласно одной из теорем электростатики (вытекающей непосредственно из теоремы Гаусса), нормальная компонента D непрерывна при переходе через границу, на которой нет свободных зарядов.



Фиг. 24. Соотношения между D, $\varkappa_0 E$ и P в плоском конденсаторе.

а — конденсатор с кристаллической пластинкой, помещенной между электродами; *б* — конденсатор без кристаллической пластинки; *в* — направления E и P в кристалле относительно эллипсоида диэлектрической восприимчивости и направления E и D в кристалле относительно эллипсоида диэлектрической проницаемости.

Следовательно, если нормальную компоненту D_c обозначить через $(D_c)_n$, то

$$(D_c)_n = D_v = \sigma.$$

Таким образом, отношение емкостей для двух рассматриваемых случаев можно записать в виде

$$\frac{C}{C'} = \frac{\sigma}{\sigma'} = \frac{\text{Компонента } D_c, \text{ параллельная } E_c}{\varkappa_0 E_c} = \frac{\varkappa}{\varkappa_0} = K,$$

где $\varkappa$ — диэлектрическая проницаемость и K — диэлектрическая постоянная *в направлении приложенного поля* E_c (см. гл. I, § 6, п. 1).

Отсюда следует как частный случай, что, когда одна из главных диэлектрических постоянных направлена нормально к обкладкам конденсатора, отношение емкостей непосредственно равно диэлектрической постоянной.

На фиг. 24, *в*, которую нет необходимости пояснять, видно, как направления векторов $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{P}$ и $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{D}$ в кристалле, изображенном на фиг. 24, *а*, связаны соответственно с эллипсоидами диэлектрической восприимчивости и диэлектрической проницаемости [1]).

§ 4. Энергия поляризованного кристалла

Можно доказать [20], что если электрическое поле полностью заключено в кристалле, работа, произведенная при изменении поляризации кристалла, определяется уравнением

$$dW = vE_i\,dD_i, \tag{4.9}$$

где v — объем кристалла. Как пример вывода этого уравнения для частного случая можно рассмотреть плоский конденсатор (см. фиг. 24, *а*), подсоединенный к батарее. При изменении поляризации на обкладках конденсатора появятся новые поверхностные заряды с плотностью $d\sigma$ и $-d\sigma$ на единицу площади; при этом батареей будет произведена работа $A\varphi\,d\sigma$, где A — площадь обкладок конденсатора. Эту работу можно выразить через $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{D}$ и их изменение в кристалле. Плотность зарядов σ равна нормальной компоненте $\boldsymbol{D}$ в кристалле; следовательно,

$$A\varphi\,dD_n = AEl\,dD_n = vE\,dD_n = vE_i\,dD_i,$$

где v — объем кристалла, так как электрическое поле нормально к обкладкам конденсатора.

Следовательно, приращение энергии [2]) конденсатора определяется следующим образом:

$$d\Psi = vE_i\,dD_i; \tag{4.10}$$

используя уравнение (4.6), получаем

$$d\Psi = v\varkappa_{ij}E_i\,dE_j. \tag{4.11}$$

Отсюда, так же как при рассмотрении энергии намагниченного кристалла (см. стр. 79), можно получить, что

$$\varkappa_{ij} = \frac{\partial^2\Psi}{\partial E_i\,\partial E_j} = \frac{\partial^2\Psi}{\partial E_j\,\partial E_i} = \varkappa_{ji}.$$

Интегрируя уравнение (4.11) и приравнивая произвольную постоянную нулю, получаем выражение для энергии

$$\Psi = \frac{1}{2}v\varkappa_{ij}E_iE_j. \tag{4.12}$$

---

[1]) По этому вопросу см. также [103] — *Прим. перев.*

[2]) Для изотермического обратимого изменения это — приращение свободной энергии; см. также приложение 6.

§ 5. Сила и момент сил, действующие на кристалл в электрическом поле

Сила, действующая на небольшой образец диэлектрика в неоднородном поле, описывается выражением, аналогичным выражению (3.24), а именно:

$$F_i = vP_j \frac{\partial E_l}{\partial x_j}, \tag{4.13}$$

где P_j — поляризация, определяемая, согласно уравнению (4.5), полным полем в кристалле, и E_l — поле, созданное источниками, внешними по отношению к кристаллу. Вследствие эффекта деполяризации сила зависит от формы образца, так как в данном внешнем поле его форма влияет на величину $\boldsymbol{P}$.

При рассмотрении пара- и диамагнетиков мы вычисляли момент сил, действующий на кристалл в однородном поле и обусловленный анизотропией кристалла. Аналогичный момент, вызываемый непараллельностью между $\boldsymbol{P}$ и $\boldsymbol{E}$, действует на каждый элемент диэлектрического кристалла, помещенного в электрическое поле. Однако теперь выражение для момента, вследствие наличия эффекта деполяризации, будет зависеть от формы кристалла. Если в случае пара- и диамагнетиков влияние формы является эффектом второго порядка, то теперь оно играет существенную роль. Легко показать, как пример влияния формы, что диск из *изотропного* диэлектрика, подвешенный в однородном поле, будет стремиться повернуться так, чтобы его ось стала параллельна полю.

Итак, появление момента, действующего на кристалл в *однородном* электрическом поле, объясняется двумя причинами: 1) непараллельностью векторов $\boldsymbol{P}$ и $\boldsymbol{E}$, обусловленной анизотропией кристалла, и 2) непараллельностью векторов $\boldsymbol{P}$ и $\boldsymbol{E}$, обусловленной влиянием его формы. В *неоднородном* поле имеется и третья причина: конечность размеров кристалла, как было показано в гл. III, § 3, п. 3, для аналогичного магнитного эффекта.

§ 6. Электростатическое поле в однородном анизотропном диэлектрике [1])

Электростатическая задача, рассмотренная в § 3, была очень упрощена, ибо предполагалось, что $\boldsymbol{D}$ и $\boldsymbol{E}$ имеют во всем кристалле постоянные значения. В общем же случае электростатическое поле в кристалле может быть неоднородным. Найдем теперь, каким общим уравнениям оно должно удовлетворять. Мы ограничимся рассмотрением поля только внутри кристалла; для общности будем предполагать, что в кристалле имеется непрерывно распределенный электрический заряд.

---

[1]) Этот параграф может быть опущен при первом чтении.

Два уравнения Максвелла, содержащие $\boldsymbol{D}$ и $\boldsymbol{E}$, имеют вид

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = \rho, \quad \operatorname{rot} \boldsymbol{E} = -\dot{\boldsymbol{B}}, \tag{4.14}$$

где ρ — плотность заряда. В случае статической задачи $\dot{\boldsymbol{B}} = 0$, поэтому

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = \rho, \quad \operatorname{rot} \boldsymbol{E} = 0. \tag{4.15}$$

Из векторного анализа известно, что если ротор вектора равен нулю, то вектор можно выразить как градиент скалярного потенциала; поэтому мы можем записать

$$\boldsymbol{E} = -\operatorname{grad} \varphi, \quad \text{или} \quad E_i = -\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}. \tag{4.16}$$

В индексных обозначениях первое из уравнений (4.15) имеет вид

$$\frac{\partial D_i}{\partial x_i} = \rho;$$

используя уравнение (4.6) и предполагая, что $\varkappa_{ij}$ не зависит от x_i, получаем

$$\varkappa_{ij} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} = \rho.$$

Подставляя уравнение (4.16) для E_j, находим уравнение для потенциала φ

$$\varkappa_{ij} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} = -\rho. \tag{4.17}$$

Приведенное к главным осям $[\varkappa_{ij}]$ уравнение (4.17) принимает вид

$$\varkappa_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \varkappa_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_2^2} + \varkappa_3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_3^2} = -\rho. \tag{4.18}$$

Для тех частей кристалла, в которых объемные заряды отсутствуют ($\rho = 0$), уравнение (4.18) упрощается:

$$\varkappa_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \varkappa_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_2^2} + \varkappa_3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_3^2} = 0. \tag{4.19}$$

Уравнения (4.18) и (4.19) являются фундаментальными уравнениями, на которых основано решение задач электростатики для кристаллов. Производя в уравнениях (4.18) и (4.19) формальную замену

$$x_1 = \varkappa_1^{1/2} X_1, \quad x_2 = \varkappa_2^{1/2} X_2, \quad x_3 = \varkappa_3^{1/2} X_3,$$

мы получаем соответственно уравнения Лапласа и Пуассона

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial X_1^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial X_2^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial X_3^2} = -\rho \quad \text{и} \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial X_1^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial X_2^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial X_3^2} = 0.$$

Известные решения этих уравнений можно сразу же преобразовать в решения уравнений (4.18) и (4.19). Затем из уравнений (4.16) и (4.6) находятся соответственно E_i и D_i.

Мы встретим уравнения, аналогичные (4.18) и (4.19), при изучении стационарного теплового потока в кристаллах (см. гл. XI, § 4).

В изотропном диэлектрике $\boldsymbol{D} = \varkappa \boldsymbol{E}$. Если при этом $\rho = 0$, то уравнения электростатического поля

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = 0 \quad \text{и} \quad \operatorname{rot} \boldsymbol{E} = 0$$

означают, что

$$\operatorname{div} \boldsymbol{E} = 0 \quad \text{и} \quad \operatorname{rot} \boldsymbol{D} = 0. \tag{4.20}$$

Следует отметить, что, когда среда анизотропна, уравнения (4.20) не обязательно выполняются.

§ 7. Пироэлектричество

Некоторые кристаллы обладают свойством приобретать электрическую поляризацию при изменении их температуры. То есть в таких кристаллах имеется спонтанная поляризация, а нагревание или охлаждение кристалла приводят к ее изменению. Это явление называется *пироэлектрическим эффектом*. В действительности приобретенный таким образом электрический момент не сохраняется, ибо ввиду того, что кристалл не является идеальным непроводником, момент нейтрализуется в результате миграции зарядов к поверхности кристалла.

Чтобы обнаружить пироэлектрический эффект, мы можем подвергнуть кристалл однородному нагреву и наблюдать изменение поляризации. Этот эксперимент теоретически возможно выполнить двумя различными способами: либо сохранять неизменными форму и размеры кристалла во время нагревания, либо, наоборот, нагревать кристалл при таких условиях, что его тепловое расширение будет происходить совершенно свободно. Величина эффекта при этих двух экспериментах была бы различной. В первом случае, когда кристалл зажат, наблюдаемый эффект называется *первичным пироэлектрическим эффектом*. Во втором случае, при свободном расширении (которое значительно легче осуществить практически) имеется добавочный эффект, называемый *вторичным пироэлектрическим эффектом*; наблюдаемый в этом случае эффект есть сумма первичного и вторичного эффектов. Серьезное обсуждение соотношения между первичным и вторичным эффектами, включающее рассмотрение пьезоэлектрических явлений, требует учета термодинамических соотношений (см. гл. X). Рассмотрение, проводимое в настоящем параграфе, одинаково применимо как к первичному и вторичному пироэлектрическим эффектам, так и к их сумме [1]).

[1]) Момент, возникающий при неоднородном нагреве, называется *третичным пироэлектрическим эффектом*. Он рассматривается на стр. 231. Термин *тензориальный пироэлектрический эффект* относится к эффекту возникновения квадрупольного момента и моментов более высокого порядка. Существование этих эффектов экспериментально точно не установлено, но если они обнаружатся, то должны быть очень малы (см. [24]).

Если происходит небольшое изменение температуры ΔT, одинаковое во всем кристалле, то изменение вектора поляризации ΔP_i определяется выражением

$$\Delta P_i = p_i \Delta T, \tag{4.21}$$

где p_i — три *пироэлектрических коэффициента*. Таким образом, пироэлектрический эффект в кристаллах описывается вектором $\boldsymbol{p}$. Это первый встретившийся нам в настоящей книге пример *физического свойства кристаллов*, описываемого вектором.

В некоторых кристаллах поляризация может возникнуть также при гидростатическом сжатии; это частный случай пьезоэлектрического эффекта, который будет обсуждаться в гл. VII. Так как такая поляризация пропорциональна давлению, являющемуся скаляром, подобно ΔT, то это свойство также описывается вектором. Проводимое ниже рассмотрение влияния симметрии на пироэлектрический эффект полностью применимо и к пьезоэлектрическому эффекту при гидростатическом сжатии.

В соответствии с принципом Неймана (см. стр. 35), вектор $\boldsymbol{p}$ должен согласовываться с точечной группой симметрии кристалла. Отсюда сразу же следует, что пироэлектрический эффект не может существовать ($\boldsymbol{p} = 0$) у кристаллов, обладающих центром симметрии; на этом обстоятельстве основан практический метод проверки отсутствия центра симметрии. Легко сообразить, что пироэлектрический момент может быть параллелен только направлению, которое является в кристалле особенным, т. е. не повторяется никаким элементом симметрии (изменение направления на противоположное считается здесь повторением). Если в точечной группе существует особенное направление, являющееся осью симметрии второго, третьего, четвертого или шестого порядков, то оно обязательно будет направлением $\boldsymbol{p}$. Однако наличие такой особенной оси симметрии [1]) (мы не считаем здесь ось первого порядка осью симметрии) не является необходимым признаком существования пироэлектрического эффекта; в качестве примера назовем класс m, в котором $\boldsymbol{p}$ может, не нарушая принципа Неймана, лежать в любом направлении в плоскости симметрии, и класс 1 [2]). Можно отметить, между прочим, что введенное выше понятие особенного направления не есть синоним *полярного направления*. Полярное направление — это любое направление, два конца которого не могут быть совмещены никаким элементом симметрии точечной группы. Так, например, ось второго порядка в классе 32 (см. стр. 338) является полярным, но не особенным направлением.

---

[1]) Особенной осью часто называют ось, присутствующую в кристалле в единственном числе; ту ось, которую автор называет особенной осью, тогда называют особенной полярной осью (см. [123]). — *Прим. перев.*

[2]) Если же не делать оговорки относительно оси первого порядка, то наличие особенной оси будет необходимым признаком. — *Прим. перев.*

Все особенные направления полярны, но только некоторые полярные направления особенны.

Ниже приведены направление пироэлектрического вектора $\boldsymbol{p}$ и форма его компонент для 21 нецентросимметричного класса.

Триклинная система. Класс 1: симметрия не накладывает никаких ограничений на направление $\boldsymbol{p}$; (p_1, p_2, p_3).

Моноклинная система. Ось x_2 параллельна оси второго порядка, поворотной или зеркальной (оси y).

Класс 2: вектор $\boldsymbol{p}$ параллелен оси второго порядка; $(0, p, 0)$.

Класс m: вектор $\boldsymbol{p}$ имеет произвольное направление в плоскости симметрии; $(p_1, 0, p_3)$.

Орторомбическая система. Оси x_1, x_2, x_3 параллельны соответственно кристаллографическим осям x, y, z.

Класс $mm2$: вектор $\boldsymbol{p}$ параллелен оси второго порядка; $(0, 0, p)$.

Класс 222: (0, 0, 0)

Тетрагональная, тригональная и гексагональная системы. Ось x_3 параллельна оси z.

Классы 4, $4mm$, 3, $3m$, 6, $6mm$: вектор $\boldsymbol{p}$ параллелен осям четвертого, третьего или шестого порядков; $(0, 0, p)$.

Классы $\bar{4}$, $\bar{4}2m$, 422, 32, $\bar{6}$, $\bar{6}m2$, 622: $(0, 0, 0)$.

Кубическая система. Классы 432, $\bar{4}3m$, 23: $(0, 0, 0)$.

Итак, следующие 10 классов теоретически могут обладать пироэлектрическим эффектом при однородном нагревании или охлаждении и пьезоэлектрическим эффектом при гидростатическом сжатии:

$$1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 6,\ m,\ mm2,\ 3m,\ 4mm,\ 6mm.$$

Они называются *полярными классами.*

Численный пример. Проиллюстрируем порядок величины пироэлектрического эффекта на примере турмалина (тригональная система, класс $3m$), являющегося наиболее известным представителем пироэлектрических кристаллов. Значение p несколько меняется в зависимости от состава кристалла и температуры. При комнатной температуре значение p, равное 1,2 ед. CGSE на 1° С, соответствует сумме первичного и вторичного эффектов [24]. Таким образом, в рационализированной системе MKS

$$p = 1{,}2\left(\frac{1}{3} \times 10^{-5}\right) = 4{,}0 \cdot 10^{-6}\ к/м^2 \cdot град.$$

Чтобы более наглядно представить себе величину пироэлектрического эффекта, определим напряженность электрического поля, которая вызывает такую же поляризацию, как изменение температуры на 1° С. Согласно приведенному значению p, при возрастании температуры на 1° С возникает поляризация

$$P = 4{,}0 \cdot 10^{-6}\ к/м^2,$$

направленная вдоль оси третьего порядка. Главная диэлектрическая постоянная турмалина в направлении, параллельном оси третьего порядка, $K_3 = 7{,}1$. Соответствующая диэлектрическая восприимчивость

$$\chi_3 = K_3 - 1 = 6{,}1.$$

Следовательно, искомая величина внутреннего поля, параллельного оси x_3, есть

$$E_3 = \frac{P}{\varkappa_0 \chi_3} = \frac{4{,}0 \cdot 10^{-6}}{8{,}85 \cdot 10^{-12} \cdot 6{,}1} = 7{,}4 \cdot 10^4 \text{ в/м} = 740 \text{ в/см}.$$

§ 8. Сегнетоэлектричество

Имеется другая группа кристаллов, называемых *сегнетоэлектриками*, которая в определенной степени близка к пироэлектрическим кристаллам. Сегнетоэлектрик, подобно пироэлектрику, может обладать спонтанной поляризацией, но он имеет дополнительное свойство: направление его поляризации может быть изменено на обратное при приложении достаточно сильного электрического поля. Следовательно, в сильных переменных полях поляризация обнаруживает гистерезис.

Изменение направления поляризации на обратное под действием электрического поля можно объяснить тем, что поле вызывает небольшое относительное смещение атомов в кристалле, вследствие чего кристалл превращается в свой электрический двойник. Если все атомы смещаются на половину этого расстояния или на это расстояние смещается половина атомов, то кристалл переходит в более симметричное и неполярное состояние. Обычно эта промежуточная конфигурация возникает при изменении температуры; поэтому большинство сегнетоэлектриков имеет температуру *перехода* (*точку Кюри*), выше которой они являются неполярными диэлектриками[1]).

Известные сегнетоэлектрики выше своих температур перехода принадлежат главным образом к трем классам:

222 — например, сегнетова соль;
$\bar{4}2m$ — например, дигидрофосфат калия;
$m3m$ — например, титанат бария.

(Сегнетова соль отличается тем, что имеет как верхнюю, так и нижнюю температуры перехода, т. е. обнаруживает спонтанную поляризацию только между этими температурными точками.) Кристалл в сегнетоэлектрическом состоянии, обладая спонтанной поляризацией, должен иметь более низкую симметрию, чем тот же самый кристалл в несегнетоэлектрическом состоянии, и принадлежать к одному из пироэлек-

[1]) Даваемое автором объяснение сегнетоэлектрических явлений неудачно и содержит ряд неточностей. За последние годы опубликован целый ряд обширных обзоров по сегнетоэлектричеству, например [116, 124, 126, 127], в которых читатель может найти строгое рассмотрение. — *Прим. перев.*

трических классов, перечисленных в § 7. Например, сегнетова соль в сегнетоэлектрическом состоянии принадлежит к классу 2; дигидрофосфат калия переходит из класса $\bar{4}2m$ в класс $mm2$; титанат бария при понижении температуры последовательно переходит из класса $m3m$ в пироэлектрические классы $4mm$, $mm2$ и $3m$.

Сегнетоэлектрики образуют группу кристаллов, представляющую большой теоретический интерес. Характеризующие их спонтанная поляризация и гистерезис сопровождаются проявлением других специфических свойств. Для дальнейшего изучения вопроса можно рекомендовать обзорную статью Девоншира [31].

РЕЗЮМЕ

1. В любом веществе

$$D_i = \varkappa_0 E_i + P_i. \tag{4.1}$$

В анизотропном диэлектрике (например, в кристалле)

$$P_i = \varkappa_0 \chi_{ij} E_j \tag{4.5}$$

(за исключением области очень сильных полей); здесь $[\chi_{ij}]$ — тензор диэлектрической восприимчивости. Следовательно,

$$D_i = \varkappa_{ij} E_j, \tag{4.6}$$

где

$$\varkappa_{ij} = \varkappa_0 (\delta_{ij} + \chi_{ij});$$

здесь $[\varkappa_{ij}]$ — тензор диэлектрической проницаемости. Тензор диэлектрической постоянной определяется выражением

$$K_{ij} = \frac{\varkappa_{ij}}{\varkappa_0}. \tag{4.7}$$

2. Работа, произведенная при изменении поляризации кристалла, если поле полностью заключено в кристалле, дается выражением

$$dW = vE_i\, dD_i, \tag{4.9}$$

где v — объем кристалла. Приравнивая это выражение приращению энергии и учитывая, что $D_i = \varkappa_{ij} E_j$, получаем

$$d\Psi = v\varkappa_{ij} E_i\, dE_j. \tag{4.11}$$

Так как $d\Psi$ является полным дифференциалом, отсюда вытекает что $[\varkappa_{ij}]$, а следовательно $[K_{ij}]$ и $[\chi_{ij}]$ — симметричные тензоры. Интегрируя выражение для $d\Psi$ и считая произвольную постоянную равной нулю, находим энергию поляризованного кристалла

$$\Psi = \frac{1}{2} v\varkappa_{ij} E_i E_j. \tag{4.12}$$

3. Хотя формальное рассмотрение диэлектрической поляризации и намагниченности парамагнетиков имеет очень много общего, деполяризация в этих двух случаях имеет разный порядок величины. Другое существенное отличие состоит в том, что у диэлектриков наблюдается стекание заряда.

4. Диэлектрическая постоянная в направлении, перпендикулярном обкладкам плоского конденсатора, определяется путем измерения емкости конденсатора.

5. Сила, действующая на диэлектрический кристалл в неоднородном электрическом поле, описывается выражением

$$F_i = vP_j \frac{\partial E_i}{\partial x_j}, \tag{4.13}$$

где P_j — поляризация, определяемая, согласно уравнению (4.5), полным внутренним полем в кристалле, и E_i — поле, созданное источниками, внешними по отношению к кристаллу. Вследствие эффекта деполяризации эта сила зависит от формы образца.

6. Если $\boldsymbol{P}$ и $\boldsymbol{E}$ в кристалле не параллельны друг другу, то на кристалл действует момент сил. Это может объясняться влиянием формы (эффект деполяризации) или анизотропией кристалла. В неоднородном поле возникает добавочный момент, обусловленный изменением силы F_i вдоль образца.

7. Электростатическое поле в анизотропном кристалле подчиняется уравнениям

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = \rho, \quad \operatorname{rot} \boldsymbol{E} = 0.$$

Отсюда следует, что $\boldsymbol{E}$ можно выразить через скалярный потенциал φ и что в однородном кристалле

$$\varkappa_{ij} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} = -\rho, \tag{4.17}$$

или при приведении к главным осям

$$\varkappa_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_1^2} + \varkappa_2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_2^2} + \varkappa_3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_3^2} = -\rho. \tag{4.18}$$

В общем случае

$$\operatorname{div} \boldsymbol{E} \neq 0 \quad \text{и} \quad \operatorname{rot} \boldsymbol{D} \neq 0$$

даже в областях, где заряды отсутствуют.

8. Изменение поляризации ΔP_i, вызываемое в пироэлектрическом кристалле малым однородным изменением температуры ΔT, описывается выражением

$$\Delta P_i = p_i \Delta T, \tag{4.21}$$

где p_i — пироэлектрические коэффициенты. Они определяют вектор $\boldsymbol{p}$, который должен согласовываться с симметрией кристалла. Вследствие

этого требования пироэлектрический эффект при однородном изменении температуры возможен только в десяти полярных классах.

9. Сегнетоэлектрические кристаллы обладают спонтанной поляризацией, направление которой можно изменить на обратное при приложении достаточно сильного электрического поля. Большинство сегнетоэлектриков имеют температуру фазового превращения (точку Кюри), выше которой они являются обычными неполярными диэлектриками.

ЗАДАЧИ

1. Показать, что последовательные изменения симметрии титаната бария при понижении температуры можно объяснить, постулировав, что исходный кубический кристалл становится сначала полярным вдоль одной кубической оси, затем одинаково полярным вдоль двух кубических осей и, наконец, одинаково полярным вдоль трех кубических осей.

Глава V

ТЕНЗОР НАПРЯЖЕНИЙ

§ 1. Понятие напряжения

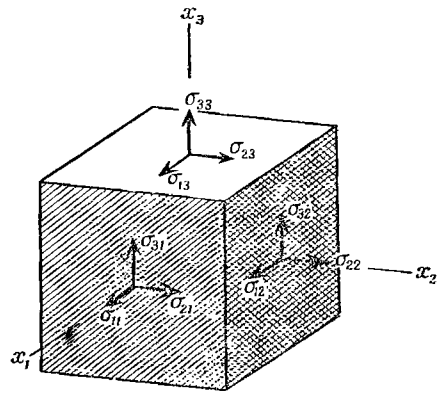
Если тело находится под действием внешних сил или, в более общем случае, если любая часть тела действует с некоторой силой на соседние части, то говорят, что это тело находится в напряженном состоянии. Рассмотрим элемент объема, находящийся в напряженном теле. На него действуют два типа сил. Прежде всего имеются объемные силы (например, сила тяжести), действующие на все элементы тела; их величина пропорциональна *объему* элемента. Во-вторых, имеются силы, действующие на поверхность элемента со стороны окружающих его частей тела. Эти силы пропорциональны *площади* поверхности элемента. Такая сила, отнесенная к единице *площади*, называется *напряжением*. В настоящей главе мы обсудим, как можно дать строгое определение напряжения. Напряжение называют *однородным* (*гомогенным*), если силы, действующие на поверхность элемента определенной формы и ориентации, не зависят от положения этого элемента в теле.

1. Однородное напряжение. Сначала мы ограничимся обсуждением состояний, при которых: 1) напряжение во всем теле однородно, 2) все части тела находятся в статическом равновесии и 3) объемные силы и объемные моменты отсутствуют.

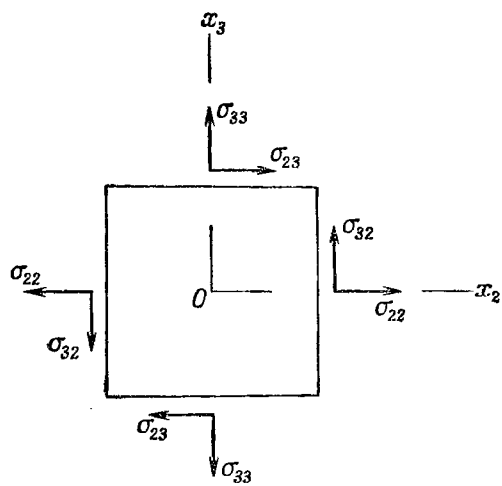
Рассмотрим находящийся внутри такого тела единичный куб (фиг. 25) с ребрами, параллельными осям Ox_1, Ox_2, Ox_3. Через каждую грань куба будет передаваться сила, действующая на внутреннюю часть куба со стороны внешних по отношению к нему частей тела. Силу, приложенную к каждой грани, можно разложить на три компоненты. Рассмотрим сначала три грани, пересекающие три положительных направления осей координат. Обозначим через σ_{ij} компоненту силы, действующую в направлении $+Ox_i$ на грань куба, перпендикулярную Ox_j[1]). Обратим внимание на правило знаков: например, σ_{12} есть сила, действующая в направлении $+Ox_1$ на грань, перпендикулярную Ox_2, со стороны внешних по отношению к кубу частей тела на внутреннюю его часть. Так как напряжение однородно, силы,

[1]) Эта величина, конечно, совершенно не связана с удельной электропроводностью, которую мы также обозначили через σ_{ij}.

действующие на куб через три задние грани, должны быть равны и противоположны силам, показанным на фиг. 25. Здесь σ_{11}, σ_{22}, σ_{33} — *нормальные компоненты* напряжения, а σ_{12}, σ_{21}, σ_{23} и т. д. — *сдвиговые компоненты*. В § 2 доказывается, что определенные таким образом компоненты σ_{ij} образуют тензор второго ранга. Можно видеть, что для принятого нами правила знаков положительные значения σ_{11}, σ_{22}, σ_{33} соответствуют напряжениям растяжения, а отрицательные — напряжениям сжатия. В современных учебниках теории упругости обычно принято такое определение. Однако иногда употребляется обратное правило знаков (напряжения сжатия положительны), в частности, при рассмотрении пьезоэлектрического эффекта и фотоупругости; поэтому необходимо быть внимательным при использовании численных значений, приводимых различными авторами.



Фиг. 25. Силы, действующие на грани единичного куба в однородно напряженном теле.



Фиг. 26. Силы, действующие на перпендикулярные Ox_2 и Ox_3 грани единичного куба, взятого в однородно напряженном теле.

Ось Ox_1 перпендикулярна плоскости чертежа.

Наше предположение о том, что единичный куб должен находиться в состоянии статического равновесия, налагает определенные условия на σ_{ij}. Рассмотрим момент относительно оси, проведенной через центр

куба параллельно Ox_1 (фиг. 26). Так как напряжение однородно, то все три компоненты силы, приложенной к любой грани, проходят через среднюю точку этой грани. Следовательно, нормальные и сдвиговые компоненты не создают момента на гранях, перпендикулярных Ox_1, и мы находим в качестве условия для равновесия, что

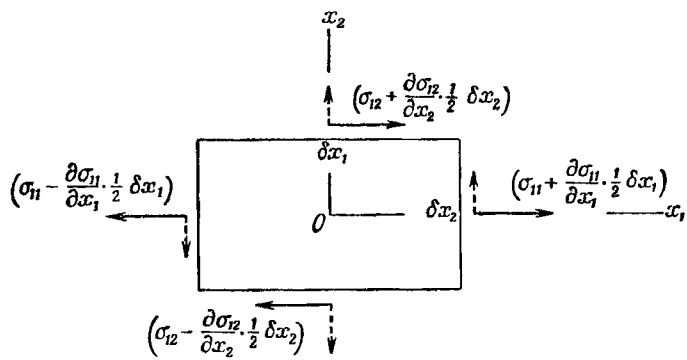
$$\sigma_{23} = \sigma_{32}.$$

Аналогично получаем, что $\sigma_{31} = \sigma_{13}$ и $\sigma_{12} = \sigma_{21}$, так что можно записать

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \tag{5.1}$$

2. Неоднородное напряжение. Соотношение (5.1) остается справедливым даже тогда, когда напряжение неоднородно, когда тело не находится в статическом равновесии и когда присутствуют объемные силы (но не объемные моменты). Это можно доказать следующим образом.

Определим компоненты напряжения так же, как и прежде, учитывая, однако, то обстоятельство, что теперь мы должны охватить



Фиг. 27. Силы в направлении Ox_1, действующие на элементарный параллелепипед в условиях неоднородно напряженного состояния.

Силы, действующие на грани, перпендикулярные Ox_3, не показаны.

случаи, когда напряжение меняется от точки к точке. Разделим силу, действующую на поверхность, проходящую через данную точку, на площадь этой поверхности и устремим площадь поверхности в данной точке к нулю. Предел полученного выражения и определяет напряжение в точке. Так, компонента силы, действующей в направлении Ox_i на элемент поверхности площадью dS, перпендикулярный Ox_j, определяется как $\sigma_{ij}\,dS$ при устремлении dS к нулю. При этом сохраняется то же правило знаков, что и в случае однородного напряжения: $\sigma_{ij}\,dS$ означает силу в направлении $+Ox_i$, созданную действием

частей тела с $+Ox_j$ стороны элемента поверхности на части тела, находящиеся с $-Ox_j$ стороны этого элемента.

Рассмотрим теперь находящийся внутри напряженного тела элементарный прямоугольный параллелепипед с центром в начале координат и ребрами длиной δx_1, δx_2, δx_3, параллельными осям координат. Пусть σ_{ij} означают напряжения в начале координат. Найдем уравнение движения этого элементарного параллелепипеда в направлении Ox_1. Средние значения компоненты σ_{11} для каждой из двух граней, перпендикулярных Ox_1, указаны на фиг. 27. Силы, действующие в направлении Ox_1 на эти две грани, записываются в виде

$$-\left(\sigma_{11}-\frac{\partial\sigma_{11}}{\partial x_1}\frac{1}{2}\delta x_1\right)\delta x_2\delta x_3 \quad \text{и} \quad \left(\sigma_{11}+\frac{\partial\sigma_{11}}{\partial x_1}\frac{1}{2}\delta x_1\right)\delta x_2\delta x_3;$$

результирующая сила есть

$$\frac{\partial\sigma_{11}}{\partial x_1}\delta x_1\delta x_2\delta x_3.$$

Силы, действующие в направлении Ox_1 на две грани, перпендикулярные Ox_2, выражаются в виде

$$-\left(\sigma_{12}-\frac{\partial\sigma_{12}}{\partial x_2}\frac{1}{2}\delta x_2\right)\delta x_3\delta x_1 \quad \text{и} \quad \left(\sigma_{12}+\frac{\partial\sigma_{12}}{\partial x_2}\frac{1}{2}\delta x_2\right)\delta x_3\delta x_1$$

с результирующей силой

$$\frac{\partial\sigma_{12}}{\partial x_2}\delta x_1\delta x_2\delta x_3.$$

Аналогично, для двух граней, перпендикулярных Ox_3, находим результирующую в виде

$$\frac{\partial\sigma_{13}}{\partial x_3}\delta x_1\delta x_2\delta x_3.$$

Если имеется еще объемная сила, компонента которой в направлении Ox_1 равна g_1 на единицу массы (например, сила тяжести), то мы получаем следующее уравнение движения:

$$\frac{\partial\sigma_{11}}{\partial x_1}+\frac{\partial\sigma_{12}}{\partial x_2}+\frac{\partial\sigma_{13}}{\partial x_3}+\rho g_1=\rho\ddot{x}_1,$$

где ρ — плотность и $\ddot{x}_1$ — ускорение в направлении Ox_1.

Рассматривая силы, действующие в направлениях Ox_2 и Ox_3, получаем два аналогичных уравнения. Таким образом, в итоге имеем

$$\frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial x_j}+\rho g_i=\rho\ddot{x}_i. \tag{5.2}$$

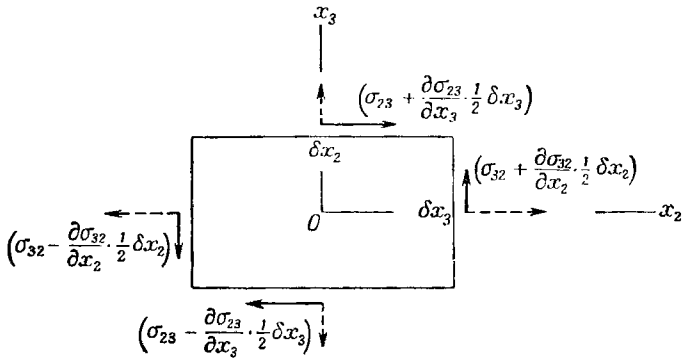
Мы получили фундаментальные уравнения, связывающие пространственные изменения напряжений в теле с ускорениями его элементов; они являются отправной точкой при изучении упругих волн в твердых телах. (Отметим, что мы ввели здесь новое понятие: дифференцирование тензора второго ранга.) Если все части тела находятся

в статическом равновесии, уравнения (5.2) принимают более простой вид

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i = 0. \tag{5.2a}$$

Уравнения (5.2а) называются *уравнениями равновесия* и часто используются в теории упругости.

Запишем теперь уравнение движения для случая вращения рассматриваемого элемента вокруг оси Ox_1. Момент сил (направленный



Фиг. 28. Силы, создающие вращающий момент вокруг оси Ox_1, действующий на элементарный параллелепипед в условиях неоднородно-напряженного состояния.

на фиг. 28 против часовой стрелки), созданный сдвиговыми компонентами напряжения, действующими на две грани, перпендикулярные Ox_2, записывается в виде

$$\left(\sigma_{32} - \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial x_2} \frac{1}{2} \delta x_2\right) \delta x_1 \delta x_3 \frac{1}{2} \delta x_2 + \left(\sigma_{32} + \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial x_2} \frac{1}{2} \delta x_2\right) \delta x_1 \delta x_3 \frac{1}{2} \delta x_2 =$$

$$= \sigma_{32} \delta x_1 \delta x_2 \delta x_3.$$

Момент сил, возникающий в результате действия сдвиговых компонент σ_{23}, записывается аналогичным образом [1])

$$- \sigma_{23} \delta x_1 \delta x_2 \delta x_3.$$

---

[1]) Нормальные компоненты σ_{22} и σ_{33} также дадут вклад в момент сил вследствие того обстоятельства, что результирующая нормальных сил, действующих на грани, не проходит точно через средние точки этих граней. Однако плечо каждой из этих сил будет на порядок величины меньше, чем плечо сдвиговых сил, следовательно, этими членами можно пренебречь. (В первом приближении эти силы фактически попарно уравновешиваются, так что их общий вклад в суммарный момент имеет еще меньшую величину. Аналогичное рассмотрение показывает, что можно также пренебречь моментом сил, возникающим вследствие слегка нецентрального расположения сдвиговых компонент σ_{21} и σ_{31}.

Следовательно, уравнение движения для случая вращения вокруг оси Ox_1 имеет вид

$$(\sigma_{32} - \sigma_{23})\,\delta x_1 \delta x_2 \delta x_3 + G_1\,\delta x_1\,\delta x_2\,\delta x_3 = I_1 \ddot{\theta}_1,$$

где I_1 — момент инерции относительно оси Ox_1, $\ddot{\theta}_1$ — угловое ускорение относительно той же оси, направленное против часовой стрелки, G_1—объемный момент. Момент инерции I_1 есть величина порядка $\rho\,(\delta x)^5$. Поэтому должно выполняться соотношение

$$\sigma_{32} - \sigma_{23} + G_1 = 0, \tag{5.3}$$

так как иначе при стремлении элемента объема к нулю величина $\ddot{\theta}_1$ будет беспредельно возрастать пропорционально $1/(\delta x)^2$. В сплошном материале это, конечно, невозможно; отсюда следует, что соотношение (5.3) справедливо.

Аналогично определяются уравнения движения для случаев вращения вокруг Ox_2 и Ox_3; они записываются следующим образом:

$$\sigma_{13} - \sigma_{31} + G_2 = 0, \tag{5.4}$$

$$\sigma_{21} - \sigma_{12} + G_3 = 0. \tag{5.5}$$

Распределенный объемный момент, т. е. момент, пропорциональный объему, вызывается силами дальнодействия (они обозначены через G_1, G_2, G_3); он возникает, когда анизотропный кристалл намагничивается или поляризуется в поле, как было показано в гл. III, § 3, и гл. IV, § 5. Однако в отсутствие электрических и магнитных полей объемные моменты не возникают [1]), и мы получаем вместо уравнений (5.3) — (5.5) просто

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \tag{5.6}$$

В дальнейшем мы будем предполагать, что равенство (5.6) всегда выполняется. Тем не менее следует помнить, что, строго говоря, трактовка пьезоэлектрических, упругих и фотоупругих констант, которая будет дана ниже, в случае наличия объемных моментов всегда применима [2]).

§ 2. Доказательство того, что σ_{ij} образуют тензор

Докажем теперь, что компоненты напряжения σ_{ij}, определенные в § 1, п. 1 и 2, образуют тензор второго ранга. Мы знаем (см. гл. I, § 3), что если совокупность величин T_{ij} связывает компоненты двух векторов p_i и q_i уравнениями вида

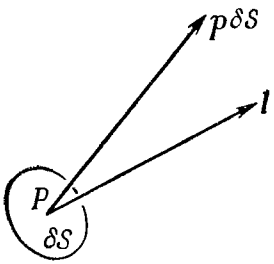
$$p_i = T_{ij} q_j.$$

[1]) Небольшой объемный момент может быть обусловлен эффектом вращения плоскости поляризации (см. гл. XIV).

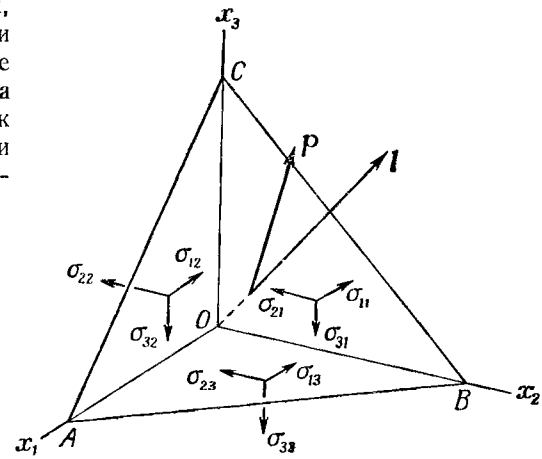
[2]) Необходимость учета локальных объемных моментов при строгом построении теории упругости является еще дискуссионной. Обсуждение этого вопроса и ссылки на литературу можно найти в [77, 50а, 53а].

то T_{ij} подчиняются закону преобразования тензора и, следовательно, образуют тензор. Поэтому мы докажем, что σ_{ij} связывают два вектора уравнениями такого типа.

Выделим внутри напряженного тела произвольный элемент поверхности с площадью δS, содержащий точку P. Восстановим единичный вектор $\boldsymbol{l}$, перпендикулярный этой поверхности. Обозначим силу, приложенную к рассматриваемой поверхности, через $\boldsymbol{p}\delta S$ (фиг. 29). Эта сила берется так, чтобы она была направлена в ту же сторону, что и $\boldsymbol{l}$ (по отношению к элементу поверхности). Пусть $\boldsymbol{l}$ меняет направление так, что элемент поверхности получает всевозможные ориентации, но всегда проходит через P. Как будет изменяться при этом $\boldsymbol{p}\delta S$? Чтобы ответить на этот вопрос, предположим сначала, что напряжение однородно, объемные силы отсутствуют и тело находится в равновесии. Найдем условия равновесия взятого внутри тела элемента в форме тетраэдра $OABC$, показанного на фиг. 30. Здесь ABC представляет рассматриваемый элемент поверхности, перпендикулярный $\boldsymbol{l}$; сила, передаваемая через него, равна $\boldsymbol{p}\times$(площадь ABC). Силы, действующие на три другие взаимно перпендикулярные грани тетраэдра, могут быть выражены через компоненты напряжения σ_{ij} следующим образом. Определяя силы, параллельные Ox_1, получаем



Фиг. 29. Сила, передаваемая через элемент поверхности δS, взятый в напряженм теле.



Фиг. 30. Силы, действующие на грани тетраэдра, образованного тремя координатными плоскостями и гранью ABC.

$$p_1 ABC = \sigma_{11} BOC + \sigma_{12} AOC + \sigma_{13} AOB,$$

или

$$p_1 = \sigma_{11} l_1 + \sigma_{12} l_2 + \sigma_{13} l_3.$$

Аналогично,

$$p_2 = \sigma_{21} l_1 + \sigma_{22} l_2 + \sigma_{23} l_3,$$

$$p_3 = \sigma_{31} l_1 + \sigma_{32} l_2 + \sigma_{33} l_3.$$

Следовательно, мы можем записать

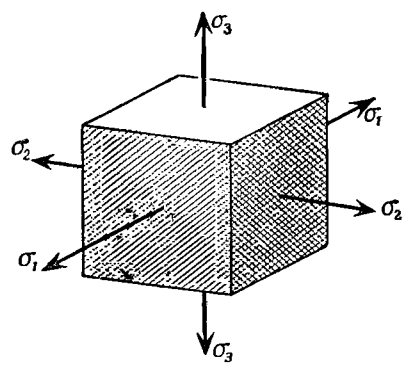
$$p_i = \sigma_{ij} l_j. \tag{5.7}$$

Уравнения (5.7) остаются справедливыми для любой заданной точки и в тех случаях, когда напряжение неоднородно, когда действуют объемные силы и когда тело не находится в статическом равновесии, ибо легко видеть, что появляющимися добавочными членами можно пренебречь, когда тетраэдр делается бесконечно малым.

Так как два вектора p_i и l_j связаны через σ_{ij} линейными соотношениями, то напряжения σ_{ij} образуют тензор. Из уравнения (5.6) видно, что этот тензор является симметричным и, следовательно, он может быть приведен к главным осям (см. гл. I, § 4, п. 1). Поэтому, переходя к главным осям, получаем

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{31} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{bmatrix},$$

где σ_1, σ_2, σ_3 — *главные напряжения*.



Фиг. 31. Силы, действующие на грани единичного куба с ребрами, параллельными направлениям главных напряжений.

Когда направления главных напряжений выбраны в качестве осей координат, сдвиговые компоненты напряжения исчезают; при этом на параллельные осям грани вырезанного из тела единичного куба будут действовать силы, показанные на фиг. 31.

§ 3. Поверхность напряжений

Характеристическая поверхность второго порядка для σ_{ij} (см. гл. I, § 4) называется просто *поверхностью напряжений*. Ее уравнение имеет вид

$$\sigma_{ij} x_i x_j = 1,$$

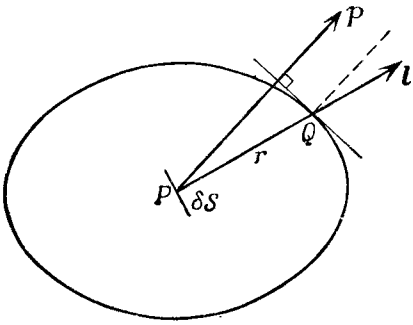
или, при переходе к главным осям,

$$\sigma_1 x_1^2 + \sigma_2 x_2^2 + \sigma_3 x_3^2 = 1.$$

Длины полуосей равны $1/\sqrt{\sigma_1}$, $1/\sqrt{\sigma_2}$, $1/\sqrt{\sigma_3}$. Поскольку каждое из напряжений σ_1, σ_2, σ_3 может быть как положительным, так и отрицательным, эта поверхность второго порядка может быть действительным или мнимым эллипсоидом или гиперболоидом.

Направление результирующей силы $\boldsymbol{p}\,\delta S$, действующей через элемент поверхности δS, может быть найдено из поверхности напряжений с помощью свойства радиуса-вектора и нормали (см. стр. 44). Проведем радиус-вектор r (фиг. 32) параллельно $\boldsymbol{l}$ — единичному вектору, перпендикулярному к δS. Пусть этот радиус-вектор встречает поверхность напряжений в точке Q. Тогда вектор $\boldsymbol{p}$ будет параллелен нормали к этой поверхности в точке Q. Когда точка Q оказывается лежащей на одной из трех главных осей, вектор $\boldsymbol{p}$ параллелен $\boldsymbol{l}$, т. е. сдвиговые компоненты отсутствуют. Согласно свойству, описанному на стр. 43—47, длина вектора r определяет нормальное напряжение σ, действующее на элемент, показанный на фиг. 32, а именно $\sigma = 1/r^2$. Аналитически σ задается уравнением (см. гл. I, § 6, п. 2)

$$\sigma = \sigma_{ij} l_i l_j,$$



Фиг. 32. Определение направления результирующей силы $\boldsymbol{p}\delta S$, передаваемой через элементарную площадку δS (используется свойство радиуса-вектора и нормали к характеристической поверхности напряжений).

$\boldsymbol{l}$ — единичный вектор, нормальный к δS; $\boldsymbol{p}$ — перпендикуляр к плоскости, касательной к характеристической поверхности в точке Q. Плоскость чертежа является центральным сечением характеристической поверхности, содержащим $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{l}$. На чертеже показаны лишь следы элементарной площадки δS и касательной плоскости.

или, если все компоненты приведены к главным осям напряжения,

$$\sigma = \sigma_1 l_1^2 + \sigma_2 l_2^2 + \sigma_3 l_3^2.$$

§ 4. Частные формы тензора напряжений

Рассмотрим теперь форму тензора напряжений, приведенного к главным осям, для некоторых частных случаев.

1. Линейно-напряженное состояние (одноосное напряжение)

$$\begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Примером такого напряжения служит напряжение, создаваемое в длинном вертикальном стержне подвешенным к его концу грузом. Неоднородное распределение одноосного напряжения возникает в длинном стержне под действием чистого изгиба.

2. Плоско-напряженное состояние (двуосное напряжение)

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Примером неоднородного распределения двуосного напряжения является напряжение в тонкой пластинке, нагруженной силами и моментами, приложенными к ее периметру. Окружность Мора для плоско-напряженного состояния показана на фиг. 33.

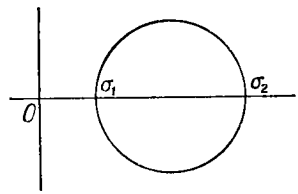
3. Объемно-напряженное состояние (*трехосное напряжение*) — наиболее общая система напряжений с тремя отличными от нуля главными напряжениями.

4. Гидростатическое давление

$$\begin{bmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{bmatrix} \quad \text{или} \quad -p\delta_{ij}.$$

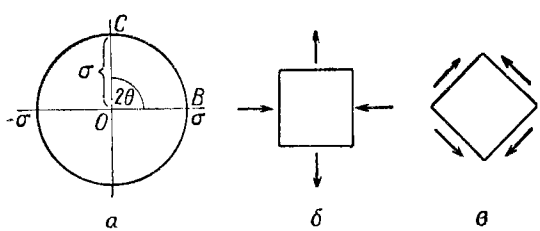
5. Напряжение чистого сдвига

$$\begin{bmatrix} -\sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$



Фиг. 33. Окружность Мора для плоско-напряженного состояния.

(частный случай двуосного напряжения). Неоднородное распределение чисто сдвигового напряжения возникает в длинном стержне, подвергнутом чистому кручению. Построение окружности Мора для этого случая показано на фиг. 34, *а*, откуда сразу видно, что если



Фиг. 34. Напряжение чистого сдвига.

а — окружность Мора; *б* и *в* — силы, действующие на элемент, в ориентациях, отвечающих соответственно точкам *B* и *C*.

оси повернуть на 45° вокруг Ox_3, то нормальные напряжения исчезнут (отсюда название *напряжение чистого сдвига*) и тензор примет вид

$$\begin{bmatrix} 0 & \sigma & 0 \\ \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Ось Ox_3 является *осью сдвига*. На фиг. 34, *б* и *в* показаны силы, действующие на грани элемента в двух различных ориентациях.

§ 5. Различие между тензором напряжений и тензорами, описывающими свойства кристалла

Эту главу мы закончим обсуждением важного различия между тензором напряжений и всеми рассмотренными выше другими тензорами второго ранга. Тензоры, описывающие свойства кристалла (такие, как магнитная восприимчивость или диэлектрическая проницаемость) и представляемые поверхностями второго порядка, имеют определенную ориентацию в кристалле и, как мы видели, должны согласовываться с симметрией кристалла. Они называются *материальными тензорами*. Наоборот, тензор напряжений, как и тензор деформаций, рассматриваемый в следующей главе, может иметь любую ориентацию в кристалле и имеет смысл как для изотропных тел, подобных стеклу, так и для анизотропных тел — кристаллов. Тензор напряжений не описывает каких-либо свойств кристалла, а близок по смыслу к „силе", приложенной к кристаллу; в этом отношении он подобен электрическому полю, которое может, конечно, иметь произвольное направление в кристалле. Такие тензоры называются *полевыми тензорами*.

РЕЗЮМЕ

Напряжение в точке P тела может быть определено следующим образом (§ 2). Пусть δS — площадь элемента поверхности, содержащего точку P. Построим единичный вектор $\boldsymbol{l}$, перпендикулярный этой площадке. Пусть через площадку передается сила $\boldsymbol{p}\,\delta S$, которая действует с положительной стороны площадки (определяемой направлением $\boldsymbol{l}$) на часть тела, находящуюся с отрицательной ее стороны. Тогда статическое рассмотрение (или динамическое, если тело не находится в статическом равновесии) показывает, что при $\delta S \to 0$ вектор $\boldsymbol{p}$ связан с $\boldsymbol{l}$ соотношением

$$p_i = \sigma_{ij} l_j, \tag{5.1}$$

где σ_{ij} — компоненты тензора второго ранга, называемого *напряжением* в данной точке.

Чтобы дать определение каждой из девяти компонент σ_{ij}, нужно рассмотреть силы, действующие на взятый внутри напряженного тела единичный куб с ребрами, параллельными осям x_l (см. фиг. 25). Компоненты с $i = j$ называются *нормальными компонентами* напряжения (они положительны при растяжении), а компоненты с $i \neq j$ — *сдвиговыми компонентами* (§ 1, п. 1).

Уравнения движения для случая поступательного перемещения малого элемента (§ 1, п. 2) имеют вид

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i = \rho \ddot{x}_i, \tag{5.2}$$

или, если все части тела находятся в статическом равновесии,

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i = 0,$$

где ρ — плотность и g_i — объемная сила на единицу массы.

Уравнения движения для случая вращения (§ 1, п. 2) записываются в виде

$$\sigma_{32} - \sigma_{23} + G_1 = 0, \tag{5.3}$$

$$\sigma_{13} - \sigma_{31} + G_2 = 0, \tag{5.4}$$

$$\sigma_{21} - \sigma_{12} + G_3 = 0, \tag{5.5}$$

где G_i — объемный момент (на единицу объема). Следовательно, при отсутствии объемных моментов

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \tag{5.6}$$

Так как $[\sigma_{ij}]$ является симметричным тензором (в отсутствие объемных моментов),его можно привести к главным осям (§ 2) и характеризовать поверхностью второго порядка $\sigma_{ij}x_ix_j = 1$. Напряжение не есть свойство кристалла в отличие от других тензоров второго ранга (магнитной восприимчивости, диэлектрической проницаемости и т. д.), введенных ранее (§ 5); оно близко по смыслу к „силе", приложенной к кристаллу. Следовательно, поверхность напряжений не обязана согласовываться с симметрией кристалла.

ЗАДАЧИ

1. Показать, что при соответствующем выборе осей напряжение в общем случае можно выразить как сумму гидростатического давления (т. е. напряжения в форме $c\delta_{ij}$) и напряжения сдвига (т. е. напряжения, нормальные компоненты которого равны нулю).

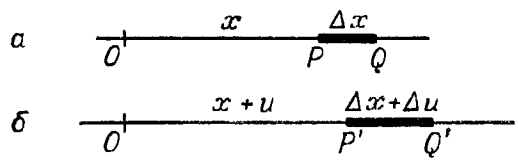
Глава VI

ТЕНЗОР ДЕФОРМАЦИЙ И ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ

К задаче об определении деформированного состояния твердого тела, которой посвящена настоящая глава, можно подойти, рассмотрев сначала более простые одномерный и двумерный случаи.

§. 1. Одномерная деформация

На фиг. 35, *а* изображена растяжимая струна. Зафиксируем в пространстве начало координат O и затем растянем струну. После



Фиг. 35. Деформация растяжимой струны.
а — до растяжения; *б* — после растяжения.

растяжения (фиг. 35, *б*) произвольная точка P перейдет в P'. Пусть

$$OP = x \quad \text{и} \quad OP' = x + u.$$

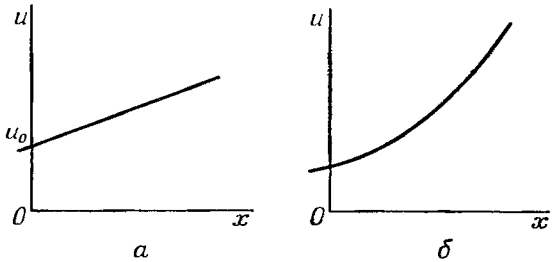
Изменение смещения u с координатой x показано на фиг. 36, *а* и *б*. Фиг. 36, *а*, на которой u есть линейная функция x, соответствует однородному растяжению струны. Фиг. 36, *б* иллюстрирует более общий случай неоднородного растяжения. Пусть точка Q, близкая к P, переходит в Q' при растяжении и пусть $PQ = \Delta x$. Тогда $P'Q' = \Delta x + \Delta u$. При изучении деформации мы интересуемся не абсолютным смещением точек, а их смещением друг относительно друга. Деформация отрезка PQ определяется как отношение приращения его длины к первоначальной длине, т. е.

$$\frac{P'Q' - PQ}{PQ} = \frac{\Delta u}{\Delta x}.$$

Деформация в точке P определяется выражением

$$e = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta u}{\Delta x} = \frac{du}{dx}. \qquad (6.1)$$

Таким образом, деформация в любой точке определяется просто угловым коэффициентом кривых, изображенных на фиг. 36, *а* или *б*; деформация есть производная смещения по координате и является



а *б*

Фиг. 36. Зависимость смещения u от координаты x в растяжимой струне.

а — однородное растяжение; *б* — неоднородное растяжение.

безразмерной величиной. Очевидно в соответствии с данным определением, что положение начала координат не существенно.

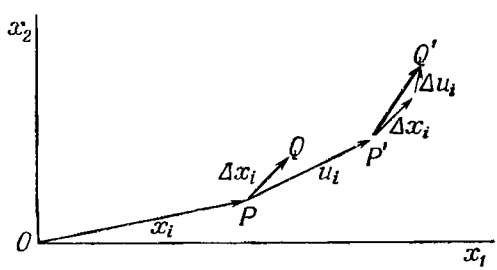
Для *однородной* деформации e — константа, и интегрирование уравнения (6.1) дает

$$u = u_0 + ex, \qquad (6.2)$$

где u_0 — смещение точки, находящейся в начале координат.

§ 2. Двумерная деформация

Рассмотрим теперь, как определяется деформация растяжимой плоской пластинки. Так же как и в § 1, выберем начало координат



Фиг. 37. Двумерная деформация.

и зафиксируем его в пространстве (фиг. 37). Найдем теперь, как смещения точек меняются с координатами. *Впредь мы будем ограничиваться рассмотрением малых смещений.* Пусть точка P

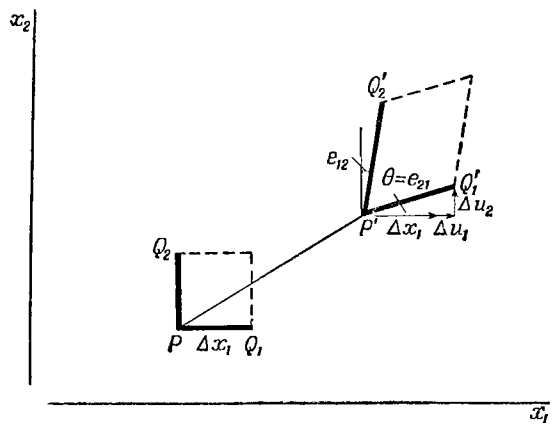
с координатами (x_1, x_2) в неподвижной системе координат переходит после деформации в точку P' с координатами (x_1+u_1, x_2+u_2). Следовательно, вектор u_i есть смещение точки P. Чтобы найти деформацию в этой точке пластинки, введем сначала четыре величины

$$e_{11}=\frac{\partial u_1}{\partial x_1}, \quad e_{12}=\frac{\partial u_1}{\partial x_2}, \quad e_{21}=\frac{\partial u_2}{\partial x_1}, \quad e_{22}=\frac{\partial u_2}{\partial x_2},$$

или в сокращенной записи

$$e_{ij}=\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \qquad (i,\ j=1,\ 2). \tag{6.3}$$

Все e_{ij} являются безразмерными величинами, малыми по сравнению с единицей. Чтобы определить их геометрический смысл, возьмем точку Q, лежащую вблизи P, так что $PQ=[\Delta x_i]$. После деформации Q переходит в Q'; и вектор $P'Q'$, очевидно, равен сумме



Фиг. 38. Определение компонент деформаций при двумерной деформации.

двух векторов $[\Delta x_i]+[\Delta u_i]$. Здесь $[\Delta u_i]$ есть разность смещений двух точек P и Q, первоначально отстоящих друг от друга на $[\Delta x_i]$. Тогда, так как компоненты $[u_i]$ являются функциями координат, мы можем записать

$$\begin{aligned}\Delta u_1&=\frac{\partial u_1}{\partial x_1}\Delta x_1+\frac{\partial u_1}{\partial x_2}\Delta x_2,\\ \Delta u_2&=\frac{\partial u_2}{\partial x_1}\Delta x_1+\frac{\partial u_2}{\partial x_2}\Delta x_2,\end{aligned} \tag{6.4}$$

или кратко

$$\Delta u_i=\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\Delta x_j=e_{ij}\Delta x_j. \tag{6.5}$$

Так как $[\Delta u_i]$ и $[\Delta x_j]$ — векторы, отсюда следует (см. стр. 30), что $[e_{ij}]$ является тензором.

Рассмотрим теперь две ориентации вектора $[\Delta x_i]$: параллельно Ox_1 (вектор PQ_1) и параллельно Ox_2 (вектор PQ_2) (фиг. 38) и тем же способом найдем, как исказится прямоугольный элемент с вершиной в точке P. Для PQ_1 мы положим $\Delta x_2 = 0$; тогда уравнения (6.4) принимают вид

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}\Delta x_1 = e_{11}\Delta x_1,$$

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1}\Delta x_1 = e_{21}\Delta x_1.$$

Смысл величин Δu_1 и Δu_2 ясен из фиг. 38. Нетрудно видеть, что e_{11} определяет растяжение на единицу длины отрезка PQ_1, спроектированного на Ox_1, ибо

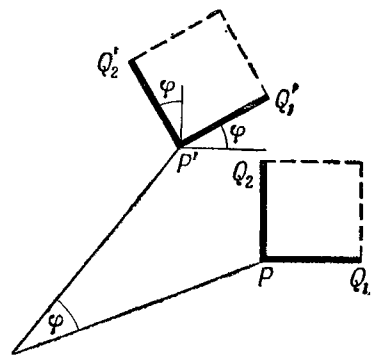
$$\frac{\Delta u_1}{\Delta x_1} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = e_{11}.$$

Величина e_{21} определяет поворот отрезка PQ_1 против часовой стрелки. В самом деле, тангенс угла этого поворота определяется выражением

$$\operatorname{tg}\theta = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1 + \Delta u_1}.$$

Так как мы рассматриваем только малые смещения, то u_1 и u_2 малы по сравнению с x_1, а поэтому Δu_1 и Δu_2 малы по сравнению с Δx_1. Следовательно,

$$\theta = \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1} = e_{21}.$$



Фиг. 39. Смещения при малом повороте пластинки как одного целого в ее плоскости.

Аналогично, величина e_{22} равна растяжению PQ_2 на единицу длины в направлении Ox_2, а e_{12} определяет (малый) поворот по часовой стрелке PQ_2 и $P'Q_2'$.

Можно теперь спросить: правильно ли описывает тензор $[e_{ij}]$ деформацию в точке P? Утвердительный ответ на этот вопрос можно дать только в том случае, если при отсутствии искажений все компоненты $[e_{ij}]$ равны нулю. В действительности же это не имеет места. Рассмотрим простой поворот пластинки как жесткого тела в его плоскости против часовой стрелки на *малый* угол φ (фиг. 39). При этом как PQ_1, так и PQ_2 поворачиваются против часовой стрелки на угол φ и поэтому в соответствии с геометрическим смыслом e_{ij}, установленным выше, можно написать

$$[e_{ij}] = \begin{bmatrix} 0 & -\varphi \\ \varphi & 0 \end{bmatrix}.$$

Форма пластинки не искажается, но $[e_{ij}]$ не обращается в нуль. Чтобы обойти эту трудность, мы должны найти способ вычисления части $[e_{ij}]$, соответствующей повороту тела как целого.

Любой тензор второго ранга может быть представлен как сумма симметричного и антисимметричного тензоров; поэтому тензор $[e_{ij}]$ можно записать в виде

$$e_{ij} = \varepsilon_{ij} + \omega_{ij},$$

где $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji})$ и $\omega_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji})$. Легко видеть, что тензор $[\varepsilon_{ij}]$, заданный таким способом, является симметричным, ибо

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji}) = \varepsilon_{ji};$$

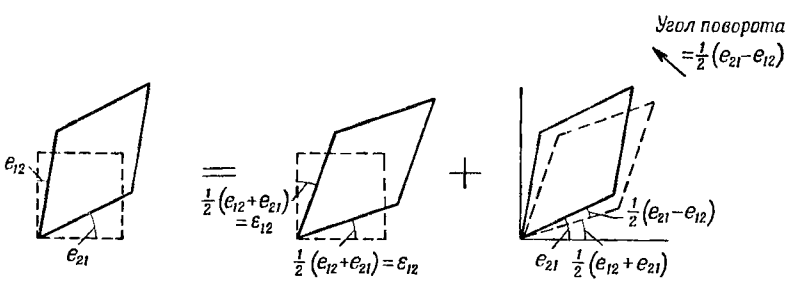
другой введенный тензор $[\omega_{ij}]$ антисимметричен, ибо

$$\omega_{ij} = -\frac{1}{2}(e_{ji} - e_{ij}) = -\omega_{ji}.$$

Выше мы видели, что в случае чистого вращения тензор $[e_{ij}]$ оказывается антисимметричным. Отсюда заключаем, что *симметричная* часть $[e_{ij}]$, т. е. тензор $[\varepsilon_{ij}]$, описывает *деформацию*. Итак, в целом

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_{11} & \frac{1}{2}(e_{12}+e_{21}) \\ \frac{1}{2}(e_{12}+e_{21}) & e_{22} \end{bmatrix}.$$

Такое разделение $[e_{ij}]$ на две части иллюстрируется фиг. 40. Диагональные компоненты тензора $[\varepsilon_{ij}]$ представляют собой растяжения на



Фиг. 40. Двумерный чертеж, иллюстрирующий то обстоятельство, что произвольная деформация (слева) равна собственно деформации (в середине) плюс поворот (справа).

единицу длины вдоль осей Ox_1 и Ox_2. Компонента ε_{12} измеряет *тензорную деформацию сдвига (тензорную сдвиговую деформацию)*. Если в недеформированном теле два линейных элемента расположены параллельно Ox_1 и Ox_2, то после деформации угол между ними будет равен $\frac{1}{2}\pi - 2\varepsilon_{12}$ (см. средний чертеж на фиг. 40). Заметим, в част-

ности, что тензорная деформация сдвига ε_{12} равна *половине* изменения угла между двумя указанными элементами.

1. Однородная двумерная деформация. Когда деформация однородна, все компоненты e_{ij} являются константами и интегрирование уравнения (6.3) дает

$$u_i = (u_0)_i + e_{ij}x_j \quad (i, j = 1, 2), \tag{6.6}$$

где $(u_0)_i$ — смещение точки, находящейся в начале координат [1]).

Если на недеформированной пластинке проведена кривая $f(x_1, x_2)=0$, то после деформации она переходит в $f(x_1', x_2') = 0$, где

$$x_i' = x_i + u_i = (u_0)_i + x_i + e_{ij}x_j.$$

Эта замена переменных линейна, а отсюда следует, что при однородной деформации:

1) прямая остается прямой;

2) параллельные линии остаются параллельными;

3) все прямые линии, параллельные между собой, удлиняются или сокращаются в одинаковой степени;

4) эллипс переходит в иной эллипс, в частности окружность становится эллипсом.

§ 3. Трехмерная деформация

Определение деформации трехмерного тела, например кристалла, вводится аналогично определениям, рассмотренным в двух предыдущих параграфах. Изменение смещения u_i с координатами x_i используется для определения девяти компонент тензора

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (i, j = 1, 2, 3).$$

Они имеют следующий смысл:

e_{11}, e_{22}, e_{33} — растяжения на единицу длины параллельно Ox_1, Ox_2, Ox_3 соответственно;

e_{12} — поворот вокруг Ox_3 в сторону Ox_1 линейного элемента, параллельного Ox_2;

e_{21} — поворот вокруг Ox_3 в сторону Ox_2 линейного элемента, параллельного Ox_1.

Аналогичный смысл имеют другие e_{ij}.

---

[1]) Уравнение (6.6) справедливо и в том случае, когда не выполняется наложенное ранее требование о малости смещения. Это уравнение *определяет* однородную деформацию при смещении любой величины. Поэтому следующие из него выводы (6.1) — (6.4) также справедливы при любой величине смещения.

Если тело вращается без деформации, то соответствующий тензор $[e_{ij}]$ антисимметричен, как мы сейчас докажем. Выберем начало координат на оси вращения. Тогда

$$u_i = e_{ij}x_j.$$

При чистом вращении смещение любой точки перпендикулярно ее радиусу-вектору. Следовательно, $u_i x_i = 0$ (по правилу скалярного произведения) или

$$e_{ij}x_i x_j = 0. \tag{6.7}$$

Так как уравнение (6.7) справедливо для любых x_i, все коэффициенты в левой части должны быть равны нулю. Отсюда

$$e_{ij} = 0, \quad \text{если} \quad i = j;$$
$$e_{ij} = -e_{ji}, \quad \text{если} \quad i \neq j;$$

это и есть условия антисимметричности тензора $[e_{ij}]$. Полученный результат можно было предвидеть, учитывая, что обычное вращение описывается аксиальным вектором (см. гл. II, § 2), а аксиальный вектор эквивалентен антисимметричному тензору второго ранга. Три независимые компоненты тензора $\omega_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji})$ в действительности являются компонентами аксиального вектора, которым описывается вращение.

Тензор деформаций $[\varepsilon_{ij}]$ определяется как симметричная часть $[e_{ij}]$:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} + e_{ji}), \tag{6.8}$$

или в развернутом виде

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_{11} & \frac{1}{2}(e_{12}+e_{21}) & \frac{1}{2}(e_{13}+e_{31}) \\ \frac{1}{2}(e_{12}+e_{21}) & e_{22} & \frac{1}{2}(e_{23}+e_{32}) \\ \frac{1}{2}(e_{13}+e_{31}) & \frac{1}{2}(e_{23}+e_{32}) & e_{33} \end{bmatrix}.$$

Диагональные компоненты ε_{ij} описывают *удлинения*, или *деформации растяжения*, другие компоненты представляют деформации сдвига. Как и в двумерном случае, здесь два линейных элемента в недеформированном теле отложены параллельно Ox_1 и Ox_2. После деформации они образуют угол, равный $\frac{1}{2}\pi - 2\varepsilon_{12}$. Аналогично можно интерпретировать ε_{23} и ε_{31}.

1. Однородная трехмерная деформация. Если деформация однородна, то все компоненты e_{ij} будут константами, как и в двумерном случае, и мы можем записать

$$u_i = (u_0)_i + e_{ij}x_j \quad (i, j = 1, 2, 3), \tag{6.9}$$

где $(u_0)_i$ — смещение точки, находящейся в начале координат. Разбивая e_{ij} на две части, получаем

$$u_i = (u_0)_i + \omega_{ij}x_j + \varepsilon_{ij}x_j. \tag{6.10}$$

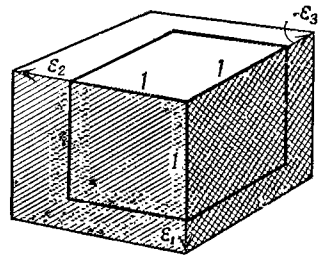
При изображении деформации удобно отделить часть смещения, вызванную перемещением или вращением тела как целого и описываемую первыми двумя членами в правой части уравнения (6.10), от той части, которая вызывается собственно деформацией и описывается последним членом. Поэтому мы записываем

$$\bar{u}_i = \varepsilon_{ij}x_j,$$

тем самым выражая тот факт, что ε_{ij} связывает смещение $\bar{u}_i$ точки, вызванное деформацией, с положением вектора этой точки.

Так как тензор деформаций является симметричным тензором, его можно привести к главным осям. Сдвиговые компоненты при этом исчезают, и мы получаем

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{bmatrix}.$$



Фиг. 41. Деформация единичного куба с ребрами, параллельными трем главным осям деформаций.

На чертеже показано только смещение $\bar{u}_i$, обусловленное собственно деформацией; перемещение и вращение тела как целого не показано.

Геометрический смысл *главных деформаций* ε_1, ε_2 и ε_3 можно понять, взяв единичный куб (фиг. 41) с ребрами, параллельными главным осям; при деформации прямые углы между ребрами сохраняются, а длины ребер становятся равными $(1+\varepsilon_1)$, $(1+\varepsilon_2)$, $(1+\varepsilon_3)$. Было бы ошибкой считать, что главные оси деформации лежат в направлениях, которые остаются неизменными при деформации. Это было бы справедливо лишь в случае равенства нулю вращения ω_{ij}. *Определяющим свойством главных осей служит то, что они являются тремя взаимно перпендикулярными направлениями в теле, которые при деформации остаются взаимно перпендикулярными.*

Изменение объема единичного куба, изображенного на фиг. 41, называется *объемным расширением* и равно

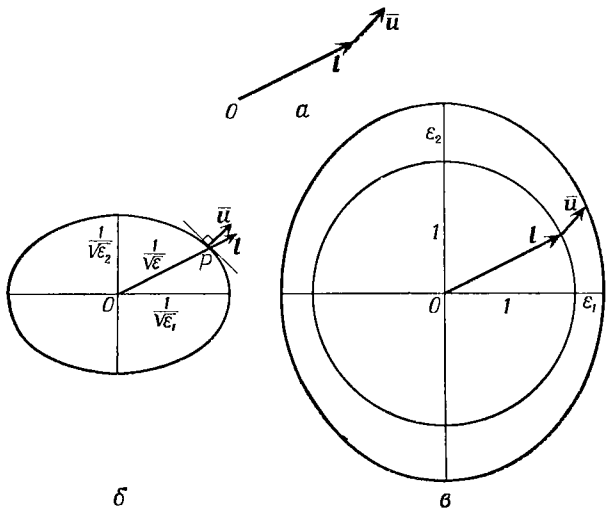
$$\Delta = (1+\varepsilon_1)(1+\varepsilon_2)(1+\varepsilon_3) - 1 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3$$

ввиду малости ε_i. В произвольной системе координат объемное расширение задается выражением $\Delta = \varepsilon_{ii}$ и является инвариантом.

Поверхность деформаций, эллипсоид деформаций и удлинение в произвольном направлении. Уравнение характеристической поверхности деформаций имеет вид

$$\varepsilon_{ij} x_i x_j = 1.$$

Эта поверхность идентична поверхности второго порядка $e_{ij} x_i x_j = 1$, что можно видеть, записав уравнения в развернутом виде. Таким



Фиг. 42. Однородная трехмерная деформация.

а — обусловленное деформацией смещение $\bar{u}$ конца единичного вектора l, взятого в недеформированном теле; *б* — определение направления $\bar{u}$ по направлению l, основанное на использовании свойства радиуса-вектора и нормали характеристической поверхности деформаций. Направление $\bar{u}$ совпадает с направлением нормали к характеристической поверхности в точке P. Растяжение ε в направлении l определяется соотношением $OP = 1/\sqrt{\varepsilon}$; *в* — деформация единичной сферы в случае однородной трехмерной деформации тела.

образом, характеристическая поверхность для тензора $[e_{ij}]$ изображает только его симметричную часть.

Деформация в произвольном направлении, как это определено в гл. I, § 6, п. 1, есть растяжение на единицу длины, или *удлинение* отрезка, первоначально имевшего это направление. Вектор l (фиг. 42, *а*) представляет собой отрезок единичной длины в недеформированном теле. При деформации он изменяется как по длине, так и по направлению. Смещение его конца вследствие деформации есть

$$\bar{u}_i = \varepsilon_{ij} l_j.$$

Удлинение ε равно компоненте $\bar{u}$ в направлении l и, следовательно,

$$\varepsilon = \bar{u}_i l_i = \varepsilon_{ij} l_i l_j,$$

или, если выразить его через главные деформации,

$$\varepsilon = \varepsilon_1 l_1^2 + \varepsilon_2 l_2^2 + \varepsilon_3 l_3^2.$$

Полученный результат можно представить также поверхностью деформаций, приведенной на фиг. 42, *б*. Радиус-вектор OP в направлении l имеет длину $1/\sqrt{\varepsilon}$, а направление $\bar{u}$ совпадает с направлением нормали в точке P (см. гл. I, § 7). На фиг. 42, *б* точка P лежит в плоскости Ox_1 и Ox_2, но построение остается, конечно, справедливым и в любых других случаях.

Для сравнения с формой поверхности деформаций на фиг. 42, *в* показана деформация единичной сферы с теми же самыми значениями ε_1 и ε_2. Чтобы найти уравнение деформированной сферы, подставляем в ее уравнение

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$$

значения

$$x_1' = x_1(1+\varepsilon_1), \quad x_2' = x_2(1+\varepsilon_2), \quad x_3' = x_3(1+\varepsilon_3);$$

при этом получается уравнение эллипсоида

$$\frac{x_1'^2}{(1+\varepsilon_1)^2} + \frac{x_2'^2}{(1+\varepsilon_2)^2} + \frac{x_3'^2}{(1+\varepsilon_3)^2} = 1. \tag{6.11}$$

Этот эллипсоид обычно называется *эллипсоидом деформаций*; его не следует путать с характеристической поверхностью деформаций. Так как главные деформации ε_1, ε_2, ε_3 могут быть и положительными и отрицательными, поверхность деформаций

$$\varepsilon_1 x_1^2 + \varepsilon_2 x_2^2 + \varepsilon_3 x_3^2 = 1 \tag{6.12}$$

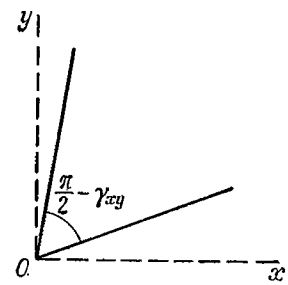
может быть действительным или мнимым эллипсоидом или гиперболоидом. Поверхность же, задаваемая уравнением (6.11), всегда представляет собой эллипсоид.

„Технические" деформации. Тензор деформаций $[\varepsilon_{ij}]$ часто записывают в виде

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_x & \frac{1}{2}\gamma_{xy} & \frac{1}{2}\gamma_{zx} \\ \frac{1}{2}\gamma_{xy} & \varepsilon_y & \frac{1}{2}\gamma_{yz} \\ \frac{1}{2}\gamma_{zx} & \frac{1}{2}\gamma_{yz} & \varepsilon_z \end{bmatrix},$$

так что, например, $\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{12}$. В соответствии с этим определением компонента γ_{xy} равна уменьшению угла между двумя прямыми,

первоначально параллельными осям Ox и Oy (фиг. 43). Компоненты γ часто называют „сдвиговыми компонентами деформаций", „сдвиговыми деформациями" или просто „сдвигами"; однако следует ясно понимать, что из-за наличия добавочных множителей 2 эти величины не равны недиагональным компонентам тензора деформаций ε_{ij}. Чтобы избежать путаницы, примем установившуюся в технике терминологию и назовем γ *сдвиговыми деформациями*, или *„техническими" сдвиговыми деформациями*, и в отличие от этого будем называть ε_{23}, ε_{31} и ε_{12} *тензорными сдвиговыми деформациями*. Следует отметить, что матрица технических деформаций



Фиг. 43. Построение, иллюстрирующее смысл компоненты γ_{xy} „технических" сдвиговых деформаций.

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{zx} \\ \gamma_{xy} & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} & \gamma_{yz} & \varepsilon_z \end{pmatrix}$$

не образует тензора. Если мы хотим преобразовать компоненты деформаций к другим осям координат, то проще всего это сделать, взяв компоненты тензора ε_{ij}, для которых справедлив обычный закон преобразования тензора второго ранга (см. стр. 26). Закон преобразования деформаций, выраженных через ε_x, γ_{xy}, ..., естественно, имеет более громоздкую форму из-за появления множителей 2.

Построение окружности Мора (см. гл. II, § 4) особенно полезно при преобразовании компонент деформаций; здесь опять удобнее пользоваться тензорными компонентами деформаций, для которых построение справедливо без каких-либо изменений. Вводя множители 2, можно, конечно, применить построение окружности Мора и для технических деформаций, но реальной необходимости в таком способе расчета нет. Чтобы избежать путаницы, читателю рекомендуется использовать это построение только для истинно тензорных компонент.

Плоская деформация и чистый сдвиг [1]). Когда одна из главных деформаций равна нулю, то говорят, что тело испытывает *плоскую деформацию* или находится в плоско-напряженном состоянии. *Чистый сдвиг* есть частный случай плоской деформации. Тензор деформаций для чистого сдвига вокруг Ox_3 имеет вид

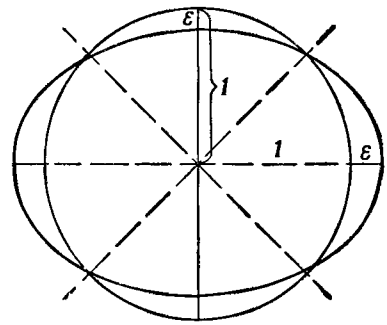
$$\begin{bmatrix} 0 & \varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

[1]) См. также [118]. — *Прим. перев.*

При приведении к главным осям поворотом на 45° вокруг Ox_3 этот тензор принимает вид

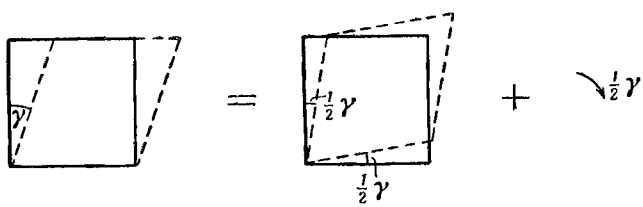
$$\begin{bmatrix} -\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Деформация чистого сдвига аналогична напряжению чистого сдвига, обсуждавшемуся на стр. 115; построение окружности Мора для поворота осей координат на 45° в обоих случаях идентично (см. фиг. 34, *а*). Важной характеристикой деформации чистого сдвига является равенство нулю объемного расширения. Деформация сферы при этих условиях показана на фиг. 44. Так как значение ε мало по сравнению с единицей, то из симметрии ясно, что растяжение в промежуточных 45-градусных направлениях равно нулю.



Фиг. 44. Деформация единичной сферы при чистом сдвиге.

Простым сдвигом[1]) в противоположность чистому сдвигу часто называют деформацию, изображенную на фиг. 45 слева. Однако по существу эта деформация идентична чистому сдвигу; единственное различие состоит в том, что простой сдвиг включает также вращение. На фиг. 45 это показано схематически.



Фиг. 45. Схема, показывающая, что простой сдвиг (слева) равен чистому сдвигу (в середине) плюс поворот (справа).

2. Обобщение на случай неоднородной деформации. Результаты § 3, п. 1 получены для однородной деформации, однако они непосредственно обобщаются и на случай неоднородной деформации. Вокруг каждой точки неоднородно напряженного тела можно выделить некоторую малую область, в которой деформация практически однородна. Следовательно, для любой точки могут быть определены направления трех главных деформаций; в общем случае они

[1]) См. также [118]. — *Прим. перев.*

будут различными для каждой точки тела. Аналогично, деформация в любой точке неоднородно деформированного тела может быть характеризована поверхностью деформаций, которая будет менять свою форму, размеры и ориентацию при переходе от одной точки тела к другой.

§ 4. Деформация и симметрия кристалла

Закончим общее изучение деформаций установлением хотя и очевидного, но важного различия. Деформация кристалла не есть его свойство в том смысле, в каком является, например, диэлектрическая постоянная. Деформация — это реакция кристалла на воздействие. Таким воздействием может быть напряжение (явление упругости) или электрическое поле (пьезоэлектрический эффект). В обоих случаях величина и направление главных деформаций определяются как физическими свойствами и симметрией кристалла, так и величиной и направлением воздействия. Следовательно, тензор деформаций, подобно тензору напряжения, не обязан согласовываться с симметрией кристалла (если не согласуется само воздействие). Однако деформация может быть также вызвана изменением температуры (тепловое расширение, см. § 5). В этом случае воздействие является ненаправленным (оно описывается скаляром), вследствие чего результирующая деформация должна согласовываться с симметрией кристалла. Совершенно то же самое относится и к электрической поляризации (гл. IV). Поляризация не должна согласовываться с симметрией кристалла, когда она вызывается полем, приложенным в произвольном направлении; если же она вызывается изменением температуры (пироэлектрический эффект), то должна согласовываться с симметрией кристалла.

§ 5. Тепловое расширение [1])

Если температура кристалла изменяется, то деформация, возникающая при этом, может быть описана тензором деформаций $[\varepsilon_{ij}]$. Когда одинаковое малое изменение температуры ΔT происходит во всем кристалле, то деформация однородна и все компоненты $[\varepsilon_{ij}]$ оказываются пропорциональными ΔT, т. е.

$$\varepsilon_{ij} = \alpha_{ij} \Delta T, \tag{6.13}$$

где α_{ij} — константы, называемые *коэффициентами теплового расширения*. Так как $[\varepsilon_{ij}]$ — тензор, то и $[\alpha_{ij}]$ — тензор; более того, так как $[\varepsilon_{ij}]$ — симметричный тензор, то и $[\alpha_{ij}]$ — тоже симметричный тензор. Следовательно, тензор теплового расширения $[\alpha_{ij}]$ может

[1]) Особенности теплового расширения кристаллов подробно рассмотрены А. В. Шубниковым [120]. — *Прим. перев.*

быть приведен к главным осям; тогда уравнения (6.13) упрощаются и принимают вид

$$\varepsilon_1 = \alpha_1 \Delta T, \quad \varepsilon_2 = \alpha_2 \Delta T, \quad \varepsilon_3 = \alpha_3 \Delta T, \tag{6.14}$$

где α_1, α_2, α_3 — *главные коэффициенты расширения*. Отсюда следует, что если выбрать в кристалле сферу, то при изменении температуры она становится эллипсоидом (эллипсоидом деформаций) с осями, пропорциональными $(1+\alpha_1 \Delta T)$, $(1+\alpha_2 \Delta T)$, $(1+\alpha_3 \Delta T)$.

Уравнение характеристической поверхности (см. гл. I, § 4) для теплового расширения имеет вид

$$\alpha_{ij} x_i x_j = 1,$$

или в главной системе координат

$$\alpha_1 x_1^2 + \alpha_2 x_2^2 + \alpha_3 x_3^2 = 1.$$

Форма и ориентация этой поверхности в соответствии с принципом Неймана (см. стр. 35) подчиняются ограничениям, накладываемым симметрией кристалла. [Соответствующие данные для различных кристаллографических систем можно найти в табл. 3.] Поскольку тепловое расширение кристалла должно обладать симметрией этого кристалла, оно не может привести к исчезновению какого-либо элемента симметрии (предполагается, что фазовые превращения отсутствуют). Именно поэтому кристалл относится к тому или иному кристаллографическому классу независимо от температуры.

ТАБЛИЦА 6

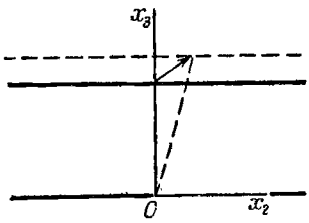
***Главные коэффициенты теплового расширения кристаллов** **

Кристалл	Система	Температура	$\alpha_1 \cdot 10^6$, $град^{-1}$	$\alpha_2 \cdot 10^6$, $град^{-1}$	$\alpha_3 \cdot 10^6$, $град^{-1}$
Гипс	Моноклинная . . .	40° С	1,6	42	29
Арагонит	Орторомбическая .	40° С	35	17	10
Цинк	Гексагональная .	60° К	—2		55
		150° К	8		65
		300° К	13		64
Кварц	Тригональная . . .	Комнатная	13		8
Кальцит	» . . .	40° С	—5,6		25
Рутил	Тетрагональная . .	40° С	7,1		9,2
Медь	Кубическая	Комнатная	16		
Алмаз	»	»	0,89		
Хлорид натрия	»	»	40		

* Приведенные значения взяты из таблиц [54].

Коэффициент объемного расширения равен $(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)$, или в общем слу́чае α_{ii}; последнее выражение является инвариантом.

Для большинства кристаллов главные коэффициенты теплового расширения положительны, и, следовательно, характеристическая поверхность теплового расширения является эллипсоидом, однако у небольшого числа кристаллов некоторые коэффициенты отрицательны (например, у кальцита, берилла, йодида серебра). Измеренные значения коэффициентов теплового расширения для ряда кристаллов приведены в табл. 6. Эти коэффициенты часто заметно зависят от температуры (теоретически они должны стремиться к нулю при 0 °K).



Фиг. 46. Тепловое расширение плоскопараллельной пластинки.
(Сильно преувеличено.)

Тепловое расширение иногда определяется путем измерения увеличения толщины плоскопараллельной пластинки при ее нагревании [1]). Совершенно очевидно, что этим методом измеряется коэффициент расширения в направлении, перпендикулярном пластинке. Однако в пластинке произвольной ориентации деформации отнюдь не являются простыми. На фиг. 46 изображена пластинка, лежащая на плоском основании. Предположим, что точка O на нижней поверхности пластинки остается неподвижной. Выберем оси координат так, как показано на фиг. 46; ось Ox_3 перпендикулярна пластинке. Так как прямые, параллельные Ox_1 и Ox_2, параллельны основанию, то деформация описывается тензором

$$[e_{ij}]=\begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ 0 & 0 & e_{33} \end{bmatrix}.$$

Измеренное расширение равно $e_{33}=\varepsilon_{33}=\alpha_{33}\Delta T$ [согласно уравнениям (6.8) и (6.13)]; здесь α_{33} представляет собой коэффициент расширения вдоль Ox_3 в смысле определения, данного в гл. I, § 6, п. 1. Следует отметить, что при расширении прямая, параллельная Ox_3, поворачивается; это подтверждается наличием компонент e_{13} и e_{23}.

1. Конус нулевого расширения в кальците. В кальците (тригональная система) характеристическая поверхность теплового расширения является поверхностью вращения вокруг оси третьего порядка. Из табл. 6 можно видеть, что коэффициент теплового расширения этого кристалла в направлении оси третьего порядка положителен, а два других (равных) коэффициента — отрицательны.

[1]) Этот экспериментальный метод описан Туттоном [90]. Ему формально эквивалентен рентгеновский метод, при котором измеряется изменение расстояния между параллельными атомными плоскостями.

Следовательно, одна из осей поверхности теплового расширения оказывается действительной и две другие — мнимыми, а сама поверхность будет двуполостным гиперболоидом вращения (см. фиг. 5, *в*). Асимптотический конус определяет семейство направлений, для которых радиус-вектор $1/\sqrt{\alpha}$ бесконечен, т. е. коэффициент теплового расширения равен нулю. Можно легко найти угол θ между этими направлениями и осью Ox_3. Если (l_1, l_2, l_3) — направляющие косинусы одного из направлений, для которых коэффициент теплового расширения равен нулю, то

$$\left(l_1^2 + l_2^2\right)\alpha_1 + l_3^2\alpha_3 = \\ = \left(1 - l_3^2\right)\alpha_1 + l_3^2\alpha_3 = 0.$$

Так как

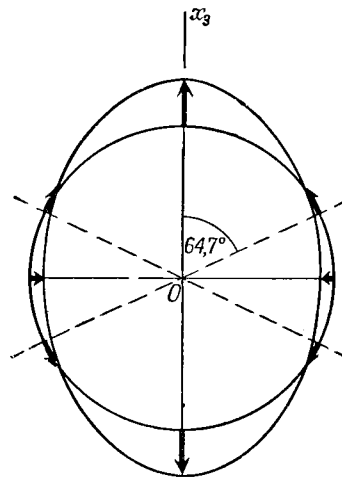
$$l_3 = \cos\theta,$$

то

$$\operatorname{tg}^2\theta = -\frac{\alpha_3}{\alpha_1}.$$

Используя значения, приведенные в табл. 6, получаем

$$\theta = 64{,}7°.$$



Фиг. 47. Тепловое расширение единичной сферы из кристалла кальцита.

Видна коническая поверхность, не испытывающая растяжения. (Сильно преувеличено.)

Тепловое расширение единичной сферы, взятой в кристалле кальцита, представлено в сильно преувеличенном виде на фиг. 47. Можно заметить, что хотя длина отрезков, лежащих под углом 64,7° к оси Ox_3, не изменяется при нагревании, их ориентация относительно этой оси изменяется, так как нормали в соответственных точках характеристической поверхности теплового расширения перпендикулярны радиусам-векторам.

РЕЗЮМЕ

Смещения и деформации предполагаются малыми.

1. Деформации. Общие положения. Если u_i означает смещение точки x_j деформированного тела, то тензор $[e_{ij}]$ определяется выражением

$$e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \tag{6.3}$$

Симметричная часть этого тензора с компонентами

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(e_{ij} + e_{ji}\right)$$

описывает *деформацию* в точке; антисимметричная часть с компонентами

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2}(e_{ij} - e_{ji})$$

описывает *вращение*.

Компоненты ε_{11}, ε_{22}, ε_{33} называются *удлинениями*, или *деформациями растяжения*; они представляют собой растяжения, испытываемые при деформации элементами единичной длины, расположенными первоначально параллельно Ox_1, Ox_2 и Ox_3 соответственно. Компоненты ε_{23}, ε_{31}, ε_{12} называются *тензорными сдвиговыми деформациями*. Величина $2\varepsilon_{23}$ равна изменению угла между двумя элементами, расположенными до деформации параллельно осям Ox_2 и Ox_3 (если угол уменьшается, то деформация положительна); аналогичный смысл имеют ε_{31} и ε_{12}. Главные деформации ε_1, ε_2, ε_3 в данной точке являются главными компонентами тензора $[\varepsilon_{ij}]$. Главные направления деформаций определяют в данной точке три взаимно перпендикулярных направления, которые остаются взаимно перпендикулярными при деформации.

Деформация в точке характеризуется *поверхностью деформаций*, уравнение которой записывается в виде

$$\varepsilon_{ij}x_i x_j = 1,$$

или, если в качестве осей выбрать направления главных деформаций,

$$\varepsilon_1 x_1^2 + \varepsilon_2 x_2^2 + \varepsilon_3 x_3^2 = 1.$$

Величины $\gamma_{yz} = 2\varepsilon_{23}$, $\gamma_{zx} = 2\varepsilon_{31}$, $\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{12}$ называются („*техническими*“) *сдвиговыми деформациями*. Таблица, составленная из деформаций растяжения и „технических“ сдвиговых деформаций, не образует тензора.

2. Однородная деформация. При однородной деформации выполняются соотношения

$$u_i = (u_0)_i + e_{ij}x_j = (u_0)_i + \omega_{ij}x_j + \varepsilon_{ij}x_j; \qquad (6.10)$$

смещение за счет собственно деформации можно определить как

$$\bar{u}_i = \varepsilon_{ij}x_j.$$

Единичный куб, выбранный в недеформированном теле так, что его ребра параллельны направлениям главных деформаций, в результате деформации превращается в прямоугольный параллелепипед с ребрами длиной $(1+\varepsilon_1)$, $(1+\varepsilon_2)$, $(1+\varepsilon_3)$. *Объемное расширение* (увеличение объема) равно $(\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3)$ или ε_{ii}.

Удлинение в произвольном направлении выражается в виде

$$\varepsilon = \varepsilon_{ij}l_i l_j,$$

или

$$\varepsilon = \varepsilon_1 l_1^2 + \varepsilon_2 l_2^2 + \varepsilon_3 l_3^2,$$

Направление вектора $\bar{u}$ и значение ε для любого заданного направления могут быть найдены с помощью свойства радиуса-вектора и нормали поверхности деформаций.

Единичная сфера преобразуется при деформации в эллипсоид

$$\frac{x_1^2}{(1+\varepsilon_1)^2}+\frac{x_2^2}{(1+\varepsilon_2)^2}+\frac{x_3^2}{(1+\varepsilon_3)^2}=1, \tag{6.11}$$

называемый *эллипсоидом деформаций*.

Проведенное рассмотрение для однородной деформации приложимо и к любому достаточно малому объему неоднородно напряженного тела.

3. Деформация и симметрия кристалла. Деформация кристалла является не его физическим свойством, а лишь реакцией кристалла на воздействие. Деформация, вызванная напряжением (упругость) или электрическим полем (пьезоэлектричество), не должна согласовываться с симметрией кристалла, если сами напряжение и поле с ней не согласуются. Наоборот, деформация, вызванная изменением температуры (тепловое расширение), должна согласовываться с симметрией кристалла.

4. Тепловое расширение. Если при однородном нагреве температура кристалла возрастает на ΔT, то кристалл испытывает однородную деформацию, описываемую уравнением

$$\varepsilon_{ij}=\alpha_{ij}\,\Delta T, \tag{6.13}$$

где α_{ij} — коэффициенты теплового расширения, $[\alpha_{ij}]$ — симметричный тензор второго ранга. Отсюда следует, что существуют три главных коэффициента теплового расширения и три соответствующих им главных направления. Деформацию вдоль этих направлений можно записать в виде $\varepsilon_1=\alpha_1\Delta T$, $\varepsilon_2=\alpha_2\Delta T$, $\varepsilon_3=\alpha_3\Delta T$. Уравнение характеристической поверхности теплового расширения имеет вид

$$\alpha_1x_1^2+\alpha_2x_2^2+\alpha_3x_3^2=1.$$

Согласно принципу Неймана, деформация при тепловом расширении должна согласовываться с симметрией кристалла.

ЗАДАЧИ

1. Малая деформация некоторого кристалла задана тензором

$$[\varepsilon_{ij}]=\begin{bmatrix} 8 & -1 & -1\\ 1 & 6 & 0\\ -5 & 0 & 2\end{bmatrix}\times 10^{-6}.$$

Определить тензоры деформаций $[\varepsilon_{ij}]$ и вращения $[\omega_{ij}]$ и найти отсюда значения и направления главных деформаций ε_1, ε_2, ε_3, а также ось и угол вращения.

2. Выразить угол поворота показанной на фиг. 46 прямой, параллельной Ox_3, через α_{ij}.

3. Показать, что температурная зависимость названного выше угла θ характеризуется величиной

$$\sqrt{-\alpha_1\alpha_3} = 2{,}4'' \quad град^{-1}.$$

4. Параметры ячейки моноклинного кристалла (эфвиллита) имеют следующую величину:

$$a = 16{,}21, \quad b = 5{,}63, \quad c = 13{,}23\text{Å}, \quad \beta = 134°48'.$$

При рентгенографических измерениях коэффициентов теплового расширения вдоль нормалей к определенным плоскостям $h0l$ получены следующие результаты:

h	0	l	α	h	0	l	α
$\bar{4}$	0	14	$13{,}7 \cdot 10^{-6}$ $град^{-1}$	20	0	$\bar{8}$	$24{,}3 \cdot 10^{-6}$ $град^{-1}$
0	0	12	17,1	16	0	$\bar{12}$	11,8
6	0	8	21,4	8	0	$\bar{12}$	8,2
18	0	$\bar{4}$	28,2				

Отложить в масштабе отрезки a и c соответственно вдоль осей Ox и Oz и восстановить нормали ко всем плоскостям $h0l$, перечисленным выше. На этих нормалях отложить в соответствующем масштабе точки на расстояниях $\pm 1/\sqrt{\alpha}$ от начала координат. Построить главное сечение характеристической поверхности теплового расширения, параллельное (010). Определить отсюда направления главных осей по отношению к Ox и Oz и значения главных коэффициентов теплового расширения α_1 и α_3.

5. Для моноклинного кристалла были найдены следующие значения коэффициентов теплового расширения:

Направление	$\alpha \cdot 10^6$, $град^{-1}$
Параллельно оси Oy (ось второго порядка)	41,0
Параллельно оси Oz	32,0
Перпендикулярно осям Oz и Oy	15,0
Перпендикулярно оси Oy и под углом 45° к оси Oz * . . .	16,0

* Угол отсчитывается по часовой стрелке при повороте вокруг оси Oy.

Определить три главных коэффициента расширения и углы между главными направлениями и осью Oz. Проиллюстрировать решение построением окружности Мора.

6. Параметры ячейки орторомбического кристалла (арагонита)

$$a : b : c = 0{,}6224 : 1 : 0{,}7206.$$

При нагревании от 0 до 100 °С угол между гранями (100) и (110) уменьшается на 1,14′, а угол между гранями (001) и (011) возрастает на 2,84″. Коэффициент объемного расширения этого кристалла равен $62{,}0 \cdot 10^{-6}$ $град^{-1}$. Вычислить три главных коэффициента теплового расширения.

Глава VII

ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСТВО [1]. ТЕНЗОРЫ ТРЕТЬЕГО РАНГА

§ 1. Прямой пьезоэлектрический эффект

У некоторых кристаллов при приложении к ним механического напряжения возникает электрический момент, величина которого пропорциональна приложенному напряжению. Это явление называется *прямым пьезоэлектрическим эффектом*. Например, если одноосное напряжение растяжения приложено к кристаллу кварца (класс 32) вдоль одной из его осей второго порядка, то величина электрического момента на единицу объема, или величина поляризационного заряда на единицу площади, определяется уравнением

$$P = d\sigma, \tag{7.1}$$

где d — константа, называемая *пьезоэлектрическим модулем*. Из этого уравнения следует, что замена напряжения растяжения напряжением сжатия приводит к изменению направления поляризации на обратное.

В общем случае напряженное состояние характеризуется, как мы видели в гл. V, тензором второго ранга с девятью компонентами, тогда как поляризация кристалла, будучи вектором, описывается тремя компонентами. Экспериментально найдено, что когда произвольное напряжение действует на пьезоэлектрический кристалл, то каждая компонента поляризации P_i линейно связана со всеми компонентами σ_{ij} точно так же, как в любом диэлектрике каждая компонента P_i линейно связана со всеми тремя компонентами E_i [2]. Поэтому мы можем записать для P_1 уравнение

$$P_1 = d_{111}\sigma_{11} + d_{112}\sigma_{12} + d_{113}\sigma_{13} + d_{121}\sigma_{21} + d_{122}\sigma_{22} + d_{123}\sigma_{23} + \\ + d_{131}\sigma_{31} + d_{132}\sigma_{32} + d_{133}\sigma_{33}, \tag{7.2}$$

где d — постоянные коэффициенты; для P_2 и P_3 уравнения будут аналогичны. Используя принятое обозначение суммирования (см. гл. I, § 1, п. 1) и объединяя члены в правой части (7.2), можно сокращенно записать это уравнение в виде

$$P_1 = d_{11k}\sigma_{1k} + d_{12k}\sigma_{2k} + d_{13k}\sigma_{3k},$$

---

[1] Полное изложение вопроса см. в книгах Кэди [24] и Мэзона [66].

[2] Если кристалл обладает спонтанной поляризацией, то под P_i следует понимать изменение этой поляризации, вызванное механическим напряжением.

или еще более кратко в виде

$$P_1 = d_{1jk}\sigma_{jk}.$$

Аналогично, $P_2 = d_{2jk}\sigma_{jk}$ и $P_3 = d_{3jk}\sigma_{jk}$. Итак, общее соотношение между P_i и σ_{ij} имеет вид

$$P_i = d_{ijk}\sigma_{jk}, \tag{7.3}$$

где d_{ijk} — *пьезоэлектрические модули.*

Выясним физический смысл различных модулей. Если к кристаллу приложено одноосное растягивающее напряжение σ_{11}, то возникающая поляризация имеет компоненты

$$P_1 = d_{111}\sigma_{11}, \quad P_2 = d_{211}\sigma_{11}, \quad P_3 = d_{311}\sigma_{11}.$$

Таким образом, измеряя P_1, P_2 и P_3, можно в этом случае найти значения d_{111}, d_{211} и d_{311}. Если представить себе далее, что одноосное растягивающее напряжение прикладывается поочередно вдоль осей Ox_2 и Ox_3, то можно выяснить физический смысл и других коэффициентов d_{ijk} с $j = k$.

Предположим теперь, что к кристаллу приложено чисто сдвиговое напряжение σ_{12}. Выше уже указывалось, что если исключить объемные моменты, то при приложении напряжения σ_{12} одновременно появляется равная компонента σ_{21}. Поэтому имеем

$$P_1 = d_{112}\sigma_{12} + d_{121}\sigma_{21} = (d_{112} + d_{121})\sigma_{12};$$

аналогичные уравнения можно написать для P_2 и P_3. Таким образом, сумма $(d_{112} + d_{121})$ имеет определенный физический смысл, но невозможно придумать эксперимент, с помощью которого можно было бы отделить d_{112} от d_{121}. Этот элемент произвольности в толковании физического смысла d_{121} и d_{112} устраняется тем, что принимается $d_{112} = d_{121}$ и в общем случае

$$d_{ijk} = d_{ikj}. \tag{7.4}$$

Это допущение делается здесь без строгого обоснования; в § 3 мы увидим, что соотношение (7.4) согласуется с дальнейшими обобщениями.

Коэффициенты d_{ijk}, число которых равно 27, представляют собой пример *тензора третьего ранга.* Определение тензора третьего ранга получается путем обобщения определений тензоров первого и второго рангов, которые мы дали в гл. I, § 3. Тензоры были определены там путем задания законов их преобразования. Физическая величина, описываемая группой чисел p_i, была определена как тензор первого ранга (вектор), если p_i преобразуется согласно закону

$$p'_i = a_{ij}p_j. \tag{1.13}$$

Закон преобразования для тензора второго ранга $[T_{ij}]$ записывается в виде

$$T'_{ij} = a_{ik}a_{jl}T_{kl}. \tag{1.22}$$

Подобно этому, говорят, что 27 чисел T_{ijk}, описывающих некоторую физическую величину, образуют тензор третьего ранга, если они при изменении осей координат преобразуются в T'_{ijk} по следующему закону:

$$T'_{ijk} = a_{il}a_{jm}a_{kn}T_{lmn}. \tag{7.5}$$

Как и в случае тензоров более низкого ранга (см. гл. I, § 3), мы подчеркиваем, что это определение подразумевает наличие некоторого способа, независимого от закона (7.5), для нахождения преобразованных компонент тензора при изменении осей. Если бы это было не так, то определение замыкалось бы само на себя и мы получили бы логически порочный круг.

Законы преобразования тензоров первого и второго рангов соответственно одинаковы с законами преобразования координат x_l и произведений координат x_lx_j (см. стр. 28). Аналогично, уравнение (7.5) есть закон преобразования произведений трех сомножителей типа $x_ix_jx_k$. Это сразу становится очевидным, если применить ко всем сомножителям по отдельности закон преобразования, определяемый формулой (1.13), ибо тогда мы получаем

$$x'_ix'_jx'_k = a_{il}x_la_{jm}x_ma_{kn}x_n,$$

или после перестановки

$$x'_ix'_jx'_k = a_{il}a_{jm}a_{kn}(x_lx_mx_n). \tag{7.6}$$

Итак, любая заданная компонента тензора третьего ранга преобразуется аналогично соответствующему произведению координат. Например, T_{112} преобразуется подобно $x_1^2x_2$. Однако необходимо помнить, что, когда уравнение (7.6) записано в развернутой форме для конкретной компоненты, порядок сомножителей в различных членах в правой стороне уравнения должен сохраняться. Так, коэффициент при члене $x_1x_2x_3$ должен соответствовать коэффициенту при T_{123} и с коэффициентами при $x_2x_1x_3$, $x_2x_3x_1$ и т. д. его нельзя путать.

Докажем теперь, что коэффициенты d_{ijk} из уравнения (7.3) подчиняются закону преобразования (7.5). Предположим, что на кристалл действует некоторое фиксированное механическое напряжение, заданное компонентами σ_{ij} в системе координат Ox_i и компонентами σ'_{ij} в системе координат Ox'_i. Возникающая поляризация задается компонентами P_i в системе Ox_i и компонентами P'_i в системе Ox'_i. Общая форма уравнения (7.3) сохраняется независимо от выбора системы координат для описания поляризации и напряжений. Поэтому для компонент в системе координат Ox'_i мы можем записать

$$P'_i = d'_{ijk}\sigma'_{jk}, \tag{7.7}$$

где d'_{ijk} — иная совокупность 27 коэффициентов. Выясним теперь, как d'_{ijk} связаны с d_{ijk}.

Компоненты P_l связаны с P'_l уравнением

$$P'_i = a_{il}P_l, \tag{7.8}$$

а σ'_{ij} с σ_{ij} — уравнением

$$\sigma_{mn} = a_{jm}a_{kn}\sigma'_{jk}. \tag{7.9}$$

Уравнения (7.3), (7.8) и (7.9) образуют схему

$$P' \xrightarrow{(7.8)} P \xrightarrow{(7.3)} \sigma \xrightarrow{(7.9)} \sigma',$$

где стрелка заменяет слова „выражается через...". Поэтому P' можно выразить через σ' следующим образом:

$$P'_i = a_{il}P_l = a_{il}d_{lmn}\sigma_{mn} = a_{il}d_{lmn}a_{jm}a_{kn}\sigma'_{jk}. \tag{7.10}$$

Сравнивая (7.10) и (7.7), мы получаем

$$d'_{ijk} = a_{il}a_{jm}a_{kn}d_{lmn}. \tag{7.11}$$

Отсюда видно, что d_{ijk} преобразуются согласно уравнению (7.5) и, следовательно, образуют тензор третьего ранга.

Приведенное доказательство тензорного характера коэффициентов d_{ijk} справедливо и в общем случае. Тем же способом можно показать, что совокупность любых величин B_{ijk}, связывающая два тензора A_l и C_{jk} уравнением

$$A_l = B_{ijk}C_{jk}, \tag{7.12}$$

образует тензор третьего ранга.

§ 2. Уменьшение числа независимых модулей. Матричные обозначения

В общем случае тензор третьего ранга, как мы видели, имеет $3^3 = 27$ независимых компонент. Если выписать полностью все его компоненты, то они образуют не квадратную таблицу, как в случае тензора второго ранга, а таблицу в форме куба. Если первый индекс в d_{ijk} означает слой, к которому принадлежит данная компонента, второй индекс — строку, а третий — столбец, то все три слоя будут таковы:

1-й слой	2-й слой	3-й слой
$i = 1$	$i = 2$	$i = 3$
$d_{111}d_{112}d_{113}$	$d_{211}d_{212}d_{213}$	$d_{311}d_{312}d_{313}$
$(d_{121})d_{122}d_{123}$	$(d_{221})d_{222}d_{223}$	$(d_{321})d_{322}d_{323}$
$(d_{131})(d_{132})d_{133}$	$(d_{231})(d_{232})d_{233}$	$(d_{331})(d_{332})d_{333}$

(7.13)

Благодаря тому, что тензор d_{ijk} симметричен по j и k, из числа независимых компонент можно исключить коэффициенты, стоящие в скобках; таким образом, остается 18 независимых компонент.

Отсюда следует также возможность использования более коротких, так называемых *матричных обозначений*.

До сих пор мы давали все уравнения в тензорной записи, так как только такой способ записи позволяет обнаружить их действительный характер, в частности свойства преобразования. Однако при решении конкретных задач выгодно по возможности уменьшить число индексов. Это достигается путем введения новых символов d_{11}, d_{12} и т. д. Таблица (7.13) теперь принимает вид:

$$\begin{array}{ccc} d_{11} & \frac{1}{2}d_{16} & \frac{1}{2}d_{15} \\ & d_{12} & \frac{1}{2}d_{14} \\ & & d_{13} \end{array} \qquad \begin{array}{ccc} d_{21} & \frac{1}{2}d_{26} & \frac{1}{2}d_{25} \\ & d_{22} & \frac{1}{2}d_{24} \\ & & d_{23} \end{array} \qquad \begin{array}{ccc} d_{31} & \frac{1}{2}d_{36} & \frac{1}{2}d_{35} \\ & d_{32} & \frac{1}{2}d_{34} \\ & & d_{33}. \end{array} \tag{7.14}$$

Так, например, мы полагаем $d_{21} = d_{211}$, а $d_{14} = 2d_{123}$. Нетрудно видеть, что первые индексы при обоих способах записи одинаковы, а второй и третий индексы тензорного обозначения заменяются в новой записи одним индексом, пробегающим значения от 1 до 6; при этом имеется следующая связь между индексами:

тензорные обозначения:	11	22	33	23,32	31,13	12,21,
матричные обозначения:	1	2	3	4	5	6.

Два последних индекса в тензорной записи соответствуют индексам компонент напряжения [см. уравнение (7.3)]; поэтому для согласованности нужно сделать следующие изменения в обозначениях компонент напряжения:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{31} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix}. \tag{7.15}$$

(Символы σ_1, σ_2, σ_3 были использованы также для обозначения главных напряжений; однако всегда ясно, какое значение подразумевается.)

В новых обозначениях мы можем записать уравнение (7.2) в виде

$$P_1 = d_{11}\sigma_1 + \frac{1}{2}d_{16}\sigma_6 + \frac{1}{2}d_{15}\sigma_5 + \frac{1}{2}d_{16}\sigma_6 + d_{12}\sigma_2 + \frac{1}{2}d_{14}\sigma_4 + \\ + \frac{1}{2}d_{15}\sigma_5 + \frac{1}{2}d_{14}\sigma_4 + d_{13}\sigma_3,$$

или

$$P_1 = d_{11}\sigma_1 + d_{12}\sigma_2 + d_{13}\sigma_3 + d_{14}\sigma_4 + d_{15}\sigma_5 + d_{16}\sigma_6; \tag{7.16}$$

для P_2 и P_3 имеются два аналогичных уравнения. Используя индексы суммирования, мы можем записать

$$P_i = d_{ij}\sigma_j \quad (i = 1, 2, 3; \quad j = 1, 2, \ldots, 6). \tag{7.17}$$

Иногда возникает сомнение в целесообразности введения множителей $^1/_2$ в определения d_{ij}. Множители $^1/_2$ вводятся в таблицу (7.14) для того, чтобы избежать появления множителей 2 в последних трех членах уравнения (7.16) и ему подобных. Избежать появления численных множителей в обоих случаях невозможно. Мы предпочитаем иметь множители $^1/_2$ в таблице (7.14) для того, чтобы уравнение (7.16) и сопутствующие ему уравнения для P_2 и P_3 могли быть записаны в компактной форме (7.17)[1]).

Таблица d_{ij}, выписанная в виде

$$\begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{pmatrix}, \tag{7.18}$$

является матрицей. Легко видеть, что строки этой матрицы соответствуют слоям в таблице (7.13).

Матричные обозначения используются потому, что по сравнению с тензорными обладают преимуществом большей компактности и позволяют легко расположить коэффициенты в плоскую таблицу. Однако необходимо всегда помнить, что *d_{ij} не преобразуются подобно компонентам тензора второго ранга, несмотря на кажущееся (благодаря наличию двух индексов) сходство с ними.*

§ 3. Обратный пьезоэлектрический эффект

Когда к пьезоэлектрическому кристаллу приложено электрическое поле, форма кристалла слегка изменяется. Это явление называется *обратным пьезоэлектрическим эффектом*; его существование является термодинамическим следствием существования прямого эффекта. Найдено, что между компонентами вектора E_i, задающего напряженность электрического поля в кристалле, и компонентами тензора деформаций ε_{ij}, описывающего изменение формы кристалла, имеется линейное соотношение. Более того, *при обратном пьезоэлектрическом эффекте поле и деформацию связывают те же самые коэффициенты, которые связывают напряжение и поля-*

[1]) Такой способ введения d_{ij} согласуется с рекомендуемыми IRE (Institute of Radio Engineers, USA) правилами [86]. Он также согласуется с определением Фойгта [93]. В противоположность нам Фойгт считает напряжения сжатия положительными, однако он вводит знак минус в уравнении (7.17); в результате получается, что принятые Фойгтом коэффициенты d_{ij} идентичны нашим.

Вустер [96] использует иные обозначения: наши d_{ij} равны коэффициентам q_{ji} в книге Вустера для $j = 1, 2, 3$ и равны $2q_{ji}$ для $j = 4, 5, 6$. При этом мы предполагаем, что Вустер считает напряжения растяжения положительными; правда, в одном месте он определяет как положительное напряжение сжатия, но это, по-видимому, описка, так как везде в остальной части своей книги он считает положительным напряжение растяжения.

ризацию при прямом эффекте. Аналитически это означает, что если при прямом эффекте выполняется уравнение

$$P_i = d_{ijk}\sigma_{jk}, \tag{7.3}$$

то при обратном эффекте справедливо уравнение

$$\varepsilon_{jk} = d_{ijk}E_i. \tag{7.19}$$

Доказательство этого равенства коэффициентов дается в гл. X; оно основано на термодинамическом рассмотрении. Так как $\varepsilon_{jk} = \varepsilon_{kj}$, то, следовательно, тензор d_{ijk} симметричен по j и k, как было без доказательства указано в § 1.

Чтобы записать уравнение (7.19) в матричных обозначениях, мы должны ввести один индекс вместо двух для компонент деформаций. Для этого сделаем следующую замену:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \frac{1}{2}\varepsilon_5 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \varepsilon_2 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_5 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{bmatrix}. \tag{7.20}$$

Тогда уравнение для ε_{11}, получающееся развертыванием уравнения (7.19),

$$\varepsilon_{11} = d_{111}E_1 + d_{211}E_2 + d_{311}E_3,$$

при переходе к матричным обозначениям принимает вид

$$\varepsilon_1 = d_{11}E_1 + d_{21}E_2 + d_{31}E_3.$$

Уравнение для ε_{23}

$$\varepsilon_{23} = d_{123}E_1 + d_{223}E_2 + d_{323}E_3$$

принимает вид

$$\frac{1}{2}\varepsilon_4 = \frac{1}{2}d_{14}E_1 + \frac{1}{2}d_{24}E_2 + \frac{1}{2}d_{34}E_3.$$

Множители $^1/_2$ сокращаются с обеих сторон, и в общем случае мы имеем

$$\varepsilon_j = d_{ij}E_i \quad (i = 1, 2, 3;\ j = 1, 2, \ldots, 6). \tag{7.21}$$

Теперь становится ясной причина введения множителей $^1/_2$ в подстановку (7.20). Так как мы использовали множители $^1/_2$ в определениях d_{ij} (см. стр. 141), необходимо ввести эти множители также и в определения ε_i; иначе в уравнении (7.21) перед некоторыми членами стояли бы множители $^1/_2$ и мы не смогли бы записать его в краткой форме, т. е. как сумму подобных членов. Следует отметить, что, по счастливой случайности, благодаря множителям $^1/_2$ в определениях ε_i компоненты ε_4, ε_5 и ε_6 совпадают с компонентами „технических“ сдвиговых деформаций, введенных на стр. 127.

Приведем теперь схему, объединяющую пьезоэлектрические уравнения в матричных обозначениях. Читая таблицу по горизонтали, мы получаем уравнения прямого эффекта, читая по вертикали — уравнения обратного эффекта:

		ε_1	ε_2	ε_3	ε_4	ε_5	ε_6
		σ_1	σ_2	σ_3	σ_4	σ_5	σ_6
E_1	P_1	d_{11}	d_{12}	d_{13}	d_{14}	d_{15}	d_{16}
E_2	P_2	d_{21}	d_{22}	d_{23}	d_{24}	d_{25}	d_{26}
E_3	P_3	d_{31}	d_{32}	d_{33}	d_{34}	d_{35}	d_{36}.

В табл. 7 сравниваются уравнения прямого и обратного пьезоэлектрических эффектов в тензорной и матричной записях.

ТАБЛИЦА 7

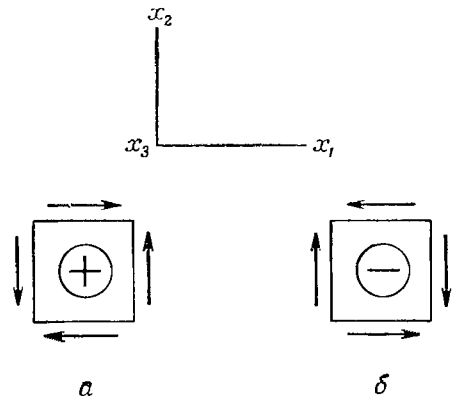
Определяющие уравнения для прямого и обратного пьезоэлектрических эффектов

	Тензорная запись $i, j, k=1, 2, 3$	Матричная запись $i=1, 2, 3$; $j=1, 2, \ldots, 6$
Прямой эффект	$P_i = d_{ijk}\sigma_{jk}$	$P_i = d_{ij}\sigma_j$
Обратный эффект . . .	$\varepsilon_{jk} = d_{ijk}E_i$	$\varepsilon_j = d_{ij}E_i$

§ 4. Уменьшение числа независимых модулей из-за ограничений, налагаемых симметрией кристалла

1. Соображения, в основе которых лежит лишь анализ симметрии. Если кристалл обладает симметрией (помимо оси первого порядка), то имеет место дальнейшее уменьшение числа независимых пьезоэлектрических модулей. Как крайний случай рассмотрим влияние центра симметрии. Предположим, что кристалл, обладающий центром симметрии, подвергнут воздействию механического напряжения произвольного вида и поляризуется. Теперь представим себе, что вся система — кристалл плюс напряжение — симметрично отражена относительно центра симметрии. Напряжение, будучи центросимметричным, при этом не изменится; по той же причине не изменится и кристалл; поляризация же изменит направление на противоположное. Итак, мы получаем, что тот же самый кристалл под действием точно такого же напряжения имеет противоположную поляризацию. Такая ситуация возможна лишь тогда, когда поляризация равна нулю. Следовательно, *кристалл, обладающий центром симметрии, не может быть пьезоэлектриком.*

Точно так же, исходя лишь из соображений симметрии и не прибегая к аналитическим расчетам, можно доказать равенство друг другу или обращение в нуль пьезоэлектрических модулей для различных кристаллографических классов. В качестве примера рассмотрим модуль d_{36} для класса 4. Этот модуль определяет компоненту P_3 при сдвиговом напряжении, действующем в плоскости, перпендикулярной оси Ox_3 (направления осей показаны на фиг. 48; ось Ox_3 перпендикулярна плоскости чертежа). Теперь предположим, что указанное сдвиговое напряжение индуцирует диполь, параллельный Ox_3, с положительным концом сверху (фиг. 48, *а*). Изменение знака напряжения должно привести к изменению знака диполя, как изображено на фиг. 48, *б*. Но так как кристалл имеет ось четвертого порядка, то напряженное состояние, показанное на фиг. 48, *б*, точно совпадает с состоянием, изображенным на фиг. 48, *а*; единственное отличие состоит в том, что кристалл повернут на 90°. Следовательно, в обоих случаях поляризация должна быть одинаковой, а это возможно лишь тогда, когда она равна нулю. Таким образом, $d_{36} = 0$.



Фиг. 48. Построение, показывающее, что для класса 4 модуль d_{36} равен нулю.

2. Аналитические методы. Соображения, основанные только на рассмотрении симметрии и подобные тем, которые были использованы выше, дают изящный способ нахождения некоторых соотношений между модулями; однако трудно быть уверенными, что при этом мы найдем все соотношения. Поэтому опишем теперь более систематический метод исследования рассматриваемого вопроса. В принципе метод состоит в преобразовании осей координат тензора одним из элементов симметрии, которыми обладает кристалл. При этом коэффициенты, описывающие эффект, не должны меняться при преобразовании.

а) Центр симметрии. Для иллюстрации метода опять рассмотрим сначала кристалл, обладающий центром симметрии. Матрица этого преобразования имеет вид

$$a_{ij} = -\delta_{ij}.$$

В соответствии с уравнением (7.11) и свойством функции δ_{ij} преобразованные пьезоэлектрические модули будут выражаться следующим образом:

$$d'_{ijk} = a_{il}a_{jm}a_{kn}d_{lmn} = -\delta_{il}\delta_{jm}\delta_{kn}d_{lmn} = -d_{ijk}.$$

Но так как кристалл имеет центр симметрии, то

$$d'_{ijk} = d_{ijk}.$$

Следовательно,

$$d_{ijk} = 0.$$

Действия с другими операциями симметрии не так просты. Значительную помощь может оказать использование несколько отличных обозначений для преобразований координат и применение так называемого *метода прямой проверки*, разработанного Фуми [39, 41—43]. Этот метод лучше всего объяснить, взяв тот же пример с центром симметрии и найдя результаты действия центра на различные модули.

Действие центра симметрии на оси координат изображаются следующим образом:

$$x_1 \to -x_1, \quad x_2 \to -x_2, \quad x_3 \to -x_3, \tag{7.22}$$

где стрелка означает „преобразуется в ...". Вместе с тем, соотношение (7.22) можно интерпретировать иначе, а именно считать, что координаты произвольной точки (x_1, x_2, x_3) преобразуются в ($-x_1$, $-x_2$, $-x_3$). Мы уже видели (см. стр. 139), что компоненты тензора преобразуются аналогично соответствующим произведениям координат. Например, d_{122} преобразуется подобно произведению $x_1x_2^2$. Делая подстановку, определяемую соотношением (7.22), получаем, что $x_1x_2^2$ преобразуются следующим образом:

$$x_1x_2^2 \to -x_1x_2^2.$$

Следовательно,

$$d_{122} \to -d_{122}.$$

Но так как кристалл обладает центром симметрии, это преобразование не изменяет компоненты тензора: компонента d_{122} должна преобразоваться в себя, т. е.

$$d_{122} \to d_{122},$$

а поэтому

$$d_{122} = 0.$$

Легко видеть, что то же самое рассуждение применимо ко всем другим компонентам тензора, и мы получаем прежний общий результат: $d_{ijk} = 0$.

б) Ось второго порядка. Для дальнейшей иллюстрации метода прямой проверки рассмотрим теперь влияние на модули оси второго порядка. Предположим, что ось второго порядка параллельна x_3. Тогда преобразование можно записать следующим образом:

$$x_1 \to -x_1, \quad x_2 \to -x_2, \quad x_3 \to x_3,$$

или более компактно

$$1 \to -1, \quad 2 \to -2, \quad 3 \to 3. \tag{7.23}$$

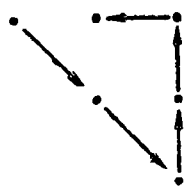
Будем теперь брать модули поочередно и преобразовывать их согласно соотношению (7.23). Если знак модуля при этом изменится, то модуль должен быть равен нулю; если же знак остается неизменным, то этот модуль не исчезает. Так, например, $d_{133} \to -d_{133}$ и поэтому $d_{133} = 0$, а $d_{123} \to d_{123}$ и поэтому $d_{123} \neq 0$. Ясно, что сохраняются только те модули d_{ijk}, которые имеют в индексах либо одну, либо три цифры 3. Поэтому в следующей таблице отличны от нуля только модули, выделенные жирным шрифтом:

$$\begin{array}{ccc|ccc|ccc} d_{111} & d_{112} & \boldsymbol{d_{113}} & d_{211} & d_{212} & \boldsymbol{d_{213}} & \boldsymbol{d_{311}} & \boldsymbol{d_{312}} & d_{313} \\ & d_{122} & \boldsymbol{d_{123}} & & d_{222} & \boldsymbol{d_{223}} & & \boldsymbol{d_{322}} & d_{323} \\ & & \boldsymbol{d_{133}} & & & d_{233} & & & \boldsymbol{d_{333}}. \end{array} \tag{7.24}$$

В матричном (двухиндексном) обозначении соответствующие модули запишутся так:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{24} & d_{25} & 0 \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & 0 & 0 & d_{36} \end{pmatrix}. \tag{7.25}$$

Соответствие между таблицами (7.24) и (7.25) проще всего установить, читая каждый *слой* таблицы (7.24) в таком порядке:



и затем записывая его как *строку* матричной таблицы (7.25).

в) Пример кристаллографического класса. Описанный метод теперь можно применить к какому-либо кристаллографическому классу; в качестве примера выберем $\bar{4}2m$, класс дигидрофосфата аммония.

Элементы симметрии этого класса показаны на фиг. 49, *а*. Симметрия полностью определяется осью $\bar{4}$ [1]) и осью второго порядка, параллельной x_1. Ось $\bar{4}$, параллельная оси x_3, включает в себя ось второго порядка, также параллельную x_3, а мы уже нашли, что лишь модули, выделенные жирным шрифтом в таблице (7.24), сохраняются при действии оси второго порядка, параллельной x_3.

[1]) Операция поворота на 90°, сопровождаемая инверсией.

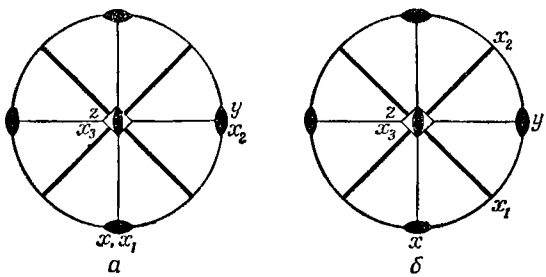
Следовательно, только эти модули необходимо рассматривать дальше. Ось $\bar{4}$ преобразует оси координат следующим образом:

$$1 \to -2, \quad 2 \to 1, \quad 3 \to -3.$$

Поэтому

$$\begin{array}{llll} d_{113} \to -d_{223} & d_{213} \to d_{123} & d_{311} \to -d_{322} & d_{312} \to d_{321} \\ d_{123} \to d_{213} & d_{223} \to -d_{113} & & d_{322} \to -d_{311} \\ & & & d_{333} \to -d_{333} \end{array} \quad (7.26)$$

Таким образом, например, d_{113} преобразуется в $-d_{223}$. Но мы знаем, что, так как кристалл обладает осью $\bar{4}$, то модуль d_{113} должен преобразовываться сам в себя. Следовательно, $d_{113} = -d_{223}$.



Фиг. 49. Точечные элементы симметрии класса $\bar{4}2m$ и ориентация осей координат.

а — обычный выбор ориентации осей координат Ox_1, Ox_2, Ox_3; *б* — система координат, полученная из первой поворотом на 45° вокруг оси Ox_3.

Аналогично, все стрелки в (7.26) можно читать как знаки равенства.

Теперь рассмотрим ось второго порядка, параллельную x_1. Мы видели выше, что при наличии оси второго порядка, параллельной x_3, обращаются в нуль все модули, не имеющие в индексах цифру 3 или имеющие две цифры 3. Точно так же при наличии оси второго порядка, параллельной x_1, обращаются в нуль все модули, не имеющие в индексах цифры 1 или имеющие две цифры 1. Итак, остаются только следующие модули:

$$d_{123} = d_{213}, \quad d_{312} (= d_{321}).$$

В обозначениях с двумя индексами они запишутся так:

$$d_{14} = d_{25}, \quad d_{36}.$$

Поэтому матрица имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{36} \end{pmatrix}.$$

Численный пример. Элементы матрицы (d_{ij}) для дигидрофосфата аммония при 0 °C в рационализированной системе MKS (*кулон/ньютон*) имеют следующие значения [64, 91]:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0{,}17 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0{,}17 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5{,}17 \end{pmatrix} \times 10^{-11}\ к/н.$$

Отметим, что такое распределение модулей в матрице справедливо только при определенном положении кристалла относительно осей координат x_1, x_2, x_3, показанном на фиг. 49, *а*. Если оси координат повернуть на 45° вокруг x_3 так, чтобы ось x_1 была перпендикулярна плоскости симметрии (фиг. 49, *б*), то матрица принимает новую форму

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0{,}17 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0{,}17 & 0 & 0 \\ 2{,}6 & -2{,}6 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times 10^{-11}\ к/н.$$

г) Тригональная и гексагональная системы. Использованный выше метод прямой проверки является самым удобным способом определения условий, налагаемых на модули, во всех классах, за исключением классов, принадлежащих к тригональной и гексагональной системам. Это объясняется тем, что во всех классах, кроме тригональных и гексагональных, элементы симметрии просто изменяют *порядок* осей, т. е. каждая ось преобразуется или в себя, или в одну из других осей (возможно, с изменением направления) и не попадает ни в какое промежуточное положение. В классе же 6, например, невозможно выбрать декартовы оси координат с такими свойствами: x_1 будет преобразовываться в линейную *комбинацию* x_1, x_2, x_3. В классах 3 и $3m$ можно, правда, выбрать декартовы оси координат с такими свойствами, но эти оси не будут совпадать с общепринятыми. Поэтому для тригональной и гексагональной систем следует воспользоваться более общим аналитическим методом. Мы изложим его в общих чертах. Принцип остается точно таким же, как и прежде: действием элемента симметрии кристалла преобразуются оси координат и старые значения модулей приравниваются к новым.

Рассмотрим действие осей шестого и третьего порядков, параллельных оси x_3. Матрицы преобразования для поворотов вокруг Ox_3

на 60 и 120° имеют соответственно вид

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad (a_{ij}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} & 0 \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Применяя эти преобразования к d_{ijk}, получаем системы совместных уравнений. Так, например, находим, что d'_{111} есть функция шести d_{ijk}, а именно: d_{111}, d_{112}, d_{122}, d_{211}, d_{212}, d_{222}. Полагая $d'_{111} = d_{111}$, получаем уравнение, связывающее эти шесть d_{ijk}. Поступая аналогично с d'_{112}, d'_{122}, d'_{211}, d'_{212} и d'_{222}, находим еще пять уравнений для тех же самых шести d_{ijk}. Решая эти уравнения, получаем для оси третьего порядка соотношения

$$d_{111} = -d_{122} = -d_{212}; \quad d_{222} = -d_{112} = -d_{211},$$

а для оси шестого порядка — соотношения

$$d_{111} = d_{112} = -d_{122} = d_{211} = d_{212} = d_{222} = 0. \tag{7.27}$$

Условия, накладываемые на другие модули, получаются непосредственно; для осей третьего и шестого порядков они имеют вид

$$d_{113} = d_{223}, \quad d_{123} = -d_{213}, \quad d_{311} = d_{322},$$
$$d_{133} = d_{233} = d_{312} = d_{313} = d_{323} = 0.$$

Таким образом, мы нашли условия, налагаемые на модули для классов 6 и 3. Другие нецентросимметричные гексагональные и тригональные классы получаются добавлением к этим двум классам плоскостей симметрии и осей второго порядка. Дальнейшие ограничения, которые накладывают на модули эти плоскости и оси второго порядка, легко можно найти методом прямой проверки.

д) Применение теории групп. Полное число независимых компонент тензора, необходимое для определения конкретного тензорного свойства любого кристаллографического класса, можно найти также с помощью теории групп (см. книги Уигмана [52], а также Багавантама и Венкатарайуду [15] и статью Яна [57]) [1]). Таким путем можно проверить результаты, полученные другими методами. Теория групп, приложения которой развиваются в упомянутых книгах, не определяет, какие из модулей независимы, а дает только *полное число* независимых модулей. *Определение* независимых компонент для каждого класса с помощью методов теории групп было выполнено Фуми [44], а также Фиеши и Фуми [39]; в указанных статьях приво-

[1]) См. также [107, 111]. — *Прим. перев.*

дятся ссылки на другие работы (см. также [56]). Теорию групп удобно использовать тогда, когда нужно исследовать сразу несколько родственных классов.

§ 5. Результаты для всех кристаллографических классов

В табл. 8 приводятся результаты, полученные при применении методов, рассмотренных в § 4, п. 2, ко всем кристаллографическим классам поочередно. Каждая из таблиц, стоящих в скобках, представляет собой (d_{ij})-матрицу, выписанную в форме (7.18). В начале табл. 8 приведены обозначения. Маленькие точки означают модули, равные нулю. Жирные точки означают модули, отличные от нуля. Линия, соединяющая две жирные точки, означает, что соответствующие два модуля равны друг другу. Когда жирная точка соединена линией со светлым кружком, то это означает, что соответствующие два модуля численно равны, но противоположны по знаку. Так, в классе 4 модули $d_{31} = d_{32}$, $d_{15} = d_{24}$ и $d_{14} = -d_{25}$. Двойной кружок всегда соединяется с жирной точкой. Если x — численное значение модуля, обозначенного жирной точкой, то значение модуля, обозначенного двойным кружком, будет равно $-2x$. Так, в классе 3 выполняются равенства $d_{16} = -2d_{22}$ и $d_{26} = -2d_{11}$ (в последнем случае соединительная линия проходит через светлый кружок). Число независимых модулей для каждого класса указано в скобках справа возле матрицы. Расположение осей координат относительно элементов симметрии соответствует, за исключением особо оговоренных случаев, правилам, рекомендованным IRE [86]. Эти правила суммированы в приложении 2.

Физический смысл матриц табл. 8 легче всего уяснить, определяя поляризацию, вызываемую в выбранном кристаллографическом классе действием различных простых напряжений. Читателю рекомендуется проделать это самостоятельно. Для более детального рассмотрения мы изберем пьезоэлектрические свойства кварца, имеющего большое практическое значение.

Кварц. При комнатной температуре кварц принадлежит к классу 32. Его (d_{ij})-матрица имеет вид

$$\begin{array}{c} \\ P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 & \sigma_4 & \sigma_5 & \sigma_6 \end{array} \\ \begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array};$$

здесь P_i и σ_j помещены для ясности.

Если напряжение растяжения σ_1 приложено параллельно оси x_1, являющейся осью второго порядка в кристалле (фиг. 50), то уравнение (7.17) показывает, что компоненты возникающей поляризации

ТАБЛИЦА 8

Форма матрицы (d_{ij})

Обозначения

• компонента, равная нулю,
● компонента, отличная от нуля,

●—● равные компоненты,

●—○ компоненты, равные по величине, но противоположные по знаку,

◎ компонента, равная взятой с обратным знаком удвоенной компоненте, обозначенной жирной точкой, с которой данный символ соединен линией.

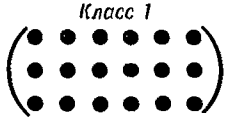
Центросимметричные классы

Все модули равны нулю

Нецентросимметричные классы

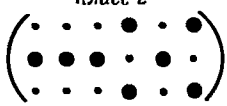
Триклинная система

Класс 1

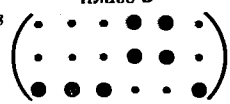

(18)

Моноклинная система

Класс 2 ($2 \| x_2$ *(обычная ориентация)*)


(8)

Класс 2 ($2 \| x_3$)


(8)

Класс m ($m \perp x_2$ *(обычная ориентация)*)

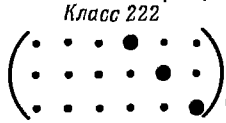
(10)

Класс m ($m \perp x_3$)

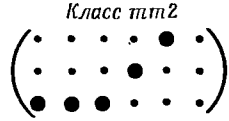
(10)

Орторомбическая система

Класс 222

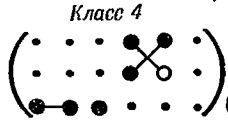

(3)

Класс mm2

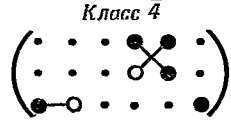

(5)

Тетрагональная система

Класс 4


(4)

Класс $\bar{4}$

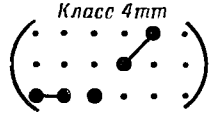

(4)

Тетрагональная система (*продолжение*)

Класс 422

(1)

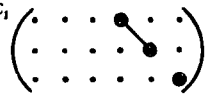
Класс 4mm



(3)

$2 \| x_1$

Класс $\bar{4}2m$



(2)

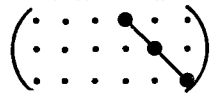
Кубическая система

Класс 432

(0)

Все модули равны нулю

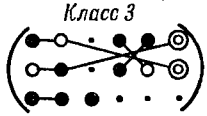
Классы $\bar{4}3m$ и 23



(1)

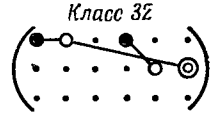
Тригональная система

Класс 3



(6)

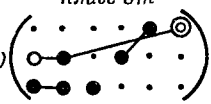
Класс 32



(2)

$m \perp x_1$ (*обычная ориентация*)

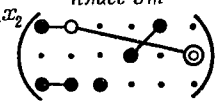
Класс 3m



(4)

$m \perp x_2$

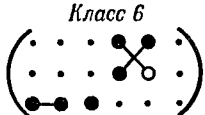
Класс 3m



(4)

Гексагональная система

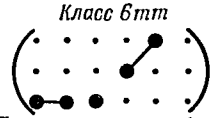
Класс 6



(4)

Так же, как класс 4

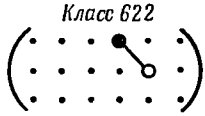
Класс 6mm



(3)

Так же, как класс 4mm

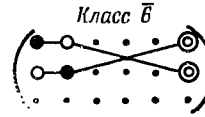
Класс 622



(1)

Так же, как класс 422

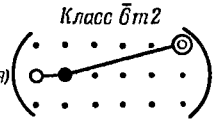
Класс $\bar{6}$



(2)

$m \perp x_1$ (*обычная ориентация*)

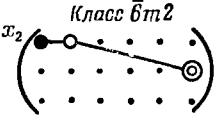
Класс $\bar{6}m2$



(1)

$m \perp x_2$

Класс $\bar{6}m2$



(1)

задаются модулями, стоящими в первом столбце (d_{ij})-матрицы, поэтому

$$P_1 = d_{11}\sigma_1, \quad P_2 = 0, \quad P_3 = 0.$$

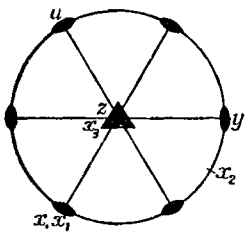
Следовательно, поляризация направлена вдоль оси x_1 [1]).

Напряжение растяжения σ_2 вдоль оси x_2 не вызывает поляризации, параллельной этой оси, а вызывает поляризацию вдоль x_1:

$$P_1 = -d_{11}\sigma_2, \quad P_2 = 0, \quad P_3 = 0$$

(второй столбец матрицы).

Таким образом, поляризация вдоль оси второго порядка x_1 может быть вызвана или напряжением растяжения вдоль x_1, или равным ему напряжением сжатия вдоль оси x_2. У кварца ось второго порядка называется *электрической осью*.



Фиг. 50. Точечные элементы симметрии a-кварца (класс 32) и выбор ориентации осей координат Ox_1, Ox_2, Ox_3.

Взглянув на верхнюю строку матрицы модулей, мы видим, что поляризация вдоль оси x_1 может быть также вызвана сдвигом σ_4 вокруг оси x_1; для этого напряжения

$$P_1 = d_{14}\sigma_4, \quad P_2 = 0, \quad P_3 = 0.$$

Поляризация вдоль x_2 (вторая строка матрицы), очевидно, может быть вызвана двумя путями: во-первых, сдвигом σ_5 в плоскости, перпендикулярной Ox_2, дающим

$$P_1 = 0, \quad P_2 = -d_{14}\sigma_5, \quad P_3 = 0,$$

и, во-вторых, сдвигом σ_6 в плоскости, перпендикулярной x_3, дающим

$$P_1 = 0, \quad P_2 = -2d_{11}\sigma_6, \quad P_3 = 0.$$

В нижней строке матрицы все модули равны нулю; отсюда следует, что никакое напряжение не может вызвать поляризацию вдоль оси третьего порядка x_3.

Ниже приведены экспериментальные значения d_{ij} для правого кварца (рассчитанные по данным Кэди [24]):

$$\begin{pmatrix} -2{,}3 & 2{,}3 & 0 & -0{,}67 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0{,}67 & 4{,}6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times 10^{-12} \text{ к/н}.$$

---

[1]) Положительное направление x_1 обычно определяется по следующему правилу [86]: в правом кварце на грани, перпендикулярной положительному концу оси x_1, появляется отрицательный заряд при растяжении (и, следовательно, положительный заряд при сжатии); в левом кварце на грани перпендикулярной положительному концу оси x_1, появляется положительный заряд при растяжении. При таком условии, очевидно, модуль d_{11} отрицателен для правого кварца и положителен для левого.

Проиллюстрируем величину прямого эффекта следующим численным примером. Предположим, что напряжение сжатия 1 $кГ/см^2$ ($= 9{,}81 \cdot 10^4$ $н/м^2$) действует вдоль оси второго порядка кристалла правого кварца. Возникающая поляризация будет равна

$$P_1 = d_{11}\sigma_1 = (-2{,}3 \cdot 10^{-12}) \times (-9{,}81 \cdot 10^4) = 2{,}3 \cdot 10^{-7}\ к/м^2.$$

Рассчитаем теперь обратный эффект. Предположим, что электрическое поле напряженностью 100 $в/см$ ($= 10^4$ $в/м$) действует вдоль оси второго порядка x_1. Деформация вдоль этой оси будет представлять собой сжатие, которое, согласно уравнению (7.21), можно записать в виде

$$\varepsilon_1 = d_{11}E_1 = -2{,}3 \cdot 10^{-12} \cdot 10^4 = -2{,}3 \cdot 10^{-8}.$$

Действующее поле, очевидно, вызывает также равное растяжение вдоль x_2 и сдвиг в плоскости, перпендикулярной x_1 (см. первую строку матрицы), так что мы имеем

$$\varepsilon_2 = d_{12}E_1 = -d_{11}E_1 = 2{,}3 \cdot 10^{-8}$$

и

$$\varepsilon_4 = d_{14}E_1 = -0{,}67 \cdot 10^{-8}.$$

§ 6. Характеристические поверхности

Как мы уже видели в гл. I, § 4, симметричный тензор второго ранга можно представить поверхностью второго порядка (эллипсоидом или гиперболоидом). Тензоры третьего ранга также можно представить характеристическими поверхностями, однако они не так просты, как характеристические поверхности для тензоров второго ранга; более того, представить тензор третьего ранга единственной поверхностью невозможно.

Рассмотрим, как определяется поверхность, полезная практически. Предположим, что на поверхность пластинки, вырезанной из кристалла перпендикулярно произвольному направлению, обозначенному Ox_1' (фиг. 51а), действует нормальное напряжение растяжения σ_{11}'. Возникающая поляризация будет обладать компонентами во всех трех направлениях Ox_1', Ox_2', Ox_3'. Компонента поляризации в направлении Ox_i' будет задаваться выражением

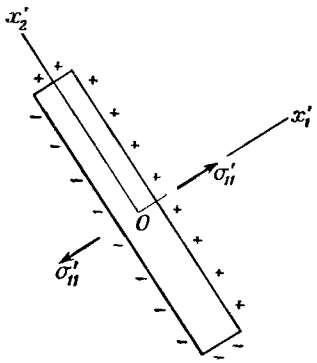
$$P_i' = d_{i11}'\sigma_{11}'$$

и, в частности,

$$P_1' = d_{111}'\sigma_{11}'.$$

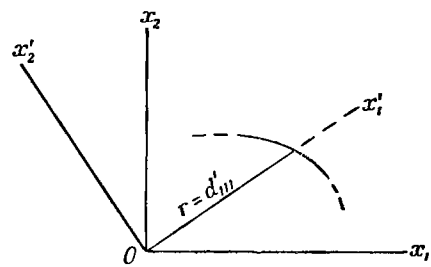
Следовательно, d_{111}' измеряет „продольный“ пьезоэлектрический эффект; эта величина дает отношение заряда на единицу площади, возникающего на поверхности пластинки, к приложенной к поверхности пластинки нормальной силе на единицу площади. Рассмотрение

условий симметрии показывает, что продольный эффект может возникать только вдоль направлений, являющихся полярными в том смысле, как это определено на стр. 100. Поверхность, радиус-вектор которой в направлении Ox_1' равен d_{111}', называется *поверхностью продольного пьезоэлектрического эффекта* (фиг. 51б). (Эта поверхность представляет также деформацию растяжения, возникающую в направлении приложенного поля, ибо при обратном эффекте $\varepsilon_{11}' = d_{111}' E_1'$.) Очевидно, можно ввести много других поверх-



Фиг. 51а. Схема, поясняющая продольный пьезоэлектрический эффект.

Величина заряда на грани, перпендикулярной Ox_1', определяется коэффициентом d_{111}', на грани, перпендикулярной Ox_2' — коэффициентом d_{211}'.



Фиг. 51б. Схема, поясняющая определение характеристической поверхности для продольного пьезоэлектрического эффекта.

ностей для представления конкретных компонент поляризации, возникающих под действием определенно направленных напряжений (или конкретных компонент деформации, возникающих под действием определенно направленных полей).

Форма поверхности продольного пьезоэлектрического эффекта для кварца. Чтобы найти форму поверхности продольного пьезоэлектрического эффекта для кварца, мы поступим следующим образом. Радиус-вектор этой поверхности в произвольном направлении Ox_1' выражается в виде

$$r = d_{111}' = a_{1i} a_{1j} a_{1k} d_{ijk},$$

где, как прежде, Ox_i — оси координат, согласованные с симметрией кристалла, для которых применимы таблицы модулей, данные в § 5. В классе 32 отличны от нуля только модули d_{111}, d_{122}, d_{123}, d_{212} и d_{213}; так что мы имеем

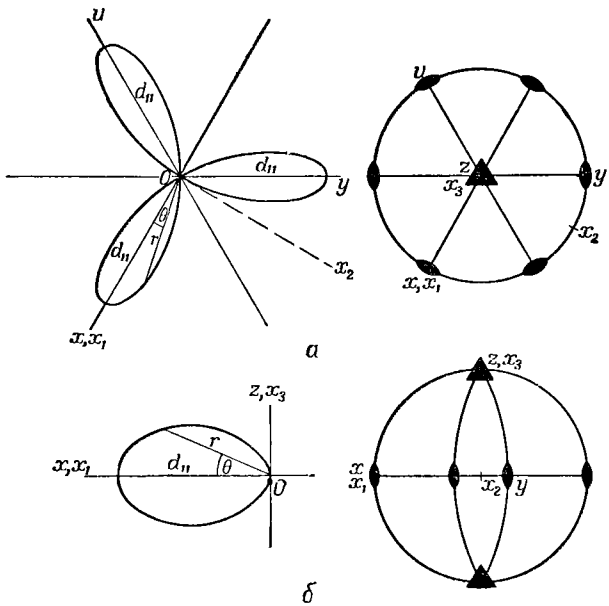
$$r = a_{11}a_{11}a_{11}d_{111} + a_{11}a_{12}a_{12}d_{122} + 2a_{11}a_{12}a_{13}d_{123} + \\ + 2a_{12}a_{11}a_{12}d_{212} + 2a_{12}a_{11}a_{13}d_{213}.$$

Для краткости заменим (a_{11}, a_{12}, a_{13}), являющиеся направляющими

косинусами Ox_1' относительно Ox_1, Ox_2, Ox_3, через (l, m, n) и, кроме того, используем соотношения между модулями, приведенные в § 5. Тогда получим следующее уравнение поверхности:

$$r = l(l^2 - 3m^2)\, d_{11}. \tag{7.28}$$

Заметим, что это уравнение содержит только один из двух независимых модулей.



Фиг. 52. Характеристическая поверхность продольного пьезоэлектрического эффекта для кварца.

а — центральное сечение, перпендикулярное оси Ox_3, являющейся осью третьего порядка; *б* — сечение, содержащее Ox_3 и Ox_1 — одну из осей второго порядка. На схеме приведены также стереограммы элементов симметрии в обеих проекциях.

Чтобы найти в полярных координатах сечение этой поверхности плоскостью, содержащей Ox_1 и Ox_2, положим $l = \cos\theta$, $m = \sin\theta$, где θ — угол между радиусом-вектором и Ox_1. Тогда

$$r = d_{11}\cos\theta\,(\cos^2\theta - 3\sin^2\theta) = d_{11}\cos 3\theta.$$

Это сечение построено на фиг. 52, *а* для положительного значения d_{11}. Как мы уже упоминали (см. примечание на стр. 154), такое значение d_{11} соответствует левому кварцу. Таким образом, в подобном кристалле напряжение растяжения вдоль Ox_1 вызывает положительный заряд на грани, перпендикулярной положительному направлению оси Ox_1. Когда направление приложенного растягивающего напряжения

поворачивается против часовой стрелки (фиг. 52, *а*), продольная компонента поляризации уменьшается и достигает нуля при $\theta = 30°$. Затем она изменяет знак и при $\theta = 60°$, когда напряжение растяжения вновь направлено вдоль оси второго порядка, достигает максимума в $+u$ направлении. Рассмотренную фигуру также легко интерпретировать и с точки зрения обратного эффекта.

Сечение поверхности продольного пьезоэффекта плоскостью, содержащей Ox_1 и Ox_3, получается, если положить $m = 0$ и $l = \cos\theta$, где θ — снова угол между радиусом-вектором и Ox_1. Тогда мы имеем

$$r = d_{11}\cos^3\theta;$$

соответствующее сечение показано на фиг. 52, *б*. Форма характеристической поверхности подобна трем миндалинам, острые концы которых встречаются в точке, лежащей на тригональной оси. Из формы поверхности непосредственно видно, что, например, при сжатии кристалла кварца вдоль оси третьего порядка продольный пьезоэлектрический эффект отсутствует. Это ясно также и из симметрии. Продольный эффект, как легко видеть, имеет наибольшее значение, когда кристалл сжимается вдоль оси второго порядка (электрической оси).

Поверхности продольного пьезоэлектрического эффекта для других кристаллов [1]). Форму поверхности продольного пьезоэлектрического эффекта для кристаллов других классов можно найти аналогичным путем. Симметрия этой поверхности должна согласовываться с точечной группой симметрии кристалла. Например, поверхность для кристалла цинковой обманки, принадлежащего к классу $\bar{4}3m$, имеет четыре полости, вытянутые в направлении четырех осей третьего порядка. Из симметрии кристалла и матрицы, приведенной в табл. 8, можно видеть, что в кристаллах этого класса давление вдоль оси второго порядка не может вызвать продольного эффекта (можно отметить, однако, что при сдвиге вокруг оси второго порядка возникает пьезоэлектрический эффект).

РЕЗЮМЕ

Определение тензора третьего ранга. Совокупность 27 чисел T_{ijk}, описывающих некоторую физическую величину, образует тензор третьего ранга, если они преобразуются согласно уравнению

$$T'_{ijk} = a_{il}a_{jm}a_{kn}T_{lmn}.$$

Это уравнение совпадает с уравнением преобразования произведений координат $x_i x_j x_k$.

[1]) Дальнейшие подробности см. в книгах Фойгта [92] и Вустера [96].

Прямой пьезоэлектрический эффект. Прямой пьезоэлектрический эффект задается уравнением

$$P_i = d_{ijk}\sigma_{jk}, \tag{7.3}$$

где d_{ijk} — пьезоэлектрические модули, образующие тензор третьего ранга.

Если пренебречь объемными моментами, то $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, и мы можем положить $d_{ijk} = d_{ikj}$. Благодаря этому число независимых модулей уменьшается до 18.

Матричная запись. Второй и третий индексы у d_{ijk} и оба индекса у σ_{jk} можно объединить в один индекс, пробегающий значения от 1 до 6, по следующему правилу:

тензорные обозначения:	11	22	33	23,32	31,13	12,21,
матричные обозначения:	1	2	3	4	5	6.

Мы вводим также множители 2 в следующих случаях:

$$d_{ijk} = d_{in}, \quad \text{когда} \quad n = 1, 2, 3,$$

и

$$2d_{ijk} = d_{in}, \quad \text{когда} \quad n = 4, 5, 6.$$

Теперь уравнение (7.3) можно записать в виде

$$P_i = d_{ij}\sigma_j \quad (i = 1, 2, 3; \quad j = 1, 2, \ldots, 6). \tag{7.17}$$

Коэффициенты d_{ij} образуют (d_{ij})-матрицу из трех строк и шести столбцов.

Обратный пьезоэлектрический эффект. Обратный эффект задается уравнением

$$\varepsilon_{jk} = d_{ijk}E_i \tag{7.19}$$

с теми же самыми коэффициентами d_{ijk}, что и в уравнении прямого эффекта. Два индекса у ε_{jk} можно объединить в один согласно вышеприведенной схеме, причем $\varepsilon_{jk} = \varepsilon_n$ при $n = 1, 2, 3$ и $2\varepsilon_{jk} = \varepsilon_n$ при $n = 4, 5, 6$. При таком сокращении уравнение (7.19) записывается в виде

$$\varepsilon_j = d_{ij}E_i \quad (i = 1, 2, 3; \quad j = 1, 2, \ldots, 6). \tag{7.21}$$

Требования, налагаемые симметрией. Кристалл с центром симметрии не может быть пьезоэлектриком. Ограничения, налагаемые симметрией кристаллов на модули d_{ij} нецентросимметричных кристаллографических классов, часто можно получить, исходя только из анализа симметрии. *Метод прямой проверки* применим ко всем классам, кроме классов тригональной и гексагональной систем, для которых необходимо использовать более общий аналитический метод. Для этой цели может быть также использована теория групп.

Тензор третьего ранга, например d_{ijk}, не может быть полностью представлен одной поверхностью. *Поверхность продольного пьезоэлектрического эффекта* изображает компоненту поляризации, возникающую параллельно приложенному напряжению растяжения. Радиус-вектор этой поверхности в любом направлении пропорционален продольному эффекту в данном направлении. Продольный пьезоэлектрический эффект может возникать только вдоль полярных направлений.

ЗАДАЧИ

1. Исходя только из соображений симметрии, доказать, что для класса m с плоскостью m, перпендикулярной Ox_2, выполняются соотношения

$$d_{14} = d_{16} = d_{21} = d_{22} = d_{23} = d_{25} = d_{34} = d_{36} = 0.$$

2. Исходя из соображений симметрии, показать, что для класса 4

$$d_{14} = -d_{25}.$$

3. Показать, что для классов 422 и 622 поверхность продольного пьезоэлектрического эффекта не существует ни в одном направлении.

4. Используя табл. 8, найти, какие классы могут обнаруживать пьезоэлектрический эффект при гидростатическом сжатии, и таким образом проверить компоненты пироэлектрического вектора $\boldsymbol{p}$, приведенные в гл. IV, § 7.

5. Постоянное одноосное давление приложено к кристаллу кварца перпендикулярно оси третьего порядка. Показать, что если направление давления поворачивается вокруг оси третьего порядка, то вектор пьезоэлектрической поляризации, оставаясь постоянным по величине, также будет поворачиваться вокруг оси третьего порядка, но вдвое быстрее и в противоположном направлении.

Глава VIII

УПРУГОСТЬ. ТЕНЗОРЫ ЧЕТВЕРТОГО РАНГА

§ 1. Закон Гука

Под действием напряжения форма твердого тела изменяется. Если величина напряжения ниже определенного предельного значения, называемого *пределом упругости*, то деформация является обратимой, т. е. при снятии напряжения тело принимает первоначальную форму. Далее известно (закон Гука), что при достаточно малых напряжениях деформация пропорциональна величине приложенного напряжения. Предположим, например, что на изотропный твердый стержень действует чистое растяжение σ. Продольная деформация ε по определению равна $\Delta l/l$, где Δl — приращение длины и l — первоначальная длина. Согласно закону Гука,

$$\varepsilon = s\sigma,$$

где s — константа, называемая *константой упругой податливости*, или *податливостью*, для данной конкретной системы напряжений и данного направления деформаций. Вместе с тем, мы можем записать

$$\sigma = c\varepsilon, \qquad c = \frac{1}{s},$$

где c — *константа упругой жесткости*, или просто *жесткость*; c называется также модулем Юнга [1]).

---

[1]) Использование терминов *податливость* и *жесткость* согласуется с принятым в американской литературе. В то же время многие английские авторы используют соответственно термины *модуль упругости* и *константа упругости*. При такой системе могут возникнуть затруднения, связанные с тем обстоятельством, что модуль Юнга является не модулем упругости, а константой упругости. Кроме того, преимуществом терминов *податливость* и *жесткость* является их наглядность: жесткий кристалл имеет высокое значение *жесткости*, податливый — высокое значение *податливости*. К сожалению, начальные буквы английских слов „жесткость" (stiffness) и „податливость" (compliance) обратны соответствующим символам, но этот факт легко запомнить.

Символ	Американская литература и настоящая книга	Английская литература	Размерность
s	Податливость	Модуль	(Напряжение)$^{-1}$
c	Жесткость	Константа	Напряжение

Обобщим теперь эти утверждения и определения. В гл. V и VI мы уже видели, что однородное напряжение и однородная деформация определяются в общем случае тензорами второго ранга. Если к кристаллу приложено произвольное однородное напряжение σ_{ij}, то возникающая однородная деформация такова, что каждая ее компонента ε_{ij} линейно связана со всеми компонентами напряжения. Так, например,

$$\varepsilon_{11} = s_{1111}\sigma_{11} + s_{1112}\sigma_{12} + s_{1113}\sigma_{13} + \\ + s_{1121}\sigma_{21} + s_{1122}\sigma_{22} + s_{1123}\sigma_{23} + \\ + s_{1131}\sigma_{31} + s_{1132}\sigma_{32} + s_{1133}\sigma_{33};$$

для других восьми компонент ε_{ij} имеются восемь аналогичных уравнений, где s — константы. Следовательно, закон Гука в обобщенной форме запишется так:

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}; \tag{8.1}$$

здесь s_{ijkl} — *податливости* кристалла. Уравнение (8.1) заменяет девять уравнений, в каждом из которых справа стоит девять членов. Всего имеется 81 коэффициент s_{ijkl}.

Если приложена только одна компонента напряжения, скажем σ_{11}, то из уравнения (8.1) видно, что могут быть отличны от нуля все компоненты деформации, а не только ε_{11}. Отсюда вытекает, что если прямоугольный стержень, вырезанный из кристалла, подвергнуть одноосному растяжению параллельно четырем его ребрам, то стержень будет не только удлиняться в направлении растяжения, но и претерпевать сдвиг. При этом все углы между ребрами становятся отличными от прямых углов. Естественно, что, если мы будем пытаться изогнуть кристаллический стержень, прикладывая чисто изгибающее напряжение к его концам, то стержень будет в общем случае не только изгибаться, но и закручиваться. Соответственно, если попытаться закрутить стержень из кристалла, прилагая к его концам чисто крутящее напряжение, то в общем случае стержень будет закручиваться и изгибаться.

Можно поступить иначе и выразить напряжения через деформации с помощью уравнений

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl}, \tag{8.2}$$

где c_{ijkl} — *константы жесткости* кристалла, число которых равно 81. Если уравнения (8.1) решить как систему совместных уравнений относительно σ_{ij}, то получится система решений в форме (8.2) с коэффициентами c_{ijkl}, являющимися линейными функциями s_{ijkl}. Форма соотношения между c_{ijkl} и s_{ijkl} рассматривается в § 7 и в гл. IX, § 4, п. 2.

Физический смысл s_{ijkl} можно понять, представив себе, что на кристалл действуют различные простые напряжения. Если бы было приложено сдвиговое напряжение σ_{12}, то, вспоминая, что в отсутствие

объемных моментов [1]) σ_{12} не может быть приложено без σ_{21}, мы получили бы

$$\varepsilon_{11} = s_{1112}\sigma_{12} + s_{1121}\sigma_{21} = (s_{1112} + s_{1121})\,\sigma_{12}.$$

Коэффициенты s_{1112} и s_{1121} всегда появляются вместе; если не принимать во внимание объемные моменты, то в принципе невозможно представить себе эксперимент, при котором можно было бы отделить s_{1112} от s_{1121} или, в более общем случае, s_{ijkl} от s_{ijlk}. (Аналогичная ситуация имела место и с пьезоэлектрическими модулями в гл. VII, § 1.) Поэтому, чтобы избежать появления произвольных постоянных, будем считать равными две компоненты:

$$s_{ijkl} = s_{ijlk}. \tag{8.3}$$

Вместе с тем, если бы было приложено одноосное растягивающее напряжение параллельно Ox_3, то компоненты деформации задавались бы в виде

$$\varepsilon_{11} = s_{1133}\sigma_{33}, \qquad \varepsilon_{22} = s_{2233}\sigma_{33}$$

и т. д. В частности,

$$\varepsilon_{12} = s_{1233}\sigma_{33} \quad \text{и} \quad \varepsilon_{21} = s_{2133}\sigma_{33}.$$

Но из определения компонент тензора деформации (см. гл. VI) следует, что $\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21}$. Поэтому $s_{1233} = s_{2133}$, и в общем случае мы получаем, что

$$s_{ijkl} = s_{jikl}. \tag{8.4}$$

Благодаря соотношениям (8.3) и (8.4), только 36 из 81 компонент s_{ijk} являются независимыми.

Для определения конкретного физического смысла коэффициентов c_{ijkl} в уравнении (8.2) представим себе совокупность компонент напряжений, приложенных к кристаллу и выбранных таким образом чтобы все компоненты деформаций исчезали, за исключением одной нормальной или пары сдвиговых компонент. Таким образом, чтобы возникли компоненты тензорных сдвиговых деформаций ε_{12} и ε_{21}, необходимо задать напряжения

$$\sigma_{ij} = c_{ij12}\varepsilon_{12} + c_{ij21}\varepsilon_{21} = (c_{ij12} + c_{ij21})\,\varepsilon_{12}.$$

Опять мы принимаем, что коэффициенты, всегда появляющиеся вместе, попарно равны друг другу. Тогда в общем случае

$$c_{ijkl} = c_{ijlk}. \tag{8.5}$$

Рассматривая частные случаи, как это делалось выше для s_{ijkl}, можно найти, что

$$c_{ijkl} = c_{jikl}. \tag{8.6}$$

[1]) См. примечание 2 на стр. 111.

Благодаря соотношениям (8.5) и (8.6) число независимых компонент c_{ijkl} также уменьшается от 81 до 36.

Покажем теперь, что 81 коэффициент s_{ijkl} образуют *тензор четвертого ранга*. Тензор четвертого ранга, подобно тензорам низших рангов, определяется его законом преобразования. Совокупность из 81 числа T_{ijkl}, описывающая некоторую физическую величину, образует тензор четвертого ранга, если эти числа при изменении системы координат преобразуются в T'_{ijkl}, где

$$T'_{ijkl} = a_{im}a_{jn}a_{ko}a_{lp}T_{mnop}. \tag{8.7}$$

Чтобы доказать, что s_{ijkl} образуют такой тензор, поступим следующим образом. Мы имеем

$$\varepsilon'_{ij} = a_{ik}a_{jl}\varepsilon_{kl}, \tag{8.8}$$

$$\varepsilon_{kl} = s_{klmn}\sigma_{mn}, \tag{8.9}$$

$$\sigma_{mn} = a_{om}a_{pn}\sigma'_{op}. \tag{8.10}$$

Эти три уравнения связаны между собой так:

$$\varepsilon' \xrightarrow{(8.8)} \varepsilon \xrightarrow{(8.9)} \sigma \xrightarrow{(8.10)} \sigma',$$

где стрелка заменяет слова „выражается через...“. Комбинируя (8.8) — (8.10), получаем,

$$\varepsilon'_{ij} = a_{ik}a_{jl}s_{klmn}a_{om}a_{pn}\sigma'_{op}.$$

Но

$$\varepsilon'_{ij} = s'_{ijop}\sigma'_{op},$$

поэтому, сравнивая коэффициенты, находим

$$s'_{ijop} = a_{ik}a_{jl}a_{om}a_{pn}s_{klmn}.$$

Наконец, заменяя индексы суммирования, получаем

$$s'_{ijkl} = a_{im}a_{jn}a_{ko}a_{lp}s_{mnop}, \tag{8.11}$$

т. е. приведенный выше закон преобразования тензора четвертого ранга. Чтобы еще раз показать, насколько облегчается запись при использовании индексов суммирования, отметим, что уравнение (8.11) соответствует 3^4 уравнениям, в каждом из которых имеется 3^4 членов с правой стороны, т. е. уравнение (8.11) содержит всего $3^8 = 6561$ членов.

Приведенное выше доказательство носит общий характер. Если два тензора второго ранга A_{ij} и B_{kl} связаны уравнением

$$A_{ij} = C_{ijkl}B_{kl},$$

то величины C_{ijkl} образуют тензор четвертого ранга. Отсюда следует, что упругие жесткости c_{ijkl} также образуют тензор четвертого ранга.

§ 2. Матричные обозначения

Благодаря симметричности s_{ijkl} и c_{ijkl} по первым двум и последним двум индексам мы можем использовать матричные обозначения, введенные в предыдущей главе. Компоненты напряжений и компоненты деформаций, как и выше, записываются с одним индексом, пробегающим значения от 1 до 6:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{31} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \frac{1}{2}\varepsilon_5 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_6 & \varepsilon_2 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 \\ \frac{1}{2}\varepsilon_5 & \frac{1}{2}\varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{bmatrix}. \tag{8.12}$$

В s_{ijkl} и c_{ijkl} два первых индекса можно объединить в один, пробегающий значения от 1 до 6; два последних можно объединить тем же способом; в итоге получается следующая схема замены индексов:

тензорные обозначения: 11 22 33 23,32 31,13 12,21,
матричные обозначения: 1 2 3 4 5 6.

При этом вводятся множители 2 и 4 следующим образом:

$s_{ijkl} = s_{mn}$, когда m и n равны 1, 2 или 3;
$2s_{ijkl} = s_{mn}$, когда или m или n равны 4, 5 или 6;
$4s_{ijkl} = s_{mn}$, когда и m и n равны 4, 5 или 6.

Рассмотрим теперь уравнения (8.1) для ε_{11} и ε_{23}, написанные в развернутом виде,

$$\varepsilon_{11} = s_{1111}\sigma_{11} + s_{1112}\sigma_{12} + s_{1113}\sigma_{13} + s_{1121}\sigma_{21} + s_{1122}\sigma_{22} + s_{1123}\sigma_{23} + s_{1131}\sigma_{31} + s_{1132}\sigma_{32} + s_{1133}\sigma_{33},$$

$$\varepsilon_{23} = s_{2311}\sigma_{11} + s_{2312}\sigma_{12} + s_{2313}\sigma_{13} + s_{2321}\sigma_{21} + s_{2322}\sigma_{22} + s_{2323}\sigma_{23} + s_{2331}\sigma_{31} + s_{2332}\sigma_{32} + s_{2333}\sigma_{33}.$$

В матричном обозначении эти два уравнения принимают вид

$$\varepsilon_1 = s_{11}\sigma_1 + \frac{1}{2}s_{16}\sigma_6 + \frac{1}{2}s_{15}\sigma_5 + \frac{1}{2}s_{16}\sigma_6 + s_{12}\sigma_2 + \frac{1}{2}s_{14}\sigma_4 + \frac{1}{2}s_{15}\sigma_5 + \frac{1}{2}s_{14}\sigma_4 + s_{13}\sigma_3,$$

$$\frac{1}{2}\varepsilon_4 = \frac{1}{2}s_{41}\sigma_1 + \frac{1}{4}s_{46}\sigma_6 + \frac{1}{4}s_{45}\sigma_5 + \frac{1}{4}s_{46}\sigma_6 + \frac{1}{2}s_{42}\sigma_2 + \frac{1}{4}s_{44}\sigma_4 + \frac{1}{4}s_{45}\sigma_5 + \frac{1}{4}s_{44}\sigma_4 + \frac{1}{2}s_{43}\sigma_3,$$

или

$$\varepsilon_i = s_{ij}\sigma_j \quad \text{и} \quad \varepsilon_4 = s_{4j}\sigma_j.$$

Следовательно, в общем случае уравнения (8.1) можно записать более кратко так:

$$\varepsilon_i = s_{ij}\sigma_j \qquad (i,\ j = 1,\ 2,\ \ldots,\ 6). \tag{8.13}$$

Множители 2 и 4 вводятся в определения s_{ij} потому, что таким путем удается избежать появления этих множителей в уравнении (8.13) и его можно записать в компактной форме [1]).

Для c_{ijkl} множители 2 и 4 вводить не нужно. Поэтому, если мы запишем просто

$$c_{ijkl} = c_{mn} \qquad (i,\ j,\ k,\ l = 1,\ 2,\ 3; \quad m,\ n = 1,\ 2,\ \ldots,\ 6),$$

то, развертывая некоторые члены, можно показать, что уравнения (8.2) принимают форму

$$\sigma_i = c_{ij}\varepsilon_j \qquad (i,\ j = 1,\ 2,\ \ldots,\ 6). \tag{8.14}$$

Таблицы s_{ij} и c_{ij}, записанные в виде квадратов

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & s_{15} & s_{16} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} & s_{24} & s_{25} & s_{26} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} & s_{34} & s_{35} & s_{36} \\ s_{41} & s_{42} & s_{43} & s_{44} & s_{45} & s_{46} \\ s_{51} & s_{52} & s_{53} & s_{54} & s_{55} & s_{56} \\ s_{61} & s_{62} & s_{63} & s_{64} & s_{65} & s_{66} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{pmatrix}, \tag{8.15}$$

образуют матрицы (s_{ij}) и (c_{ij}). Заметим, что здесь, как и в случае пьезоэлектрических модулей, s_{ij} и c_{ij}, несмотря на наличие двух индексов, не являются компонентами тензора второго ранга и поэтому не преобразуются подобно таким компонентам. Для преобразования их к другим осям координат необходимо вернуться к тензорным обозначениям.

§ 3. Энергия деформированного кристалла

Рассмотрим кристалл, имеющий в недеформированном состоянии форму единичного куба, и предположим, что он испытывает малую однородную деформацию с компонентами ε_i. Пусть теперь все компоненты деформации возрастут до $\varepsilon_i + d\varepsilon_i$. Докажем, что работа, произведенная при этом компонентами напряжения σ_i, действующими на грани куба, выражается в виде

$$dW = \sigma_i\, d\varepsilon_i \qquad (i = 1,\ 2,\ \ldots,\ 6). \tag{8.16}$$

[1]) Введение множителей 2 и 4 в определения s_{ij}, а не в уравнение (8.13) согласуется с установившейся практикой (см., например, [86]) и с обозначениями, введенными Фойгтом [92]. Вустер [96] применяет обратный способ. Поскольку возможны два способа определения, необходимо проявлять большую внимательность при использовании численных значений.

Сначала предположим, что компонента деформации ε_1 возрастает до $\varepsilon_1 + d\varepsilon_1$, тогда как остальные компоненты деформации и положение центра куба остаются неизменными. При этом каждая из двух граней, перпендикулярных Ox_1, сместится по направлению от центра куба на $^1/_2 d\varepsilon_1$; другие четыре грани просто увеличатся по площади, а положения их центров не изменятся. Таким образом, работа, произведенная силами, действующими на последние четыре грани, будет равна нулю. Работа, произведенная силой, действующей на грани, перпендикулярные Ox_1, равна их смещению, умноженному на нормальную компоненту силы, т. е. $2\sigma_1{}^1/_2 d\varepsilon_1 = \sigma_1 d\varepsilon_1$. Мы получили член с $i = 1$ в уравнении (8.16); члены с $i = 2$ и $i = 3$ находятся аналогично.

Пусть теперь рассматриваемый нами куб претерпевает деформацию сдвига. Будем считать, что две грани, перпендикулярные Ox_2, смещаются в противоположных направлениях параллельно Ox_3 так, что компонента деформации ε_4 возрастает до $\varepsilon_4 + d\varepsilon_4$. При этой деформации (простой сдвиг) центры граней, перпендикулярных Ox_2, сдвигаются на расстояние $^1/_2 d\varepsilon_4$. Компонента силы, действующая на грани в этих направлениях, есть σ_4. Следовательно, работа, произведенная рассматриваемыми силами, записывается в виде $2\sigma_4 \cdot {}^1/_2 d\varepsilon_4 = \sigma_4 d\varepsilon_4$. Члены с $i = 5$ и $i = 6$ в уравнении (8.16) получаются аналогичным путем.

В итоге мы получаем, что уравнение (8.16) в тензорном обозначении принимает вид

$$dW = \sigma_{ij}\, d\varepsilon_{ij} \qquad (i,\ j = 1,\ 2,\ 3).$$

Уравнение (8.16) аналогично уравнениям для работы намагничивания (3.11) и для работы поляризации (4.9). Каждое из этих уравнений имеет для единичного объема форму „силы“ (H_i, E_i или σ_i), умноженной на малое „смещение“ (dB_i, dD_i или $d\varepsilon_i$). Так же как в электрическом и магнитном случаях, мы теперь докажем, что матрица, связывающая две такие величины [в данном случае матрица (c_{ij})], симметрична.

Если процесс деформации протекает изотермически и обратимо, то произведенная работа равна возрастанию свободной энергии $d\Psi$, и для единичного объема можно написать

$$d\Psi = dW = \sigma_i\, d\varepsilon_i. \tag{8.17}$$

Если выполняется закон Гука (8.14), то это уравнение принимает вид

$$d\Psi = c_{ij}\varepsilon_j\, d\varepsilon_i. \tag{8.18}$$

Следовательно,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_i} = c_{ij}\varepsilon_j.$$

(Доказательство справедливости этого уравнения аналогично приведенному в гл. III, § 2). Дифференцируя обе части уравнения по ε_j, получаем

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon_j}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon_i}\right) = c_{ij}.$$

Но так как Ψ есть функция только состояния тела, определяемого компонентами деформации, то порядок дифференцирования не имеет значения и левая сторона этого соотношения симметрична по i и j. Поэтому

$$c_{ij} = c_{ji}. \tag{8.19}$$

Из формы соотношения между c_{ij} и s_{ij} (см. гл. IX, § 4, п. 2) следует, что и

$$s_{ij} = s_{ji}. \tag{8.20}$$

Благодаря симметричности матриц (c_{ij}) и (s_{ij}), определяемой соотношениями (8.19) и (8.20), число независимых жесткостей и податливостей уменьшается еще больше — от 36 до 21.

Интегрируя уравнение (8.18) и используя соотношение (8.19), находим, что отнесенная к единице объема кристалла работа, необходимая для создания деформации ε_i и называемая *энергией деформации*, равна

$$\frac{1}{2} c_{ij}\varepsilon_i\varepsilon_j \tag{8.21}$$

[ср. формулу (3.17)].

§ 4. Влияние симметрии кристалла

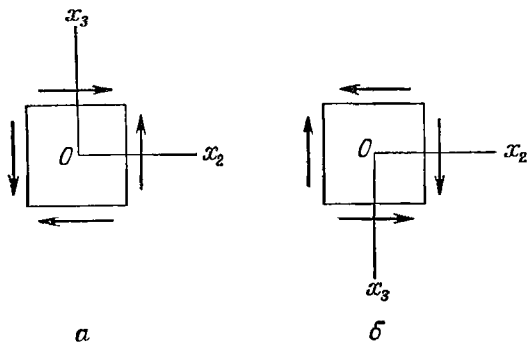
Вследствие симметрии кристалла число независимых s_{ij} и c_{ij} уменьшается еще больше. Следует отметить с самого начала, что упругость является центросимметричным свойством. Это означает, что если оси координат преобразованы действием центра симметрии, то компоненты s_{ijkl} и c_{ijkl} остаются неизменными. Доказательство этого положения весьма просто. Элементы a_{ij} матрицы преобразования равны в данном случае $-\delta_{ij}$. Поэтому, согласно уравнению (8.11), мы имеем

$$s'_{ijkl} = \delta_{im}\delta_{jn}\delta_{ko}\delta_{lp}s_{mnop} = s_{ijkl}$$

в соответствии со свойством δ_{ij} (см. стр. 53); для c_{ijkl} доказательство аналогично. Однако другие элементы симметрии налагают на упругие константы определенные ограничения, которые мы теперь должны рассмотреть. Для нахождения этих ограничений используются совершенно такие же методы, как в случае пьезоэлектрических модулей.

а) Соображения, в основе которых лежит лишь анализ симметрии кристалла. Условия, налагаемые на s_{ij} и c_{ij}, часто можно

получить непосредственно путем рассмотрения симметрии без применения аналитических методов, как это делалось выше для пьезоэлектрических модулей. Рассмотрим, например, податливость s_{34} для орторомбического класса 222. Она характеризует растяжение в направлении оси Ox_3, когда к кристаллу приложены сдвиговые силы в плоскости, перпендикулярной Ox_1, как показано на фиг. 53, *а*. Подействуем теперь на всю систему (кристалл плюс сдвиговые силы) осью второго порядка, параллельной Ox_2. Кристалл при этом остается неизменным, так как его симметрия включает ось второго порядка; то же будет и с растяжением, параллельным Ox_3. Однако силы, приложенные к граням, заменятся на силы, показанные на фиг. 53, *б*.



а *б*

Фиг. 53. Схема, показывающая, что для класса 222 податливость s_{34} равна нулю.

Следовательно, мы имеем тот же самый кристалл, по-прежнему растянутый вдоль направления Ox_3, но под действием противоположных сил. Это возможно лишь в том случае, если растяжение равно нулю. Таким образом, $s_{34} = 0$. Аналогичное рассмотрение применимо к большинству податливостей в различных кристаллографических классах.

б) *Метод прямой проверки.* С помощью метода прямой проверки, описанного на стр. 146, можно быстрее всего определить независимые упругие константы для всех классов, за исключением классов, относящихся к тригональной и гексагональной системам. Для иллюстрации этого метода достаточно одного примера. Выберем, скажем, класс $\bar{4}$.

Так как ось $\bar{4}$ параллельна x_3, то оси координат преобразуются следующим образом:

$$1 \to 2, \quad 2 \to -1, \quad 3 \to -3.$$

Следовательно, при *четырехиндексном обозначении* пары индексов преобразуются по правилу

$$11 \to 22, \quad 22 \to 11, \quad 33 \to 33, \quad 23 \to 13, \quad 31 \to -32, \quad 12 \to -21,$$

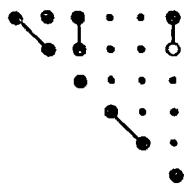
При *двухиндексном обозначении* преобразования индексов имеют вид

$$1 \to 2, \quad 2 \to 1, \quad 3 \to 3, \quad 4 \to 5, \quad 5 \to -4, \quad 6 \to -6.$$

Таблица индексов, выписанная в виде матрицы в обычном порядке (8.15), преобразуется тогда так:

$$\begin{array}{cccccc} 22 & 21 & 23 & 25 & -24 & -26 \\ & 11 & 13 & 15 & -14 & -16 \\ & & 33 & 35 & -34 & -36 \\ & & & 55 & -54 & -56 \\ & & & & 44 & 46 \\ & & & & & 66. \end{array}$$

Мы опустили нижнюю левую половину таблицы, так как матрица симметрична. Приравнивая эту таблицу, компоненту за компонентой, к первоначальной, можно сразу видеть все соотношения между компонентами:



Здесь используются те же обозначения, что и в табл. 9: маленькие точки означают компоненты, равные нулю; жирные — компоненты, отличные от нуля; линии, соединяющие две жирные точки, означают, что соответствующие компоненты равны друг другу; жирная точка и светлый кружок, соединенные линией, соответствуют численно равным, но противоположным по знаку компонентам.

в) Результаты для всех кристаллографических классов. Для тригональной и гексагональной систем необходимо применять аналитический метод (так же, как и в случае пьезоэлектрических модулей). Метод прямой проверки можно использовать во всех других случаях. Число независимых компонент может быть также установлено с помощью теории групп. Результаты для матриц (s_{ij}) и (c_{ij}) приведены в табл. 9. Все обозначения даны в начале таблицы. Чтобы пояснить смысл обозначений, обратимся к классам 3 и $\bar{3}$, для которых

$$s_{15} = -s_{25}, \quad s_{46} = 2s_{25}, \quad s_{66} = 2(s_{11} - s_{12});$$

$$c_{15} = -c_{25}, \quad c_{46} = c_{25}, \quad c_{66} = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}).$$

Число независимых компонент указывается в скобках возле каждой матрицы. Ориентация осей координат соответствует правилам, рекомендованным IRE [86] (см. приложение 2), за исключением особо оговоренных случаев.

Форма приведенной в таблице матрицы для совершенно изотропной среды получается из матрицы для кубической системы, если потребовать, что ее компоненты не должны изменяться при повороте на 45° вокруг осей координат (можно показать, что при выполнении этого условия матрица не будет изменяться и при любом повороте осей). Выше мы установили, что свойства кубических кристаллов, описываемые тензорами второго ранга, изотропны; теперь мы видим, что упругие свойства кубических кристаллов, описываемые тензорами четвертого ранга, не являются изотропными.

г) *Численный пример.* Для численного примера выберем кристалл дигидрофосфата аммония, принадлежащий к классу $\bar{4}2m$. (Именно для этого кристалла на стр. 149 приводились данные о пьезоэлектрических свойствах.) Компоненты матриц (s_{ij}) и (c_{ij}) в единицах MKS[1]) при 0° С для этого кристалла, измеренные Мэзоном [64], имеют следующие значения:

$$(s_{ij}) = \begin{pmatrix} 1{,}8 & 0{,}7 & -1{,}1 & 0 & 0 & 0 \\ & 1{,}8 & -1{,}1 & 0 & 0 & 0 \\ & & 4{,}3 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 11{,}3 & 0 & 0 \\ & & & & 11{,}3 & 0 \\ & & & & & 16{,}2 \end{pmatrix} \times 10^{-11},$$

$$(c_{ij}) = \begin{pmatrix} 0{,}71 & -0{,}20 & 0{,}13 & 0 & 0 & 0 \\ & 0{,}71 & 0{,}13 & 0 & 0 & 0 \\ & & 0{,}30 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0{,}088 & 0 & 0 \\ & & & & 0{,}088 & 0 \\ & & & & & 0{,}070 \end{pmatrix} \times 10^{11}.$$

1. Дополнительные ограничения, налагаемые на упругие константы. Энергия деформации кристалла, задаваемая формулой (8.21), должна быть положительной, иначе кристалл будет неустойчивым. Это означает, что квадратичная форма (8.21) должна быть существенно положительной, т. е. быть больше нуля для любых действительных значений ε_{ij}, за исключением случая, когда все ε_{ij} равны нулю. Данное условие налагает на s_{ij} и c_{ij} дополнительные ограничения, которые можно найти обычными алгебраическими методами (см., например, [38]).

Для гексагональных кристаллов эти ограничения для c_{ij} таковы:

$$c_{44} > 0, \quad c_{11} > |c_{12}|, \quad (c_{11} + c_{12})\, c_{33} > 2c_{13}^2.$$

---

[1]) В системе MKS c_{ij} и s_{ij} измеряются в $н/м^2$ и $м^2/н$ соответственно; $1\ н = 10^5\ дн$; $1\ н/м^2 = 10\ дн/см^2$.

ТАБЛИЦА 9

Форма матриц (s_{ij}) *и* (c_{ij})

Обозначения

- компонента, равная нулю,
- компонента, отличная от нуля,
- равные компоненты,
- компоненты, равные по величине, но противоположные по знаку,

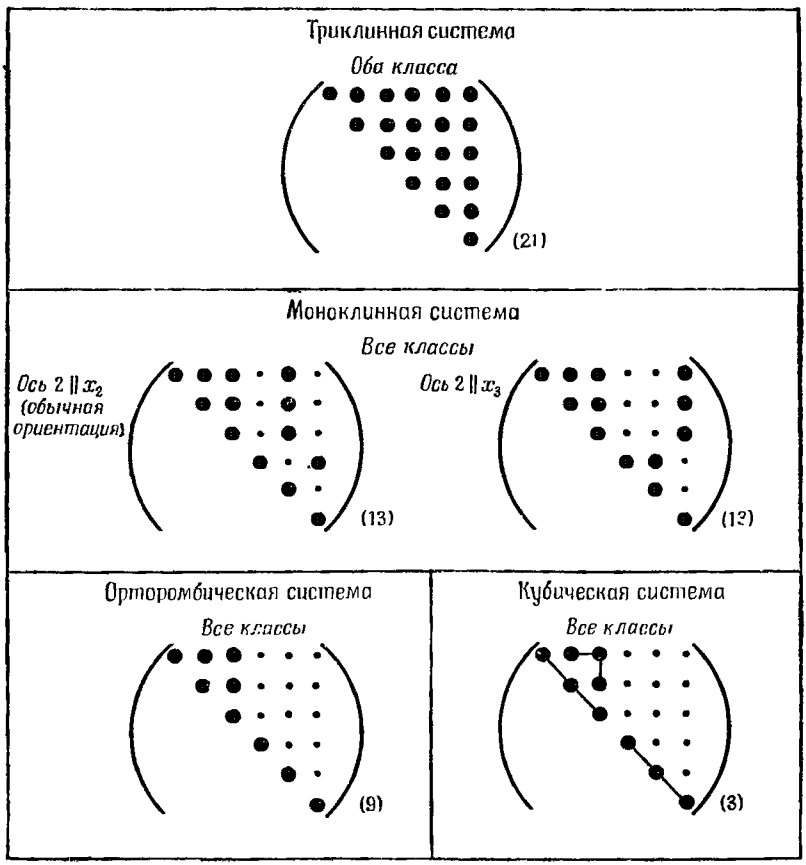
для s ◉ компонента, равная по величине удвоенной компоненте, изображенной жирной точкой, с которой символ соединен линией,

для c ◉ компонента, равная по величине компоненте изображенной жирной точкой, с которой данный символ соединен линией,

для s × $2(s_{11} - s_{12})$,

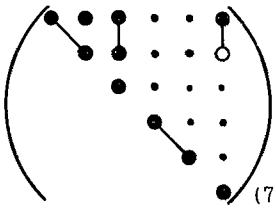
для c × $\frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$.

Все матрицы симметричны относительно главной диагонали.

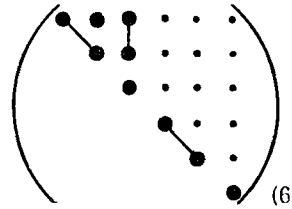


Тетрагональная система

Классы 4, $\bar{4}$, 4/m

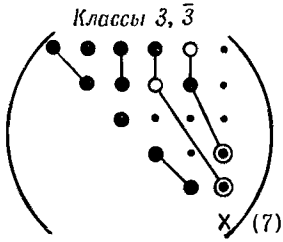


Классы 4mm, $\bar{4}2m$, 422, 4/mmm*

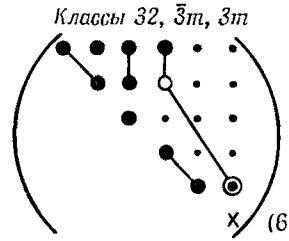


Тригональная система

Классы 3, $\bar{3}$

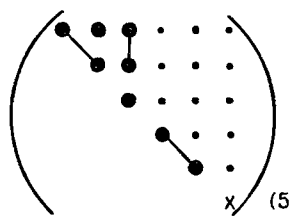


Классы 32, $\bar{3}m$, 3m

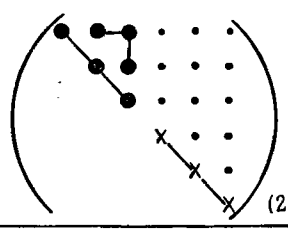


Гексагональная система

Все классы



Изотропная среда



* Такой вид имеет матрица для обеих возможных ориентаций для класса $\bar{4}2m$ ($2 \parallel x_1$ и $m \perp x_1$), поскольку при добавлении центра симметрии эти две ориентации неразличимы.

Для кубических кристаллов они записываются в виде

$$c_{44} > 0, \quad c_{11} > |c_{12}|, \quad c_{11} + 2c_{12} > 0.$$

На податливости s_{ij} налагаются такие же ограничения.

2. Соотношения между напряжениями и деформациями для изотропных материалов. Используя приведенную в табл. 9 матрицу (s_{ij}) для изотропных материалов, можно выразить s_{ij} через более привычные величины: модуль Юнга и модуль сдвига. Сначала мы выпишем уравнения, выражающие компоненты деформаций через компоненты напряжений, и для сравнения запишем рядом те же самые величины в форме, часто используемой в учебниках по теории упругости:

$$\varepsilon_1 = s_{11}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{12}\sigma_3, \qquad \varepsilon_1 = \frac{1}{E}[\sigma_1 - \nu(\sigma_2 + \sigma_3)],$$

$$\varepsilon_2 = s_{12}\sigma_1 + s_{11}\sigma_2 + s_{12}\sigma_3, \qquad \varepsilon_2 = \frac{1}{E}[\sigma_2 - \nu(\sigma_3 + \sigma_1)],$$

$$\varepsilon_3 = s_{12}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{11}\sigma_3, \qquad \varepsilon_3 = \frac{1}{E}[\sigma_3 - \nu(\sigma_1 + \sigma_2)],$$

$$\varepsilon_4 = 2(s_{11} - s_{12})\sigma_4, \qquad \varepsilon_4 = \frac{1}{G}\sigma_4,$$

$$\varepsilon_5 = 2(s_{11} - s_{12})\sigma_5, \qquad \varepsilon_5 = \frac{1}{G}\sigma_5,$$

$$\varepsilon_6 = 2(s_{11} - s_{12})\sigma_6, \qquad \varepsilon_6 = \frac{1}{G}\sigma_6.$$

Здесь E — модуль Юнга, G — модуль сдвига и ν — коэффициент Пуассона. Сравнивая коэффициенты у выражений, выписанных слева и справа, получаем

$$s_{11} = \frac{1}{E}, \quad s_{12} = -\frac{\nu}{E} \quad \text{и} \quad 2(s_{11} - s_{12}) = \frac{1}{G}, \tag{8.22}$$

откуда вытекает соотношение

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)}.$$

Используя константы жесткости, запишем уравнения, выражающие напряжения через деформации, и сравним их с аналогичными уравнениями, обычно используемыми в теории упругости:

$$\sigma_1 = c_{11}\varepsilon_1 + c_{12}\varepsilon_2 + c_{12}\varepsilon_3, \qquad \sigma_1 = (2\mu + \lambda)\varepsilon_1 + \lambda\varepsilon_2 + \lambda\varepsilon_3,$$

$$\sigma_2 = c_{12}\varepsilon_1 + c_{11}\varepsilon_2 + c_{12}\varepsilon_3, \qquad \sigma_2 = \lambda\varepsilon_1 + (2\mu + \lambda)\varepsilon_2 + \lambda\varepsilon_3,$$

$$\sigma_3 = c_{12}\varepsilon_1 + c_{12}\varepsilon_2 + c_{11}\varepsilon_3, \qquad \sigma_3 = \lambda\varepsilon_1 + \lambda\varepsilon_2 + (2\mu + \lambda)\varepsilon_3,$$

$$\sigma_4 = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})\varepsilon_4, \qquad \sigma_4 = \mu\varepsilon_4,$$

$$\sigma_5 = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})\varepsilon_5, \qquad \sigma_5 = \mu\varepsilon_5,$$

$$\sigma_6 = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})\varepsilon_6, \qquad \sigma_6 = \mu\varepsilon_6.$$

Отсюда

$$c_{11} = 2\mu + \lambda \quad \text{и} \quad c_{12} = \lambda.$$

§ 5. Характеристические поверхности и модуль Юнга

Упругие свойства кристалла нельзя полностью представить одной поверхностью. Практически полезна поверхность, изображающая изменение модуля Юнга с направлением. Предположим, что из кристалла вырезан стержень, длина которого параллельна произвольному направлению Ox_1'. Если к этому стержню приложить напряжение растяжения, то в общем случае оно вызывает не только продольную и поперечные деформации, но также и деформации сдвига. Модуль Юнга в направлении растяжения определяется как отношение продольного напряжения к продольной деформации, т. е. равен $1/s_{11}'$. Обычно используются характеристические поверхности, радиус-вектор которых в направлении Ox_1' пропорционален s_{11}' или $1/s_{11}'$.

В качестве примера возьмем кристалл цинка, принадлежащий к гексагональной системе. Записываем общее выражение

$$s_{1111}' = a_{1m}a_{1n}a_{1p}a_{1q} = s_{mnpq};$$

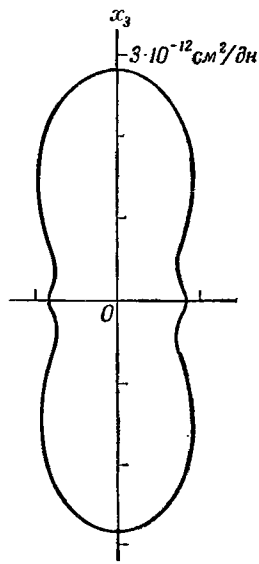
используя соответствующую матрицу податливостей, приведенную в табл. 9, находим, переходя после некоторых упрощений к сокращенным обозначениям:

$$s_{11}' = s_{11}(1 - a_{13}^2)^2 + s_{33}a_{13}^4 + (s_{44} + 2s_{13})(1 - a_{13}^2)a_{13}^2,$$

или

$$s_{11}' = s_{11}\sin^4\theta + s_{33}\cos^4\theta + (s_{44} + 2s_{13})\sin^2\theta\cos^2\theta, \quad (8.23)$$

где θ — угол между произвольным направлением Ox_1' и кристаллографической осью z (осью Ox_3). Поверхность s_{11}' (или $1/s_{11}'$) является



Фиг. 54. Центральное сечение характеристической поверхности для модуля Юнга цинка [45].

Длина радиуса-вектора пропорциональна s_{11}', т. е. обратно пропорциональна модулю Юнга.

в данном случае поверхностью вращения вокруг Ox_3. Податливости кристалла имеют следующие значения [45]:

$$s_{11}=8{,}4,\quad s_{12}=1{,}1,\quad s_{13}=-7{,}8,\quad s_{33}=28{,}7,\quad s_{44}=26{,}4\cdot 10^{-12}\ м^2/н.$$

Сечение получаемой при этом поверхности s'_{11} показано на фиг. 54.

Мы приведем теперь выражение для s'_{11} — величины, обратной модулю Юнга, — в направлении единичного вектора l_i для различных кристаллографических систем.

Триклинная система:

$$\begin{aligned}l_1^4 s_{11}+2l_1^2l_2^2s_{12}+2l_1^2l_3^2s_{13}+(2l_1^2l_2l_3s_{14})+2l_1^3l_3s_{15}+(2l_1^3l_2s_{16})+\\+l_2^4s_{22}+2l_2^2l_3^2s_{23}+(2l_2^3l_3s_{24})+2l_1l_2^2l_3s_{25}+(2l_1l_2^3s_{26})+\\+l_3^4s_{33}+(2l_2l_3^3s_{34})+2l_1l_3^3s_{35}+(2l_1l_2l_3^2s_{36})+\\+l_2^2l_3^2s_{44}+(2l_1l_2l_3^2s_{45})+2l_1l_2^2l_3s_{46}+\\+l_1^2l_3^2s_{55}+(2l_1^2l_2l_3s_{56})+\\+l_1^2l_2^2s_{66}.\end{aligned}$$

Моноклинная система (обычная ориентация, см. стр. 336). Соответствующее выражение для моноклинной системы имеет тот же вид, что и для триклинной системы, если отбросить члены, взятые в скобки.

Орторомбическая система:

$$\begin{aligned}l_1^4s_{11}+2l_1^2l_2^2s_{12}+2l_1^2l_3^2s_{13}+l_2^4s_{22}+2l_2^2l_3^2s_{23}+l_3^4s_{33}+l_2^2l_3^2s_{44}+\\+l_1^2l_3^2s_{55}+l_1^2l_2^2s_{66}.\end{aligned}$$

Тетрагональная система (классы $\bar{4}$, 4, $4/m$):

$$\begin{aligned}(l_1^4+l_2^4)s_{11}+l_3^4s_{33}+l_1^2l_2^2(2s_{12}+s_{66})+\\+l_3^2(1-l_3^2)(2s_{13}+s_{44})+[2l_1l_2(l_1^2-l_2^2)s_{16}].\end{aligned}$$

Классы $4mm$, $\bar{4}2m$, 422, $4/mmm$. То же, что и в предыдущем случае, но без членов, взятых в квадратные скобки.

Кубическая система:

$$s_{11}-2\left(s_{11}-s_{12}-\frac{1}{2}s_{44}\right)(l_1^2l_2^2+l_2^2l_3^2+l_3^2l_1^2).$$

Тригональная система (классы 3, $\bar{3}$):

$$\begin{aligned}(1-l_3^2)^2s_{11}+l_3^4s_{33}+l_3^2(1-l_3^2)(2s_{13}+s_{44})+\\+2l_2l_3(3l_1^2-l_2^2)s_{14}+[2l_1l_3(3l_2^2-l_1^2)s_{25}].\end{aligned}$$

Классы $3m$, 32, $\bar{3}m$. То же, что в предыдущем случае, но без членов, взятых в квадратные скобки.

Гексагональная система:

$$(1-l_3^2)^2 s_{11} + l_3^4 s_{33} + l_3^2(1-l_3^2)(2s_{13}+s_{44}).$$

Отметим, что для кубической системы модуль Юнга не является изотропным. Его изменение с направлением зависит от $(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2)$. Эта величина равна нулю в направлениях осей куба ⟨100⟩ и имеет максимальное значение, равное $1/3$, в направлениях ⟨111⟩. Следовательно, его величина $(s_{11} - s_{12} - 1/2 s_{44})$ положительна, как это имеет место для всех кубических металлов, за исключением молибдена, то наибольшее значение модуля Юнга соответствует направлениям ⟨111⟩, а наименьшее — направлениям ⟨100⟩. Поверхность, радиусы-векторы которой прямо пропорциональны модулю Юнга, будет тогда иметь форму куба со скругленными углами и углублениями в центрах граней. Ее центральные сечения, перпендикулярные ⟨111⟩, будут окружностями. Равенство $(s_{11} - s_{12} - 1/2 s_{44}) = 0$ является условием упругой изотропии. Если $(s_{11} - s_{12} - 1/2 s_{44}) < 0$, то модуль Юнга имеет наименьшее значение в направлениях ⟨111⟩ и наибольшее — в направлениях ⟨100⟩. Поверхность модулей Юнга имеет при этом выпуклости в центрах граней [1]).

§ 6. Объемная и линейная сжимаемости кристалла

а) Объемная сжимаемость. Вычислим относительное уменьшение объема кристалла под действием единичного гидростатического давления, называемое *объемной сжимаемостью*. В уравнении (8.1) положим $\sigma_{kl} = -p\delta_{kl}$. Тогда

$$\varepsilon_{ij} = -p s_{ijkl}\delta_{kl} = -p s_{ijkk}. \tag{8.24}$$

Для объемного сжатия Δ (см. стр. 125) имеем

$$\Delta = \varepsilon_{ii} = -p s_{iikk};$$

таким образом, объемная сжимаемость $-\Delta/p = s_{iikk}$. Это новый пример инварианта, образуемого из тензора. В матричном обозначении объемная сжимаемость имеет вид

$$s_{11} + s_{22} + s_{33} + 2(s_{12} + s_{23} + s_{31}), \tag{8.25}$$

т. е. представляет собой сумму девяти коэффициентов, стоящих в левом верхнем углу матрицы податливостей. Очевидно, что для кубических кристаллов объемная сжимаемость равна $3(s_{11} + 2s_{12})$; это же справедливо и для изотропных материалов. Однако в послед-

[1]) Изображения поверхностей модуля Юнга и модуля кручения цилиндра приводятся в книгах Вустера [96] и Шмида и Боаса [81].

нем случае обычно на основании соотношений (8.22) вводят величину, обратную объемной сжимаемости — *объемный модуль*

$$K = \frac{1}{3(s_{11}+2s_{12})} = \frac{E}{3(1-2\nu)}.$$

б) Линейная сжимаемость. Линейная сжимаемость кристалла есть относительное уменьшение длины некоторого отрезка, взятого в кристалле, при действии на кристалл единичного гидростатического давления. В общем случае линейная сжимаемость изменяется с направлением. Удлинение отрезка, лежащего в направлении единичного вектора l_i (см. стр. 126), под действием давления p можно, используя (8.24), записать в виде

$$\varepsilon_{ij}l_il_j = -ps_{ijkk}l_il_j;$$

таким образом, линейная сжимаемость

$$\beta = s_{ijkk}l_il_j. \tag{8.26}$$

Ниже приведены для всех кристаллографических систем выражения для β в матричном обозначении.

Триклинная система:

$$\beta = (s_{11}+s_{12}+s_{13})l_1^2+(s_{16}+s_{26}+s_{36})l_1l_2+(s_{15}+s_{25}+s_{35})l_3l_1+$$
$$+(s_{12}+s_{22}+s_{23})l_2^2+(s_{14}+s_{24}+s_{34})l_2l_3+(s_{13}+s_{23}+s_{33})l_3^2.$$

Моноклинная система [обычная установка (стр. 336)]:

$$\beta = (s_{11}+s_{12}+s_{13})l_1^2+(s_{12}+s_{22}+s_{23})l_2^2+$$
$$+(s_{13}+s_{23}+s_{33})l_3^2+(s_{15}+s_{25}+s_{35})l_3l_1.$$

Орторомбическая система:

$$\beta = (s_{11}+s_{12}+s_{13})l_1^2+(s_{12}+s_{22}+s_{23})l_2^2+(s_{13}+s_{23}+s_{33})l_3^2.$$

Тетрагональная, тригональная и гексагональная системы (все классы):

$$\beta = (s_{11}+s_{12}+s_{13})-(s_{11}+s_{12}-s_{13}-s_{33})l_3^2.$$

Кубическая система:

$$\beta = s_{11}+2s_{12}.$$

Итак, линейная сжимаемость у оптически одноосных кристаллов обладает круговой симметрией относительно главной оси симметрии. Для кубической системы линейная сжимаемость изотропна: сфера из кубического кристалла при гидростатическом сжатии остается сферой.

§ 7. Соотношения между податливостями и жесткостями

Уравнения, выражающие s_{ij} через c_{ij}, и наоборот, будут выведены в следующей главе. Здесь мы дадим лишь ряд полезных со-

отношений между s_{ij} и c_{ij} для некоторых высокосимметричных классов [17].

Тригональная система (классы $3m$, 32, $\bar{3}m$):

$$c_{11}+c_{12}=\frac{s_{33}}{s}, \qquad c_{11}-c_{12}=\frac{s_{44}}{s'}, \qquad c_{13}=-\frac{s_{13}}{s},$$

$$c_{14}=-\frac{s_{14}}{s'}, \qquad c_{33}=\frac{s_{11}+s_{12}}{s}, \qquad c_{44}=\frac{s_{11}-s_{12}}{s'},$$

где

$$s=s_{33}(s_{11}+s_{12})-2s_{13}^2$$

и

$$s'=s_{44}(s_{11}-s_{12})-2s_{14}^2.$$

Тетрагональная система (классы $4mm$, $\bar{4}2m$, 422, $4/mmm$):

$$c_{11}+c_{12}=\frac{s_{33}}{s}, \qquad c_{11}-c_{12}=\frac{1}{s_{11}-s_{12}}, \qquad c_{13}=-\frac{s_{13}}{s},$$

$$c_{33}=\frac{s_{11}+s_{12}}{s}, \qquad c_{44}=\frac{1}{s_{44}}, \qquad c_{66}=\frac{1}{s_{66}},$$

где

$$s=s_{33}(s_{11}+s_{12})-2s_{13}^2.$$

Гексагональная система (все классы):

$$c_{11}+c_{12}=\frac{s_{33}}{s}, \qquad c_{11}-c_{12}=\frac{1}{s_{11}-s_{12}}, \qquad c_{13}=-\frac{s_{13}}{s},$$

$$c_{33}=\frac{s_{11}+s_{12}}{s}, \qquad c_{44}=\frac{1}{s_{44}},$$

где

$$s=s_{33}(s_{11}+s_{12})-2s_{13}^2.$$

Кубическая система (все классы):

$$c_{11}=\frac{s_{11}+s_{12}}{(s_{11}-s_{12})(s_{11}+2s_{12})},$$

$$c_{12}=\frac{-s_{12}}{(s_{11}-s_{12})(s_{11}+2s_{12})},$$

$$c_{44}=\frac{1}{s_{44}}.$$

§ 8. Численные значения упругих констант

Численные значения упругих податливостей некоторых кристаллов приведены в табл. 10. Многие кубические кристаллы обладают заметной анизотропией упругих свойств, тогда как вольфрам и алюминий лишь слегка анизотропны. У гексагональных кристаллов анизотропия иногда велика; например, линейная сжимаемость цинка равна $1{,}31\cdot10^{-11}$ *м²/н* в направлении, параллельном оси z, и $0{,}175\cdot10^{-11}$ *м²/н* в направлениях, перпендикулярных оси z (эти значения можно вычислить из выражения для β, приведенного выше)

ТАБЛИЦА 10

Упругость кристаллов

(Податливость при комнатной температуре в 10^{-12} *см*^{2}/*дин.*) *

Кристалл	Класс	s_{11}	s_{12}	s_{44}	s_{33}	s_{13}	s_{14}	s_{66}
Хлорид натрия	$m3m$	2,21	—0,45	7,83	—	—	—	—
Алюминий . . .	$m3m$	1,59	—0,58	3,52	—	—	—	—
Медь	$m3m$	1,49	—0,63	1,33	—	—	—	—
Никель	$m3m$	0,799	—0,312	0,844	—	—	—	—
Вольфрам . . .	$m3m$	0,257	—0,073	0,660	—	—	—	—
Хлорат натрия .	23	2,2	—0,6	8,6	—	—	—	—
Олово	$4/mmm$	1,85	—0,99	5,70	1,18	—0,25	—	13,5
Дигидрофосфат аммония . . .	$\bar{4}2m$	1,8	0,7	11,3	4,3	—1,1	—	16,2
Цинк	$6/mmm$	0,84	0,11	2,64	2,87	—0,78	—	—
Кадмий	$6/mmm$	1,23	—0,15	5,40	3,55	—0,93	—	—
Кварц	32	1,27	—0,17	2,01	0,97	—0,15	—0,43	—
Турмалин . . .	$3m$	0,40	—0,10	1,51	0,63	—0,016	0,058	—

* Значения взяты из работ [17, 49, 91]. Работа [49] содержит полную сводку значений упругих констант, известных к концу 1944 г., а дополнения по работам 1945—1955 гг. приведены в [50а]. Сводные данные имеются также в [9, 78]. Наконец, отметим важный обзор [53а], в котором наряду с макроскопической теорией упругих констант рассматривается микроскопическая.

У кадмия линейные сжимаемости равны 1,69 и $0{,}15 \cdot 10^{-13}$. У теллура, имеющего цепочечную структуру, линейная сжимаемость в направлении, параллельном оси цепочки, отрицательна.

РЕЗЮМЕ

Закон Гука. Закон Гука для кристаллов записывается в виде

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}, \tag{8.1}$$

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl}, \tag{8.2}$$

где s_{ijkl} и c_{ijkl} — компоненты тензоров четвертого ранга: s_{ijkl} — *упругие податливости* и c_{ijkl} — *упругие жесткости*. Вследствие симметричности тензора напряжений (когда отсутствуют объемные моменты) можно положить

$$s_{ijkl} = s_{ijlk}.$$

Симметричность тензора деформации означает, что

$$s_{ijkl} = s_{jikl}.$$

Аналогично, тензор c_{ijkl} симметричен по первым двум и по последним двум индексам. Благодаря этим соотношениям число независимых компонент s_{ijkl} и c_{ijkl} уменьшается до 36.

Матричные обозначения. Заменим два первых индекса при s_{ijkl} и c_{ijkl} одним индексом, пробегающим значения от 1 до 6, так же как мы делали для пьезоэлектрических модулей; аналогичную замену введем и для двух последних индексов. При этом мы ставим множители 2 и 4 перед некоторыми из s_{ijkl}, но не делаем этого для c_{ijkl}. Используем также введенные ранее обозначения с одним индексом для компонент напряжений и деформаций. Тогда уравнения (8.1) и (8.2) принимают вид

$$\varepsilon_i = s_{ij}\sigma_j \qquad (i, j = 1, 2, \ldots, 6), \tag{8.13}$$

$$\sigma_i = c_{ij}\varepsilon_j \qquad (i, j = 1, 2, \ldots, 6); \tag{8.14}$$

здесь (s_{ij}) и (c_{ij}) — матрицы с шестью строчками и шестью столбцами.

Другие соотношения. Работа на единицу объема, произведенная при малом изменении деформации кристалла, выражается в виде

$$dW = \sigma_i d\varepsilon_i. \tag{8.16}$$

Когда это изменение деформации является изотермическим и обратимым, dW можно приравнять возрастанию свободной энергии $d\Psi$. Из того обстоятельства, что $d\Psi$ есть полный дифференциал, следует:

$$c_{ij} = c_{ji} \tag{8.19}$$

и

$$s_{ij} = s_{ji}; \tag{8.20}$$

поэтому энергия деформации, отнесенная к единичному объему, равна

$$\frac{1}{2} c_{ij}\varepsilon_i\varepsilon_j. \tag{8.21}$$

Благодаря соотношениям (8.19) и (8.20) число независимых податливостей и жесткостей уменьшается от 36 до 21; кроме того, благодаря симметрии кристалла число независимых констант уменьшается еще больше. Наконец, дополнительные ограничения налагаются условием положительности выражения (8.21).

Кристаллический стержень под действием простого растяжения испытывает продольные и поперечные деформации, а также деформации сдвига. *Модуль Юнга* в направлении растяжения определяется как отношение продольного напряжения растяжения к продольной деформации. Для всех кристаллографических классов, включая кубические, модуль Юнга анизотропен; его изменение с направлением может быть представлено соответствующей геометрической поверхностью.

Пусть к кристаллу приложено единичное гидростатическое давление. Тогда: 1) относительное уменьшение объема, называемое *объемной сжимаемостью*, есть s_{iikk}, т. е. сумма девяти компонент, расположенных в левом верхнем углу матрицы (s_{ij}); 2) относительное уменьшение длины направленного вдоль l_i отрезка в кристалле, называемое *линейной сжимаемостью*, определяется как $\beta = s_{ijkk} l_i l_j$.

Линейная сжимаемость кубических кристаллов изотропна.

ЗАДАЧИ

1. Исходя только из рассмотрения симметрии, определить форму матрицы податливостей для класса 4.

2. Доказать, что изменение объема кубического кристалла под действием одноосного растяжения T не зависит от направления растяжения и описывается выражением $(s_{11} + 2s_{12})\,T$.

Глава IX

МАТРИЧНЫЙ МЕТОД[1])

§ 1. Матричные и тензорные обозначения

Матричные обозначения, введенные в гл. VII и VIII при рассмотрении уравнений пьезоэлектрического эффекта

$$P_i = d_{ij}\sigma_j, \quad \varepsilon_j = d_{ij}E_i \tag{9.1}$$

и уравнений упругости

$$\varepsilon_i = s_{ij}\sigma_j, \quad \sigma_i = c_{ij}\varepsilon_j, \tag{9.2}$$

являются удобным сокращением, которое во многих случаях можно применять вместо тензорных обозначений. Как уже указывалось ранее, преимущество тензорных обозначений состоит в том, что они позволяют получить при переходе от одной системы координат к другой простые уравнения для преобразования коэффициентов, описывающих некоторое физическое свойство. Кроме того, тензорный характер свойства, т. е. ранг тензора и закон его преобразования, ясно виден из числа индексов. Однако, если мы всегда будем помнить о различии законов преобразования тензоров разного ранга, т. е. иметь в виду, что $\varkappa_{ij}$, d_{ij} и s_{ij}, хотя и имеют одинаковый вид, преобразуются по-разному, то возражения против уменьшения числа индексов до двух отпадают. Введя такое сокращение, мы можем еще больше сократить запись и в то же время взглянуть на уравнения с новой точки зрения, что, как мы увидим, окажется весьма плодотворным. Для этой цели необходимо дать краткий обзор некоторых правил матричной алгебры.

§ 2. Матричная алгебра[2])

1. Линейные преобразования и умножение матриц. Бо́льшая часть встречавшихся нам до сих пор уравнений, описывающих свойства кристаллов, представляла собой системы совместных линейных уравнений. Матричная алгебра значительно облегчает операции с такими уравнениями.

---

[1]) При первом чтении эту главу можно опустить.

[2]) См. [2, 18, 38]. (См. также [106, 113]. — *Прим. перев.*)

Предположим, что переменные $x_1, x_2, \ldots, x_m$ линейно связаны с независимыми переменными $y_1, y_2, \ldots, y_n$ совместными уравнениями

$$\begin{aligned} x_1 &= \alpha_{11}y_1 + \alpha_{12}y_2 + \ldots + \alpha_{1n}y_n, \\ x_2 &= \alpha_{21}y_1 + \alpha_{22}y_2 + \ldots + \alpha_{2n}y_n, \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ x_m &= \alpha_{m1}y_1 + \alpha_{m2}y_2 + \ldots + \alpha_{mn}y_n, \end{aligned}$$

или в сокращенной записи

$$x_i = \alpha_{ij}y_j \qquad (i = 1, \ldots, m;\ j = 1, \ldots n). \tag{9.3}$$

Предположим теперь, что y_j в свою очередь связаны с третьей системой переменных $z_1, z_2, \ldots, z_p$ уравнениями

$$y_j = \beta_{jk}z_k \quad (j = 1, \ldots, n;\ k = 1, \ldots, p). \tag{9.4}$$

Тогда x_i связаны с z_k уравнениями

$$x_i = \alpha_{ij}\beta_{jk}z_k. \tag{9.5}$$

Если теперь ввести новую систему величин γ_{ik}, определяемых равенствами

$$\gamma_{ik} = \alpha_{ij}\beta_{jk}, \tag{9.6}$$

то мы сможем выразить x_i непосредственно через z_k:

$$x_i = \gamma_{ik}z_k. \tag{9.7}$$

Рассмотрим теперь все α и β, выписанные в виде таблиц следующим образом:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \ldots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \ldots & \alpha_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \ldots & \alpha_{mn} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \ldots & \beta_{1p} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \ldots & \beta_{2p} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \ldots & \beta_{np} \end{pmatrix}.$$

Мы можем считать, что эти таблицы образуют величины, называемые *матрицами* α и β. Тогда, если все γ выписаны в виде аналогичной матрицы, общий член γ_{ik}, т. е. элемент, стоящий в i-й строке и k-м столбце матрицы γ, определяется как:

$$\gamma_{ik} = \alpha_{ij}\beta_{jk} = \alpha_{i1}\beta_{1k} + \alpha_{i2}\beta_{2k} + \ldots$$

Это выражение получается почленным умножением i-й строки матрицы α на k-й столбец матрицы β и суммированием полученных произведений. Такая операция называется *умножением матриц*. Мы можем записать

$$\gamma = \alpha\beta. \tag{9.8}$$

обозначая этим, что матрица γ получается умножением матрицы α на матрицу β.

Очевидно, что умножение матриц возможно лишь тогда, когда число столбцов левой матрицы равно числу строк правой. Так, в предыдущем примере α являлась $(m \times n)$-матрицей, а β и γ представляли собой соответственно $(n \times p)$- и $(m \times p)$-матрицы. Чтобы показать это, мы можем условно записать

$$(m \times p) = (m \times n) \times (n \times p).$$

В правой части этого равенства n стоят рядом; можно считать, что при умножении n вычеркиваются и остается $(m \times p)$.

Если число столбцов в матрице **A** равно числу строк в матрице **B**, то говорят, что эти матрицы *могут образовать произведение* **AB**.

Возвращаясь к уравнению (9.3), мы видим, что x_l и y_j можно рассматривать как матрицы. Если x_l записать как элементы матрицы из m строк и одного столбца (матрицы-столбца)

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_m \end{pmatrix},$$

то для того, чтобы α и $\mathbf{y}$ могли образовать произведение $\alpha\mathbf{y}$, $\mathbf{y}$ следует записать в виде матрицы из n строк и одного столбца

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ y_n \end{pmatrix};$$

тогда мы имеем

$$\mathbf{x} = \alpha\mathbf{y}. \tag{9.9}$$

Заметим, что для числа строк и столбцов можно написать следующее схематическое равенство:

$$(m \times 1) = (m \times n) \times (n \times 1).$$

Аналогично, уравнение (9.4) можно записать как

$$\mathbf{y} = \beta\mathbf{z}, \tag{9.10}$$

где $\mathbf{z}$ представляет собой $(p \times 1)$-матрицу; тогда уравнение (9.5) принимает вид

$$\mathbf{x} = \alpha\beta\mathbf{z}. \tag{9.11}$$

2. Сложение и вычитание матриц. Если $\mathbf{x}=\mathbf{A}\mathbf{y}$ и $\mathbf{w}=\mathbf{B}\mathbf{y}$, где $\mathbf{x}$, $\mathbf{A}$, $\mathbf{y}$, $\mathbf{B}$ и $\mathbf{w}$ — матрицы, то, записывая уравнения следующим образом:

$$x_i = A_{ij}y_j \quad \text{и} \quad w_i = B_{ij}y_j,$$

можно видеть, что

$$x_i + w_i = (A_{ij} + B_{ij})\, y_j.$$

Поэтому логично ввести матрицу $\mathbf{C}$ с элементами C_{ij}, задаваемыми выражением

$$C_{ij} = A_{ij} + B_{ij},$$

и назвать эту матрицу суммой $(\mathbf{A}+\mathbf{B})$. Тогда рассматриваемые операции можно записать в виде

$$\mathbf{x} + \mathbf{w} = \mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{B}\mathbf{y} = (\mathbf{A}+\mathbf{B})\,\mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{y}.$$

Две матрицы *могут образовать сумму*, когда обе они имеют одинаковое число строк и одинаковое число столбцов.

Операция вычитания одной матрицы из другой определяется аналогичным образом.

3. Сводка свойств матриц. *Символы* α, β, $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ *и т. д., представляющие матрицы, могут складываться, вычитаться и умножаться* (*но не делиться*) *так же, как если бы они выражали обычные числа* [1]). *При умножении матриц следует, однако, помнить, что обычно* $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$.

§ 3. Свойства кристаллов в матричной записи

Приведенные в гл. III — VIII уравнения, описывающие свойства кристаллов, могут быть компактно представлены в матричной записи. Представляя электрическую индукцию и напряженность поля в виде матриц-столбцов

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix},$$

мы можем записать

$$\mathbf{D} = \varkappa \mathbf{E}, \tag{9.12}$$

---

[1]) Строгое доказательство этого утверждения см. в книге Феррара [38]. Другое отличие матриц $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ от обычных чисел a и b состоит в следующем: уравнение $ab = 0$ означает, что a или b (или a и b) равны нулю; уравнение $\mathbf{AB} = \mathbf{0}$ ($\mathbf{0}$ обозначает *нулевую матрицу*, все элементы которой равны нулю) не обязательно означает, что $\mathbf{A}$ или $\mathbf{B}$ равны нулю.

где $\boldsymbol{\varkappa}$ — квадратная (3×3)-матрица

$$\begin{Vmatrix} \varkappa_{11} & \varkappa_{12} & \varkappa_{31} \\ \varkappa_{12} & \varkappa_{22} & \varkappa_{23} \\ \varkappa_{31} & \varkappa_{23} & \varkappa_{33} \end{Vmatrix}.$$

Аналогичное выражение получается для магнитной восприимчивости

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\mu}\mathbf{H}. \tag{9.13}$$

Уравнение пироэлектрического эффекта (4.21)

$$\Delta P_i = p_i \Delta T$$

может быть записано в виде

$$\Delta \mathbf{P} = \mathbf{p}\, \Delta T, \tag{9.14}$$

где $\Delta\mathbf{P}$ и $\mathbf{p}$ — матрицы-столбцы. Отметим, что при умножении матрицы на обычное число (ΔT) все ее элементы умножаются на это число.

Аналогично, уравнение теплового расширения (6.13)

$$\varepsilon_{ij} = \alpha_{ij} \Delta T$$

можно записать в виде

$$\varepsilon_i = \alpha_i \Delta T \qquad (i = 1, \ldots, 6),$$

или

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\alpha}}\, \Delta T, \tag{9.15}$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ представляет собой (6×1)-матрицу, компоненты которой были введены в гл. VII, § 3, а $\boldsymbol{\alpha}$ есть (6×1)-матрица, имеющая вид

$$\begin{Vmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \\ \alpha_6 \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{22} \\ \alpha_{33} \\ 2\alpha_{23} \\ 2\alpha_{31} \\ 2\alpha_{12} \end{Vmatrix}. \tag{9.16}$$

Иногда при вычислении теплового расширения более удобно пользоваться матрицами

$$\begin{Vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{31} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{23} & \alpha_{33} \end{Vmatrix}, \quad \text{или} \quad \begin{Vmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{22} \\ \alpha_{33} \\ \alpha_{23} \\ \alpha_{31} \\ \alpha_{12} \end{Vmatrix}.$$

Уравнения прямого пьезоэлектрического эффекта, которые мы записывали ранее в форме [см. (7.17)]

$$P_l = d_{lj}\sigma_j \qquad (l = 1, 2, 3;\ j = 1, \ldots, 6),$$

можно представить следующим образом:

$$\mathbf{P} = \mathbf{d}\boldsymbol{\sigma}, \tag{9.17}$$

где

$$\mathbf{P} = \begin{Vmatrix} P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{Vmatrix}, \quad \mathbf{d} = \begin{Vmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{Vmatrix} \quad \text{и} \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{Vmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{Vmatrix}.$$

Уравнения упругости выражаются в виде

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{s}\boldsymbol{\sigma} \quad \text{и} \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c}\boldsymbol{\varepsilon}, \tag{9.18}$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{\sigma}$ представляют собой (6×1)-матрицы, а $\mathbf{s}$ и $\mathbf{c}$ есть (6×6)-матрицы, введенные в гл. VIII, § 2.

§ 4. Две производные матрицы

1. Транспонирование матрицы. Второе из уравнений (9.1), записанное в развернутой форме, имеет вид

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1 &= d_{11}E_1 + d_{21}E_2 + d_{31}E_3, \\
\varepsilon_2 &= d_{12}E_1 + d_{22}E_2 + d_{32}E_3, \\
\varepsilon_3 &= d_{13}E_1 + d_{23}E_2 + d_{33}E_3, \\
\varepsilon_4 &= d_{14}E_1 + d_{24}E_2 + d_{34}E_3, \\
\varepsilon_5 &= d_{15}E_1 + d_{25}E_2 + d_{35}E_3, \\
\varepsilon_6 &= d_{16}E_1 + d_{26}E_2 + d_{36}E_3.
\end{aligned}$$

Чтобы представить это уравнение в сокращенной матричной записи без индексов, мы сначала запишем его как

$$\begin{Vmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{Vmatrix} = \begin{Vmatrix} d_{11} & d_{21} & d_{31} \\ d_{12} & d_{22} & d_{32} \\ d_{13} & d_{23} & d_{33} \\ d_{14} & d_{24} & d_{34} \\ d_{15} & d_{25} & d_{35} \\ d_{16} & d_{26} & d_{36} \end{Vmatrix} \times \begin{Vmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{Vmatrix}$$

и затем сократим до

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{d}_t\mathbf{E}. \tag{9.19}$$

Легко видеть, что $\mathbf{d}_t$ — такая же матрица, как и $\mathbf{d}$, но ее строками являются столбцы матрицы $\mathbf{d}$, а столбцами — строки матрицы $\mathbf{d}$. Матрица $\mathbf{d}_t$ называется *транспонированной* матрицей по отношению к матрице $\mathbf{d}$.

Это определение справедливо и в общем случае: матрица A_t является транспонированной по отношению к матрице A, если ее r-й столбец является r-й строкой матрицы A.

2. Обратная матрица. Предположим, что $\boldsymbol{\alpha}$ — произвольная квадратная $(n \times n)$-матрица, а $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ — матрицы-столбцы $(n \times 1)$ и что

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{y}, \tag{9.20}$$

или в индексном обозначении

$$x_i = \alpha_{ij} y_j \qquad (i, j = 1, \ldots, n).$$

Если детерминант из α_{ij}, который мы обозначим через $\Delta = |\alpha_{ij}|$, не равен нулю (в этом случае матрицу $\boldsymbol{\alpha}$ называют *неособой*), то эти уравнения могут быть разрешены относительно y_j. Умножая i-е уравнение на алгебраическое дополнение[1]) A_{ik} элемента α_{ik} и суммируя по i, получаем

$$A_{ik} x_i = A_{ik} \alpha_{ij} y_j \qquad (k = 1, \ldots, n);$$

но по теореме о разложении детерминанта[2])

$$A_{ik} \alpha_{ij} = \Delta \delta_{kj},$$

поэтому

$$A_{ik} x_i = \Delta \delta_{kj} y_j,$$

т. е.

$$A_{ik} x_i = \Delta y_k.$$

Следовательно, заменяя индексы, имеем

$$y_i = \frac{A_{ji}}{\Delta} x_j.$$

Это уравнение, записанное в виде

$$y_i = (\alpha^{-1})_{ij} x_j, \quad \text{или} \quad \mathbf{y} = \boldsymbol{\alpha}^{-1}\mathbf{x},$$

---

[1]) Алгебраическим дополнением элемента α_{ik} называется умноженный на $(-1)^{i+k}$ детерминант, получаемый из $|\alpha_{ij}|$ вычеркиванием i-й строки и k-го столбца.

[2]) Эта теорема состоит в следующем. Сумма элементов строки (или столбца) детерминанта, умноженных на свои алгебраические дополнения, равна этому детерминанту; сумма элементов строки, умноженных на соответствующие алгебраические дополнения другой строки, равна нулю; сумма элементов столбца, умноженных на соответствующие алгебраические дополнения другого столбца, равна нулю [38]. Первое из этих трех утверждений может быть использовано в качестве определения детерминанта.

является, очевидно, обратным по отношению к уравнению (9.20), если мы введем *определение*, что α^{-1} есть матрица, ij-й элемент которой, обозначенный через $(\alpha^{-1})_{ij}$, равен A_{ji}/Δ.

Напишем теперь ik-й элемент произведения $\alpha\alpha^{-1}$. Он равен

$$\alpha_{ij}(\alpha^{-1})_{jk} = \frac{\alpha_{ij}A_{kj}}{\Delta} = \frac{\delta_{ik}\Delta}{\Delta} = \delta_{ik}.$$

Матрица, элементами которой являются δ_{ik}, называется *единичной матрицей* и обозначается через $\mathbf{I}$. Итак,

$$\alpha\alpha^{-1} = \mathbf{I}.$$

Аналогично можно показать, что $\alpha^{-1}\alpha = \mathbf{I}$. Благодаря таким свойствам матрица α^{-1} называется *обратной* по отношению к матрице α. Важно отметить, что обратные матрицы имеются только у квадратных неособых матриц.

Легко видеть, что умножение любой матрицы на $\mathbf{I}$ оставляет ее неизменной. Теперь мы можем считать, что уравнение (9.20) разрешается относительно $\mathbf{y}$ путем умножения его на α^{-1}

$$\alpha^{-1}\mathbf{x} = \alpha^{-1}\alpha\mathbf{y} = \mathbf{I}\mathbf{y} = \mathbf{y}.$$

Примером двух взаимно обратных матриц являются матрица диэлектрической проницаемости $\varkappa$, связывающая $\mathbf{D}$ с $\mathbf{E}$,

$$\mathbf{D} = \varkappa\mathbf{E},$$

и *матрица „диэлектрической непроницаемости"* β, связывающая $\mathbf{E}$ с $\mathbf{D}$,

$$\mathbf{E} = \beta\mathbf{D}, \quad \text{где} \quad \beta = \varkappa^{-1}. \tag{9.20а}$$

Аналогично, из уравнений упругости

$$\varepsilon = \mathbf{s}\sigma \quad \text{и} \quad \sigma = \mathbf{c}\varepsilon$$

мы видим, что $\mathbf{s} = \mathbf{c}^{-1}$ и $\mathbf{c} = \mathbf{s}^{-1}$. Отсюда также следует, что

$$\mathbf{sc} = \mathbf{cs} = \mathbf{I}.$$

Вводя индексы суммирования, это же уравнение можно записать следующим образом:

$$s_{ij}c_{jk} = c_{ij}s_{jk} = \delta_{ik};$$

наконец, в полных тензорных обозначениях оно имеет вид

$$s_{ijkl}c_{klmn} = c_{ijkl}s_{klmn} = \delta_{im}\delta_{jn}. \tag{9.21}$$

§ 5. Величина, характеризующая свойство в произвольном направлении

В гл. I, § 6, п. 2 мы нашли, что если симметричный тензор второго ранга S_{ij} описывает некоторое свойство, то величина S, характеризующая это свойство в произвольном направлении (l_1, l_2, l_3), определяется выражением

$$S = S_{ij}l_il_j.$$

Чтобы представить это выражение в матричной форме, переставим сначала члены так, чтобы индексы суммирования стояли рядом, т. е. преобразуем его в $l_i S_{ij} l_j$; тогда мы можем записать

$$\mathbf{S} = \mathbf{l}_t \mathbf{S} \mathbf{l}, \tag{9.22}$$

или в развернутой форме

$$S = (l_1 l_2 l_3) \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{31} \\ S_{12} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{23} & S_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 \\ l_2 \\ l_3 \end{pmatrix}.$$

Мы перешли к $\mathbf{l}_t$ для того, чтобы можно было написать произведение матриц согласно схеме

$$(1 \times 1) = (1 \times 3) \times (3 \times 3) \times (3 \times 1).$$

§ 6. Поворот осей координат

Уравнения поворота осей координат, выведенные в гл. I, § 2, легко выразить в матричной форме. Уравнения преобразования координат точки [формула (1.18)]

$$x'_i = a_{ij} x_j$$

принимают вид

$$\mathbf{x}' = \mathbf{a}\mathbf{x}, \tag{9.23}$$

где $\mathbf{x}'$ и $\mathbf{x}$ — матрицы-столбцы. Уравнения преобразования компонент вектора

$$p'_i = a_{ij} p_j$$

принимают вид

$$\mathbf{p}' = \mathbf{a}\mathbf{p}. \tag{9.24}$$

Два последовательных поворота: $\mathbf{x}' = \mathbf{a}\mathbf{x}$ и следующий за ним $\mathbf{x}'' = \mathbf{b}\mathbf{x}'$, можно заменить одним, объединяя их с помощью матричного умножения, а именно $\mathbf{x}'' = (\mathbf{b}\mathbf{a})\,\mathbf{x}$.

Уравнения преобразования компонент тензора второго ранга, например тензора диэлектрической проницаемости, в записи с индексами суммирования имеют вид

$$\varkappa'_{ij} = a_{ik} a_{jl} \varkappa_{kl}.$$

Прежде чем применять правило умножения матриц, мы должны расположить повторяющиеся индексы рядом. Это можно сделать, поставив член a_{jl} после $\varkappa_{kl}$ и произведя транспонирование:

$$\varkappa'_{ij} = a_{ik} \varkappa_{kl} (a_t)_{lj};$$

следовательно, можно записать

$$\boldsymbol{\varkappa}' = \mathbf{a}\boldsymbol{\varkappa}\mathbf{a}_t. \tag{9.25}$$

Преобразования компонент тензоров третьего и четвертого рангов также могут быть представлены в виде матричных уравнений [18], однако эти матрицы довольно громоздки.

§ 7. Примеры вычислений с помощью матриц

При численных расчетах применение матричного метода часто значительно облегчает работу. Мы дадим здесь несколько практических примеров [1]).

1. Главные коэффициенты и главные направления для моноклинного кристалла. Метод наименьших квадратов. Предположим, что требуется найти компоненты тензора второго ранга, описывающего некоторое свойство моноклинного кристалла. Для определенности возьмем тепловое расширение. Если ось Ox_2 направлена вдоль оси второго порядка, то эти коэффициенты можно записать в виде матрицы

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & \alpha_{31} \\ 0 & \alpha_{22} & 0 \\ \alpha_{31} & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix}.$$

Заметим, что сначала мы не знаем направления двух главных осей, перпендикулярных Ox_2, и поэтому Ox_1 и Ox_3 могут быть выбраны произвольно. Как обычно, направим Ox_3 параллельно кристаллографической оси z; этим определяется и направление Ox_1.

Коэффициенты α_{ij} можно определить, измеряя продольное расширение стержней, вырезанных из кристалла в различных направлениях. Для произвольного направления, задаваемого единичным вектором $\mathbf{l}$, записанным в виде матрицы-столбца $\mathbf{l}$, такое расширение на единицу приращения температуры можно выразить как

$$\alpha_l = \mathbf{l}_t \alpha \mathbf{l}$$

в соответствии с уравнением (9.22). Если

$$\mathbf{l} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ то } \alpha_l = (0\ 1\ 0) \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & \alpha_{31} \\ 0 & \alpha_{22} & 0 \\ \alpha_{31} & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha_{22};$$

это же, очевидно, вытекает из определения α_{22}-компоненты матрицы.

В направлении оси Ox_2 расширение является максимальным или минимальным, поэтому его значение мало зависит от небольшой неточности в ориентировке образца. Таким образом, величину α_{22} можно с удовлетворительной точностью измерить непосредственно. Наоборот, α_{11} и α_{33} чувствительны к малым поворотам вокруг Ox_2, следовательно, ошибки в ориентировке образцов, номинально парал-

[1]) W. L. Bond, неопубликованная работа, 1945.

лельных Ox_1 и Ox_3, сказываются весьма значительно. Поэтому мы применим следующий метод определения α_{11}, α_{33} и α_{31}, который сводит ошибки к минимуму.

Пусть стержни вырезаются так, что

$$\mathbf{l} = \begin{pmatrix} \sin\theta_1 \\ 0 \\ \cos\theta_1 \end{pmatrix}. \tag{9.26}$$

Тогда, обозначая расширение в этом направлении через A_1, имеем

$$A_1 = (\sin\theta_1\ 0\ \cos\theta_1)\begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & \alpha_{31} \\ 0 & \alpha_{22} & 0 \\ \alpha_{31} & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sin\theta_1 \\ 0 \\ \cos\theta_1 \end{pmatrix} =$$

$$= (\overline{\sin\theta_1 \cdot \alpha_{11} + \cos\theta_1 \cdot \alpha_{31}}\ \ 0\ \ \overline{\sin\theta_1 \cdot \alpha_{31} + \cos\theta_1 \cdot \alpha_{33}})\begin{pmatrix} \sin\theta_1 \\ 0 \\ \cos\theta_1 \end{pmatrix} =$$

$$= \sin^2\theta_1 \cdot \alpha_{11} + \sin 2\theta_1 \cdot \alpha_{31} + \cos^2\theta_1 \cdot \alpha_{33}. \tag{9.27}$$

(Этот же результат, очевидно, легко получить, используя тензорные обозначения.)

Если для нескольких различных ориентаций $\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_n$ найдены соответствующие значения расширений $A_1, A_2, \ldots, A_n$, то мы получаем систему уравнений, подобных уравнению (9.27), которая может быть записана в виде

$$\mathbf{A} = \Theta\boldsymbol{\alpha}, \tag{9.28}$$

где

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \cdot \\ A_n \end{pmatrix}, \quad \Theta = \begin{pmatrix} \sin^2\theta_1 & \sin 2\theta_1 & \cos^2\theta_1 \\ \sin^2\theta_2 & \sin 2\theta_2 & \cos^2\theta_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \sin^2\theta_n & \sin 2\theta_n & \cos^2\theta_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{31} \\ \alpha_{33} \end{pmatrix}.$$

Для определения α_{11}, α_{31}, α_{33} достаточно измерить три значения расширения: A_1, A_2, A_3. В этом случае Θ — квадратная и, вообще говоря, неособая матрица; поэтому мы можем разрешить уравнение (9.28) относительно $\boldsymbol{\alpha}$:

$$\boldsymbol{\alpha} = \Theta^{-1}\mathbf{A}. \tag{9.29}$$

Более точный результат получится, если измерить не три, а больше значений A_1, A_2 и т. д. и использовать эти результаты для нахождения наилучшего значения $\boldsymbol{\alpha}$. Поэтому рассмотрим следующую общую задачу.

Общая задача. Пусть $z_1, z_2, \ldots, z_q$ представляют собой q неизвестных величин, которые при умножении на коэффициенты $a_1, a_2, \ldots, a_q$ дают величину M, определямую равенством

$$M = a_1z_1 + a_2z_2 + \ldots + a_qz_q.$$

Задаваясь значениями коэффициентов $a_1, a_2, \ldots, a_q$, можно экспериментально измерить M. Вследствие ошибок эксперимента мы получим не истинное значение M, а некоторое значение $M+v$, где v — погрешность. Проведя p таких экспериментов при различных значениях a, получаем

$$\begin{aligned} v_1 &= a_{11}z_1 + a_{12}z_2 + \ldots + a_{1q}z_q - M_1, \\ v_2 &= a_{21}z_1 + a_{22}z_2 + \ldots + a_{2q}z_q - M_2, \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ v_p &= a_{p1}z_1 + a_{p2}z_2 + \ldots + a_{pq}z_q - M_p. \end{aligned} \tag{9.30}$$

Если $p > q$, то выбрать q уравнений из p уравнений системы (9.30) можно несколькими способами. Полагая, что в каждом из уравнений любой выбранной системы погрешность v равна нулю, можно разрешить эти системы q уравнений относительно q неизвестных $z_1, z_2, \ldots, z_q$. Таким образом, мы получим несколько систем значений $z_1, z_2, \ldots, z_q$, но эти системы не будут точно согласовываться. Принцип наименьших квадратов состоит в том, что значения z должны быть выбраны так, чтобы сумма $v_1^2 + v_2^2 + \ldots + v_p^2$ была наименьшей (см., например, книгу Скарборо [80]).

Уравнения (9.30) можно переписать в виде

$$v_i = a_{ij}z_j - M_i \qquad (i = 1, \ldots, p;\ j = 1, \ldots, q), \tag{9.31}$$

или

$$\mathbf{v} = \mathbf{az} - \mathbf{M}, \tag{9.32}$$

где $\mathbf{v}$, $\mathbf{z}$ и $\mathbf{M}$ — матрицы-столбцы и $\mathbf{a}$ — матрица коэффициентов a_{ij}. Так как мы положили, что сумма $v_i v_i$ должна иметь минимальное значение, то

$$v_i \frac{\partial v_i}{\partial z_j} = 0, \tag{9.33}$$

или, учитывая (9.31),

$$v_i a_{ij} = 0. \tag{9.34}$$

Подставляя значения v_i из уравнений (9.31) в (9.34) и заменяя индекс суммирования j на k, получаем

$$(a_{ik}z_k - M_i)\, a_{ij} = 0,$$

или

$$(a_t)_{ji}(a_{ik}z_k - M_i) = 0,$$

а затем переходим к записи без индексов

$$\mathbf{a_t az} - \mathbf{a_t M} = \mathbf{0}.$$

Здесь $(\mathbf{a_t a})$ — квадратная матрица, схематически представляемая в виде $(q \times p) \times (p \times q) = (q \times q)$; следовательно, она обладает

обратной матрицей. Поэтому, умножая слева каждый член на $(a_t a)^{-1}$, мы разрешаем уравнение относительно z и находим

$$z = (a_t a)^{-1} a_t M. \tag{9.35}$$

Рассмотрим нашу схему рассуждений в целом. Мы задавались p уравнениями с q неизвестными, а именно $az = M$. Имея лишние уравнения, мы добавили p неизвестных v_i, определяемых q уравнениями (9.34); в итоге получили $p+q$ уравнений с $p+q$ неизвестными.

Значения v_i, характеризующие точность измерений, находим, подставляя значение z, определяемое соотношением (9.35), в уравнение (9.32):

$$v = [a(a_t a)^{-1} a_t - I] M. \tag{9.36}$$

В рассмотренном выше примере с тепловым расширением роль уравнения $M = az$ играло уравнение (9.28), поэтому наилучшее значение α определяется формулой

$$\alpha = RA, \quad \text{где} \quad R = (\Theta_t \Theta)^{-1} \Theta_t.$$

Численный пример. Перпендикулярно оси Ox_2 вырезан восьмиугольный диск; значения теплового расширения на 1° С, измеренные между противоположными сторонами в плоскости диска, оказались следующими:

$\theta_i =$	0°	45°	90°	135°,
$A_i \cdot 10^6 =$	32,0	16,0	15,0	31,5.

Для этого случая

$$\Theta = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & -1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Следовательно,

$$\Theta_t \Theta = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & -1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 2 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}.$$

(Матрица $\Theta_t\Theta$ должна быть симметричной.) Поэтому

$$(\Theta_t\Theta)^{-1}=\frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{3}{2} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ 2 & 0 \end{vmatrix} \\ -\begin{vmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} \frac{3}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} \frac{3}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \\ \begin{vmatrix} 0 & 2 \\ \frac{1}{2} & 0 \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} \frac{3}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} \frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} \end{vmatrix},$$

где Δ — детерминант матрицы $\Theta_t\Theta$. В нашем случае $\Delta=4$. Следовательно,

$$(\Theta_t\Theta)^{-1}=\frac{1}{4}\begin{pmatrix} 3 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 3 \end{pmatrix},$$

так что уравнение $\mathbf{R}=(\Theta_t\Theta)^{-1}\Theta_t$ имеет вид

$$\mathbf{R}=\frac{1}{4}\begin{pmatrix} -1 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & -2 \\ 3 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Наконец, определяя α по формуле $\alpha=\mathbf{R}A$, получаем

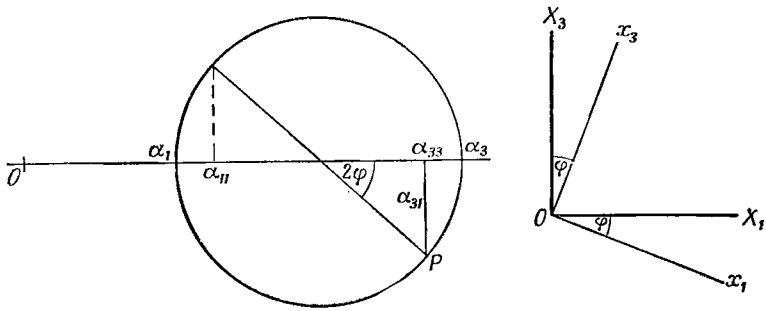
$$\alpha\cdot 10^6=\frac{1}{4}\begin{pmatrix} -1 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & -2 \\ 3 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 32{,}0 \\ 16{,}0 \\ 15{,}0 \\ 31{,}5 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 15{,}13 \\ -7{,}75 \\ 32{,}13 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{31} \\ \alpha_{33} \end{pmatrix}\cdot 10^6.$$

Значение $\mathbf{v}$, найденное по формуле (9.36), имеет вид

$$\begin{pmatrix} 0{,}13 \\ -0{,}13 \\ 0{,}13 \\ -0{,}13 \end{pmatrix}\cdot 10^{-6}.$$

Итак, наилучшие значения α_{11}, α_{31}, α_{33} задаются произведением матрицы $\mathbf{R}$ на матрицу измеренных значений теплового расширения. Если желательно сделать больше четырех измерений, то можно вычислить, другие матрицы, аналогичные матрице $\mathbf{R}$, для 10-, 12-... угольных дисков.

Теперь мы перейдем к нахождению главных коэффициентов расширения α_1 и α_3 и ориентации главных осей. Удобнее всего решать эту задачу путем построения окружности Мора (см. гл. II, § 4).



Фиг. 55. Построение окружности Мора для нахождения главных коэффициентов и ориентации главных осей теплового расширения.

На фиг. 55, построенной в масштабе, главные оси обозначены через X_1, X_3. Так как коэффициент α_{31} отрицателен, изображающая точка P находится ниже оси. Очевидно, что

$$\operatorname{tg} 2\varphi = \frac{2|\alpha_{31}|}{\alpha_{33} - \alpha_{11}};$$

отсюда, используя приведенные выше значения, получаем

$$\varphi = 21{,}18°.$$

Радиус r окружности определяется формулой

$$r^2 = \frac{1}{4}(\alpha_{33} - \alpha_{11})^2 + \alpha_{31}^2,$$

откуда находим

$$r = 11{,}50 \cdot 10^{-6}\ \textit{град}^{-1}.$$

Тогда α_1 и α_3 вычисляются следующим образом:

$$\alpha_1 = \frac{1}{2}(\alpha_{11} + \alpha_{33}) - r,$$

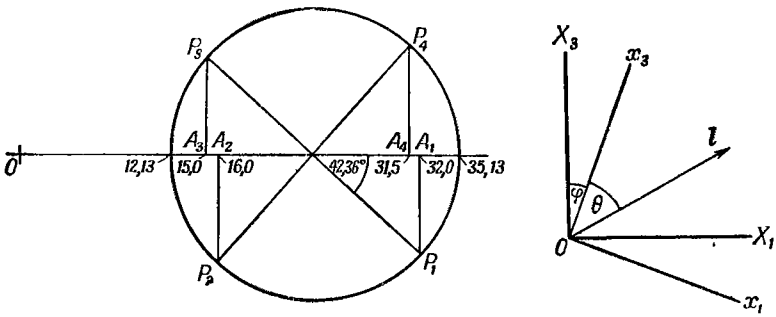
$$\alpha_3 = \frac{1}{2}(\alpha_{11} + \alpha_{33}) + r,$$

т. е.

$$\alpha_1 = 12{,}13 \cdot 10^{-6}\ \textit{град}^{-1},$$

$$\alpha_3 = 35{,}13 \cdot 10^{-6}\ \textit{град}^{-1}.$$

На фиг. 56 показаны на той же окружности Мора четыре измеренных значения теплового расширения, использованные при вычислениях. Направления $\theta = 0$, 45, 90, 135° отмечены соответственно



Фиг. 56. Построение окружности Мора с четырьмя экспериментальными значениями теплового расширения, использованными при вычислениях в § 7, п. 1.

Приведенные числа дают значения $\alpha \cdot 10^6$ *град*$^{-1}$.

точками P_1, P_2, P_3, P_4, а измеренные значения расширений указаны точками A_1, A_2, A_3, A_4.

2. Главные коэффициенты и главные направления для триклинного кристалла. *а) Нахождение коэффициентов в произвольной системе координат.* В качестве другой, более общей иллюстрации описанных выше методов рассмотрим измерение теплового расширения в триклинном кристалле. Так как ориентация главных осей расширения в кристалле заранее неизвестна, выбираем произвольные оси x_1, x_2, x_3[1]) и берем образец в виде куба с ребрами, параллельными этим осям. Коэффициенты расширения измеряются вдоль ребер этого куба и четырех его объемных диагоналей. Направляющие косинусы при этом будут следующими:

$$(1, 0, 0), \quad (0, 1, 0), \quad (0, 0, 1),$$
$$\frac{1}{3}\sqrt{3}(-1, 1, 1), \qquad \frac{1}{3}\sqrt{3}(1, -1, 1),$$
$$\frac{1}{3}\sqrt{3}(1, 1, -1), \qquad \frac{1}{3}\sqrt{3}(1, 1, 1).$$

Используя уравнение, аналогичное (1.33),

$$A = l_i l_j \alpha_{ij} = l_1^2\alpha_{11} + l_2^2\alpha_{22} + l_3^2\alpha_{33} + 2l_2l_3\alpha_{23} + 2l_3l_1\alpha_{31} + 2l_1l_2\alpha_{12},$$

[1]) Рекомендуемая ориентация осей x_1, x_2, x_3 по отношению к кристаллографическим осям дается в правилах, предложенных IRE [86].

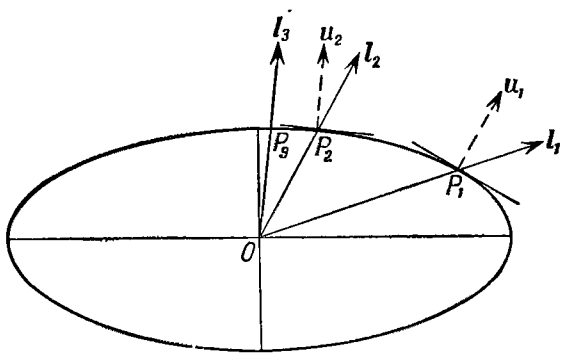
где A — расширение в направлении l_i, получаем в матричной форме

$$\mathbf{A} = \Theta\boldsymbol{\alpha},$$

где

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \\ A_7 \end{pmatrix}, \quad \Theta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{22} \\ \alpha_{33} \\ \alpha_{23} \\ \alpha_{31} \\ \alpha_{12} \end{pmatrix}.$$

(Отметим, что мы не ввели множители 2 в последние три компоненты матрицы $\boldsymbol{\alpha}$, но оставили их в матрице Θ; и то, и другое вполне



Фиг. 57. Построение, поясняющее нахождение главных осей тензора второго ранга методом последовательных приближений.

допустимо.) Так как выполнено семь измерений и имеется только шесть неизвестных, матрица Θ не является квадратной, и для решения этой задачи метод наименьших квадратов нужно видоизменить.

Согласно уравнению (9.35), наилучшие значения $\boldsymbol{\alpha}$ определяются формулой

$$\boldsymbol{\alpha} = (\Theta_t\Theta)^{-1}\Theta_t\mathbf{A}.$$

Предположим, что измеренные расширения имеют следующие значения:

A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7
10	6	3	3	$\frac{13}{3}$	$\frac{17}{3}$	$\frac{37}{3}$

$\cdot 10^{-5}$ *град*$^{-1}$.

Тогда мы получаем

$$\alpha \cdot 10^5 = \begin{pmatrix} \frac{17}{21} & -\frac{4}{21} & -\frac{4}{21} & \frac{1}{7} & \frac{1}{7} & \frac{1}{7} & \frac{1}{7} \\ -\frac{4}{21} & \frac{17}{21} & -\frac{4}{21} & \frac{1}{7} & \frac{1}{7} & \frac{1}{7} & \frac{1}{7} \\ -\frac{4}{21} & -\frac{4}{21} & \frac{17}{21} & \frac{1}{7} & \frac{1}{7} & \frac{1}{7} & \frac{1}{7} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{3}{8} & -\frac{3}{8} & -\frac{3}{8} & \frac{3}{8} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{8} & \frac{3}{8} & -\frac{3}{8} & \frac{3}{8} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{8} & -\frac{3}{8} & \frac{3}{8} & \frac{3}{8} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 10 \\ 6 \\ 3 \\ 3 \\ \frac{13}{3} \\ \frac{17}{3} \\ \frac{37}{3} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 10 \\ 6 \\ 3 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{22} \\ \alpha_{33} \\ \alpha_{23} \\ \alpha_{31} \\ \alpha_{12} \end{pmatrix} \cdot 10^5,$$

или, в виде (3×3)-матрицы,

$$\alpha \cdot 10^5 = \begin{pmatrix} 10 & 4 & 3 \\ 4 & 6 & 2 \\ 3 & 2 & 3 \end{pmatrix}. \tag{9.37}$$

Приведенные выше условные экспериментальные значения были подобраны так, что все они хорошо согласовывались друг с другом. Чтобы показать, как изменятся результаты при наличии неточных данных, заменим в матрице A значение $^{13}/_3$ на 4. Тогда получится следующий результат:

$$(\Theta_t\Theta)^{-1}\Theta_t \begin{pmatrix} 10 \\ 6 \\ 3 \\ 3 \\ 4 \\ \frac{17}{3} \\ \frac{37}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9{,}95 \\ 5{,}95 \\ 2{,}95 \\ 2{,}12 \\ 2{,}87 \\ 4{,}12 \end{pmatrix}.$$

б) Нахождение главных коэффициентов и главных осей. Предположим теперь, что мы имеем наилучшее значение матрицы α, заданное в виде (9.37). Чтобы привести эту матрицу к главным осям, нужно решить кубическое уравнение (см. гл. II, § 3). На практике используется метод последовательных приближений. На фиг. 57 поясняется этот метод, заключающийся в следующем.

Возьмем произвольный единичный вектор и представим его в виде матрицы-столбца $\mathbf{l}_1$. Тогда матрица смещений $\mathbf{u}_1$ для единичного приращения температуры вычисляется из уравнения

$$\mathbf{u}_1 = \alpha \mathbf{l}_1.$$

Из свойств характеристической поверхности второго порядка известно, что направление $\mathbf{u}_1$ совпадает с направлением нормали в точке P_1, в которой $\mathbf{l}_1$ пересекается с характеристической поверхностью. Затем берется новый единичный вектор $\mathbf{l}_2$, параллельный $\mathbf{u}_1$, и вычисляется соответствующая матрица $\mathbf{u}_2$. После этого берется единичный вектор $\mathbf{l}_3$, параллельный $\mathbf{u}_2$, и т. д. Если поверхность второго порядка есть эллипсоид, то векторы сходятся к наименьшей оси, как показано на фиг. 57. В общем случае векторы сходятся к той оси характеристической поверхности второго порядка, которая соответствует главному коэффициенту, имеющему наибольшее численное значение.

Перейдем к нашему численному примеру. Сначала выбираем

$$\mathbf{l}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

поскольку наибольшую величину имеет α_{11} [см. (9.37)]. Тогда получаем

$$\mathbf{u}_1 \cdot 10^5 = \begin{pmatrix} 10 & 4 & 3 \\ 4 & 6 & 2 \\ 3 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Так как существенны только отношения компонент матрицы $\mathbf{u}$, нет необходимости приводить каждый раз длину вектора $\mathbf{l}$ к единице. Поэтому продолжим умножение в следующей форме:

$$\begin{pmatrix} 10 & 4 & 3 \\ 4 & 6 & 2 \\ 3 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 10 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 125 \\ 70 \\ 47 \end{pmatrix};$$

далее, мы последовательно получаем

$$\begin{pmatrix} 1671 \\ 1014 \\ 656 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 22734 \\ 14080 \\ 9009 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 310687 \\ 193434 \\ 123389 \end{pmatrix} \to \ldots$$

Чтобы продемонстрировать сходимость, ниже мы даем последовательные значения компонент вектора $\mathbf{l}$, приведенного к единичной длине,

$$\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}0{,}895\\0{,}358\\0{,}268\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}0{,}828\\0{,}464\\0{,}312\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}0{,}810\\0{,}492\\0{,}318\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}0{,}806\\0{,}499\\0{,}322\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}0{,}803\\0{,}500\\0{,}319\end{pmatrix}\to\ldots$$

Эта последовательность направляющих косинусов сходится к наименьшей оси характеристической поверхности второго порядка, которая соответствует наибольшему главному коэффициенту расширения.

Чтобы найти наименьший главный коэффициент расширения, проделаем те же самые операции с матрицей α^{-1}. Мы имеем

$$\alpha^{-1}\cdot 10^{-5}=\frac{1}{86}\begin{pmatrix}14&-6&-10\\-6&21&-8\\-10&-8&44\end{pmatrix}.$$

Поскольку наибольшим значением является $(\alpha^{-1})_{33}$, в этот раз мы начинаем с

$$\mathbf{l}_1=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}.$$

Последовательные умножения дают

$$\begin{pmatrix}14&-6&-10\\-6&21&-8\\-10&-8&44\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-10\\-8\\44\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-532\\-460\\2\,100\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-25\,788\\-23\,268\\101\,400\end{pmatrix};$$

разделив последнее выражение на 10^6 и продолжив процесс, мы получаем

$$\begin{pmatrix}-1{,}235\\-1{,}146\\4{,}906\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-59{,}47\\-55{,}90\\237{,}38\end{pmatrix}\to\ldots$$

Соответствующая последовательность направляющих косинусов имеет вид

$$\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-0{,}218\\-0{,}175\\0{,}960\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-0{,}240\\-0{,}208\\0{,}949\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-0{,}241\\-0{,}217\\0{,}946\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-0{,}238\\-0{,}220\\0{,}946\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-0{,}237\\-0{,}223\\0{,}945\end{pmatrix}\to\ldots$$

Образовав векторное произведение направляющих косинусов, соответствующих наибольшему и наименьшему коэффициентам, находим направляющие косинусы третьей оси

$$\begin{pmatrix}-0{,}544\\0{,}834\\0{,}061\end{pmatrix}.$$

Находим коэффициент расширения в направлении $\begin{bmatrix} 0{,}803 \\ 0{,}500 \\ 0{,}319 \end{bmatrix}$:

$$\begin{bmatrix} 10 & 4 & 3 \\ 4 & 6 & 2 \\ 3 & 2 & 3 \end{bmatrix} \cdot 10^{-5} \cdot \begin{bmatrix} 0{,}803 \\ 0{,}500 \\ 0{,}319 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10{,}99 \\ 6{,}85 \\ 4{,}37 \end{bmatrix} \cdot 10^{-5}.$$

Длина этого вектора равна $13{,}67 \cdot 10^{-5}$. Аналогично находятся коэффициенты расширения в двух других главных направлениях; они равны $1{,}776 \cdot 10^{-5}$ и $3{,}527 \cdot 10^{-5}$. Для проверки отметим, что при этих значениях мы имеем

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 18{,}973 \cdot 10^{-5};$$

это можно сопоставить со значением $\alpha_{11} + \alpha_{22} + \alpha_{33} = 19 \cdot 10^{-5}$, которое было получено из первоначальной матрицы. Итак, мы получаем следующий окончательный результат для значений и направлений главных коэффициентов расширений:

$\alpha_1 = 13{,}7 \cdot 10^{-5}$ *град*$^{-1}$ в направлении (0,80; 0,50; 0,32),
$\alpha_2 = 3{,}53 \cdot 10^{-5}$ *град*$^{-1}$ в направлении (—0,54; 0,83; 0,06),
$\alpha_3 = 1{,}78 \cdot 10^{-5}$ *град*$^{-1}$ в направлении (—0,24; —0,22; 0,95).

Для более полного ознакомления с численными методами нахождения главных коэффициентов и главных осей см. книгу Хартри [47].

РЕЗЮМЕ

Матричная алгебра (§ 2). *Сложение и вычитание* (§ 2, п. 2). Две матрицы могут складываться или вычитаться, если обе они имеют одинаковое число строк и столбцов. Сумма двух матриц **A** и **B**, обозначаемая через **A** + **B**, есть матрица **C**, элементы которой определяются выражением

$$C_{ij} = A_{ij} + B_{ij}.$$

Правило вычитания аналогично.

Умножение (§ 2, п. 1). Если **A** представляет собой $(m \times n)$-матрицу, а **B** есть $(n \times p)$-матрица, то произведение **AB** есть $(m \times p)$-матрица. Элементы матрицы **AB** задаются в виде

$$(AB)_{ik} = A_{ij}B_{jk}.$$

Линейные преобразования (§ 2, п. 1). Пусть **x** и **y** — соответственно $(m \times 1)$- и $(n \times 1)$-матрицы, связанные уравнением

$$\mathbf{x} = \alpha\mathbf{y}, \tag{9.9}$$

где α — представляет собой $(m \times n)$-матрицу. Пусть матрица $\mathbf{y}$ в свою очередь связана с $(p \times 1)$-матрицей $\mathbf{z}$ уравнением

$$\mathbf{y} = \beta \mathbf{z}, \tag{9.10}$$

где β есть $(n \times p)$-матрица. Тогда матрица $\mathbf{x}$ связана с $\mathbf{z}$ уравнением

$$\mathbf{x} = \alpha\beta\mathbf{z}. \tag{9.11}$$

Общее правило. Матрицы могут складываться, вычитаться и умножаться (но не делиться) подобно обычным числам, но при этом, как правило, $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$.

Транспонированная матрица $\mathbf{A}_t$ (§ 4, п. 1) получается из матрицы $\mathbf{A}$ взаимной заменой столбцов и строк.

Матрица α^{-1} — *обратная* квадратной неособой матрице α (§ 4, п. 2) — есть матрица, удовлетворяющая уравнению

$$\alpha\alpha^{-1} = \alpha^{-1}\alpha = \mathbf{I},$$

где $\mathbf{I}$ — единичная матрица (у такой матрицы элементы, стоящие на главной диагонали, равны 1, а остальные — нулю). При этом ij-й элемент матрицы α^{-1} равен A_{ji}/Δ, где Δ — детерминант из $|\alpha_{ij}|$ и A_{ji} — алгебраическое дополнение α_{ji}.

Свойства кристаллов (§ 3). Пироэлектрический эффект

$$\Delta\mathbf{P} = \mathbf{p}\,\Delta T, \tag{9.14}$$

где $\Delta\mathbf{P}$ и $\mathbf{p}$ представляют собой (3×1)-матрицы, а ΔT — обычное число (1×1).

Тепловое расширение

$$\varepsilon = \alpha\,\Delta T, \tag{9.15}$$

где ε и α есть (6×1)-матрицы.

Диэлектрические соотношения

$$\mathbf{D} = \varkappa\mathbf{E}, \quad \mathbf{E} = \beta\mathbf{D}, \quad \beta = \varkappa^{-1},$$

где $\mathbf{D}$ и $\mathbf{E}$ представляют собой (3×1)-матрицы, а $\varkappa$ и β являются (3×3)-матрицами.

Магнитная индукция

$$\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}, \tag{9.13}$$

где $\mathbf{B}$ и $\mathbf{H}$ представляют собой (3×1)-матрицы и μ есть (3×3)-матрица.

Прямой пьезоэлектрический эффект

$$\mathbf{P} = \mathbf{d}\sigma, \tag{9.17}$$

где $\mathbf{P}$, $\mathbf{d}$ и σ — соответственно (3×1)-, (3×6)- и (6×1)-матрицы.

Обратный пьезоэлектрический эффект

$$\varepsilon = \mathbf{d}_t\mathbf{E},$$

где ε, $\mathbf{d}_t$ и $\mathbf{E}$ — соответственно (6×1)-, (6×3)- и (3×1)-матрицы.

Упругость

$$\mathbf{\varepsilon} = \mathbf{s}\sigma, \quad \sigma = \mathbf{c}\varepsilon, \quad \mathbf{c} = \mathbf{s}^{-1},$$

где $\mathbf{\varepsilon}$ и σ представляют собой (6×1)-матрицы, а $\mathbf{s}$ и $\mathbf{c}$ есть (6×6)-матрицы.

Пусть произвольное направление задается (3×1)-матрицей $\mathbf{l}$ (§ 5). Тогда в этом направлении величина S, характеризующая некоторое свойство, описываемое симметричным тензором второго ранга, заданным (3×3)-матрицей $\mathbf{S}$, определяется следующим образом:

$$S = \mathbf{l}_t \mathbf{S} \mathbf{l}.$$

Преобразование осей координат (§ 6). Преобразование осей координат может быть представлено (3×3)-матрицей $\mathbf{a} = (a_{ij})$. Тогда имеем для координат [(3×1)-матрица]

$$\mathbf{x}' = \mathbf{a}\mathbf{x}; \tag{9.23}$$

для компонент вектора [(3×1)-матрица]

$$\mathbf{p}' = \mathbf{a}\mathbf{p}; \tag{9.24}$$

для компонент тензора $[\varkappa_{ij}]$, представляемого (3×3)-матрицей $\varkappa$,

$$\varkappa' = \mathbf{a}\varkappa\mathbf{a}_t. \tag{9.25}$$

Пример применения метода наименьших квадратов (§ 7). Предположим, что результаты p измерений теплового расширения некоторого кристалла в различных направлениях выписаны в виде $(p \times 1)$-матрицы-столбца $\mathbf{A}$. Тогда они связаны с коэффициентами теплового расширения, записанными в виде (6×1)-матрицы α, уравнением

$$\mathbf{A} = \Theta\alpha, \tag{9.28}$$

где Θ представляет собой $(p \times 6)$-матрицу, образованную направляющими косинусами направлений измерения. Если $p = 6$, то это уравнение легко разрешается относительно α:

$$\alpha = \Theta^{-1}\mathbf{A}. \tag{9.29}$$

Если, однако, $p > 6$, т. е. число измерений больше числа неизвестных, то результаты измерений комбинируются для получения наилучшего значения α. На основании принципа наименьших квадратов можно сказать, что наилучшим значением α является

$$\alpha = \mathbf{R}\mathbf{A}, \quad \text{где} \quad \mathbf{R} = (\Theta_t\Theta)^{-1}\Theta_t.$$

Метод последовательных приближений при нахождении главных осей (§ 7, п. 2б). Предположим, что коэффициенты характеристической поверхности второго порядка заданы в виде (3×3)-матрицы α и нам нужно найти главные оси этой поверхности. Возьмем произвольный радиус-вектор, описываемый (3×1)-матрицей $\mathbf{l}$. Тогда

свойство радиуса-вектора и нормали позволяет найти нормаль $\mathbf{u}$ к поверхности в конце радиуса-вектора:

$$\mathbf{u} = \alpha \mathbf{l}.$$

Возьмем теперь новый радиус-вектор, параллельный $\mathbf{u}$, и найдем соответствующую ему нормаль. Этот процесс можно повторять сколь угодно долго; если поверхность второго порядка — эллипсоид, то векторы сходятся к наименьшей оси. Наибольшую ось можно найти таким же способом, но для обратной матрицы α^{-1}. После этого легко определяется третья ось.

ЗАДАЧИ

1. Образовать произведение $\mathbf{AB}$ двух матриц

$$\mathbf{A} = \begin{Vmatrix} a_1 & c_1 \\ a_2 & c_2 \\ a_3 & c_3 \end{Vmatrix}, \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}.$$

2. Вычислить произведения

$$\begin{Vmatrix} 0 & 3 & 2 \\ 1 & -1 & 3 \\ 2 & 1 & 4 \end{Vmatrix} \times \begin{Vmatrix} 0 & 2 \\ 3 & 1 \\ -2 & 8 \end{Vmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} \times \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -2 & 0 \end{Vmatrix}.$$

3. Пусть $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ — матрицы; показать, что в общем случае $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$, вычислив для этого два произведения

$$(2\ \ 3) \times \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix} \times (2\ \ 3).$$

4. Пользуясь методами матричной алгебры, проверить правильность приведенных на стр. 372—373 ответов к задачам 4, а—г, гл. II (см. стр. 69); осуществить при этом в каждом случае указанный поворот осей координат.

5. Проверить, действительно ли главные коэффициенты расширения являются корнями векового уравнения (см. гл. II, § 3)

$$|\alpha_{ij} - \lambda \delta_{ij}| = 0.$$

Глава X

ТЕРМОДИНАМИКА РАВНОВЕСНЫХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ [1])

В предыдущих главах мы имели дело с тепловыми, электрическими и механическими свойствами кристалла, причем каждое из этих свойств рассматривалось вне связи с остальными. В действительности, эти свойства связаны друг с другом; обсуждению вопроса об их взаимозависимости и посвящена настоящая глава. Единое рассмотрение этих свойств возможно потому, что все они относятся к равновесному состоянию. Это означает, что при измерении таких свойств кристалл может находиться в равновесии с окружающей средой, так что ни состояние кристалла, ни состояние окружающей среды не изменяются со временем; иными словами, мы можем сказать, что эти свойства относятся к термодинамически обратимым изменениям. В гл. XI и XII будут обсуждаться свойства, характеризующие явления переноса, для которых такое рассмотрение неприменимо.

§ 1. Тепловые, электрические и механические свойства кристалла

Соотношения между свойствами, которые мы будем рассматривать, иллюстрируются диаграммой, представленной на фиг. 58а и 58б [2]). В трех вершинах внешнего треугольника стоят символы температуры T, напряженности электрического поля E_i и напряжений σ_{ij}; эти величины можно считать „силами“, приложенными к кристаллу. В трех соответствующих вершинах внутреннего треугольника стоят символы S — энтропия на единицу объема, D_i — электрическая индукция и ε_{ij} — деформация. Эти величины являются прямым результатом действия соответствующих сил. Жирные линии, соединяющие попарно соответствующие внутренние и внешние вершины, означают три так называемых *главных эффекта*.

1) При обратимом процессе возрастание температуры вызывает в единичном объеме изменение энтропии, определяемое соотношением

$$dS = \frac{C}{T}\,dT, \tag{10.1}$$

[1]) Эта глава может быть опущена при первом чтении.

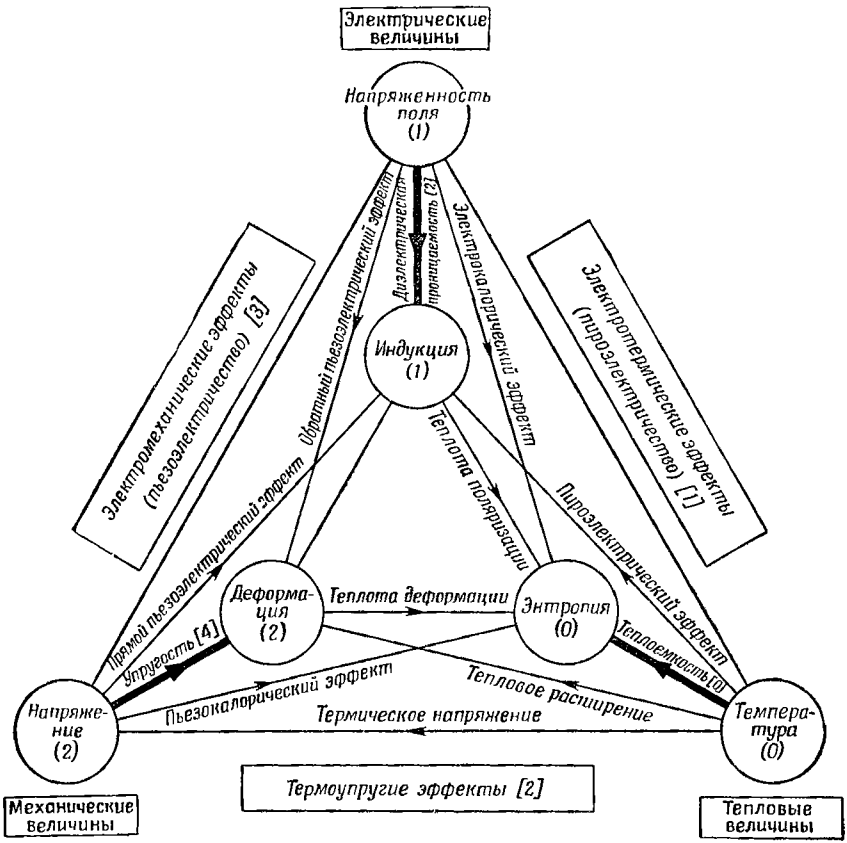
[2]) Эта диаграмма является развитием диаграммы, данной Хекманом [51].

где скаляр C — теплоемкость на единицу объема, а T — абсолютная температура.

2) Малое изменение напряженности электрического поля dE_i вызывает изменение электрической индукции dD_i согласно соотношению

$$dD_i = \varkappa_{ij}\, dE_j, \tag{10.2}$$

где $\varkappa_{ij}$ — тензор диэлектрической проницаемости (см. гл. IV).



Фиг. 58а. Соотношение между тепловыми, электрическими и механическими свойствами кристалла.

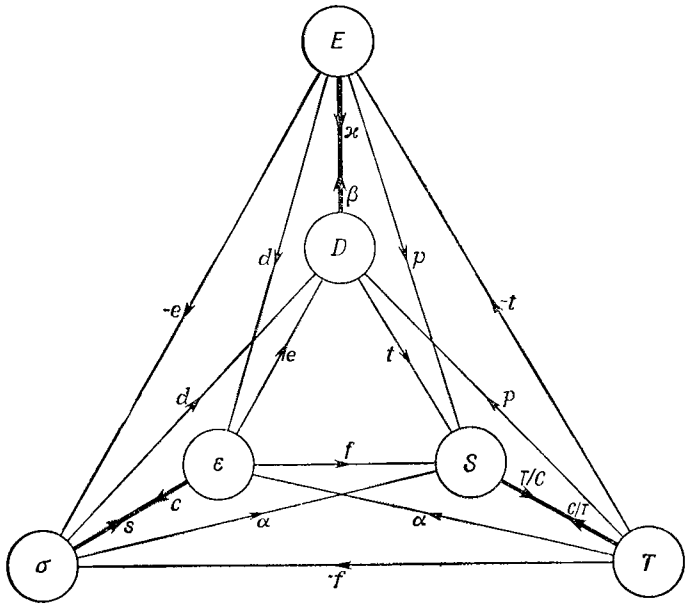
Для независимых переменных ранг тензоров указан в круглых скобках, а для свойств — в квадратных скобках.

3) Малое изменение напряжений $d\sigma_{kl}$ вызывает изменение деформаций $d\varepsilon_{ij}$, описываемое соотношением

$$d\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\, d\sigma_{kl} \tag{10.3}$$

где s_{ijkl} упругие податливости (см. гл. VIII).

Рассматриваемая диаграмма иллюстрирует также эффекты, которые мы назовем *сопряженными* (coupled effects). Они обозначены линиями, соединяющими точки, лежащие в разных углах внешнего и внутреннего треугольников. Рассмотрим, например, две диагональные линии в нижней части диаграммы. Одна из них обозначает *тепловое расширение* (деформацию, вызванную изменением температуры), а другая соответствует *пьезокалорическому эффекту*, т. е.



Фиг. 58б. Соотношения между величинами, характеризующими тепловые, электрические и механические свойства кристалла.

выделению тепла (изменению энтропии) под действием механического напряжения. Две горизонтальные линии в нижней части диаграммы обозначают тепло, которое выделяется при деформировании (*теплота деформации*), и *термическое напряжение*, возникающее при изменении температуры кристалла (и при запрещенных деформациях). Указанные сопряженные эффекты выражают соотношения между скалярами и тензорами второго ранга, а поэтому и сами представляются тензорами второго ранга. Так, для теплового расширения (см. гл. VI) уравнение имеет вид

$$d\varepsilon_{ij} = \alpha_{ij}\, dT. \qquad (10.4)$$

Левая часть диаграммы иллюстрирует сопряженные эффекты, относящиеся к пьезоэлектрическим свойствам кристаллов (см. гл. VII). Прямой пьезоэлектрический эффект описывается в дифференциальной форме уравнением

$$dP_i = d_{ijk}\, d\sigma_{jk}. \qquad (10.5)$$

Так как, согласно формуле (4.1),

$$D_i = \varkappa_0 E_i + P_i,$$

то

$$dP_i = dD_i - \varkappa_0\, dE_i.$$

Следовательно, если электрическое поле в кристалле поддерживается постоянным, то $dP_i = dD_i$, и мы можем записать уравнение (10.5) в виде

$$dD_i = d_{ijk}\, d\sigma_{jk} \qquad (\boldsymbol{E} = \text{const}). \tag{10.6}$$

Для описания прямого эффекта можно использовать как уравнение (10.5), так и (10.6).

Таким образом, прямой и обратный пьезоэлектрические эффекты изображаются диагоналями в левой части диаграммы. Легко видеть, что эти линии изображают две из четырех возможных зависимостей между электрическим полем, электрической индукцией, напряжением и деформацией в пьезоэлектрическом кристалле. Два других соотношения связывают деформацию с индукцией и механическое напряжение с напряженностью поля. Так как эти сопряженные эффекты характеризуются зависимостью между тензорами первого ранга (E_i или D_i) и тензорами второго ранга (σ_{ij} или ε_{ij}), то сами они описываются тензорами третьего ранга.

Правая часть диаграммы иллюстрирует сопряженные эффекты, относящиеся к пироэлектрическим явлениям (см. гл. IV, § 7). Они характеризуются зависимостями между вектором (D_i или E_i) и скаляром (S или T) и, следовательно, выражаются тензорами первого ранга. Уравнение пироэлектрического эффекта можно записать в виде

$$dP_i = p_i\, dT. \tag{10.7}$$

Если теперь положить, что при изменении температуры кристалла электрическое поле в нем поддерживается постоянным, то

$$dD_i = p_i\, dT \qquad (\boldsymbol{E} = \text{const}). \tag{10.8}$$

Таким образом, пироэлектрический эффект (при постоянном поле) можно рассматривать как электрическую поляризацию, или электрическую индукцию, вызванную изменением температуры. Одна из двух диагоналей в правой части диаграммы изображает пироэлектрический эффект, а другая — *электрокалорический эффект*, т. е. изменение энтропии (количества тепла), вызванное действием электрического поля. Еще одна линия показывает, что при изменении электрической индукции происходит выделение тепла (изменение энтропии); это так называемая *теплота поляризации*; имеется также зависимость между температурой и полем, аналогичная термическому напряжению. Этим мы заканчиваем описание диаграмм, показанных на фиг. 58а и 58б.

Таким образом, все рассмотренные свойства кристаллов оказываются взаимосвязанными. При обсуждении зависимостей между ними необходимо точно установить, при каких условиях должны проводиться измерения. Например, упругие податливости можно измерять как при изотермических, так и при адиабатических условиях; при этом получатся разные экспериментальные результаты (как правило, расхождение составляет около 1%). Далее, теплоемкость кристалла обычно измеряется при постоянном (нулевом) давлении, хотя с теоретической (но не с экспериментальной) точки зрения можно измерять ее и при постоянных деформациях; значения при постоянных напряжениях и при постоянных деформациях будут слегка различаться.

Явления первичного и вторичного пироэлектричества (см. гл. IV, § 7) служат примером сильного взаимодействия между различными свойствами кристаллов. Обращаясь к фиг. 58б, мы видим, что при изменении температуры возникает электрическая индукция (пироэлектрический эффект, обусловленный непосредственной связью $T \to D$). Однако наряду с этим возможны и другие (косвенные) пути: например, $T \to \varepsilon \to D$; иными словами, электрическая индукция может быть обусловлена комбинацией теплового расширения и пьезоэлектрического эффекта. Возможность осуществления второго пути зависит от того, может ли кристалл деформироваться или нет.

Из приведенных примеров ясно, что тепловые, электрические и механические свойства кристалла следует рассматривать совместно. Чтобы понять взаимозависимость этих свойств, надо изучить термодинамику соответствующих процессов. Это позволит нам получить точные выражения для величин, характеризующих рассматриваемые свойства, и вывести ряд новых соотношений между коэффициентами.

§ 2. Термодинамика термоупругих свойств

Поясним метод термодинамического исследования на следующем простом примере. Возьмем кристалл, не обладающий пьезо- или пироэлектрическими свойствами (этим условиям удовлетворяет кристалл, имеющий центр симметрии), и рассмотрим его термоупругие свойства. Нам теперь потребуется лишь нижняя часть диаграммы, изображенной на фиг. 58а и 58б; она показана отдельно на фиг. 59, *а* и *б*.

Возьмем в качестве независимых переменных девять компонент напряжений σ_{ij} и температуру T. Тогда состояние кристалла (в частности, компоненты деформаций ε_{ij} и энтропия S) будет определяться заданием десяти величин σ_{ij} и T. С таким же правом за независимые переменные можно принять десять величин (ε_{ij}, S), или (σ_{ij}, S), или (ε_{ij}, T). Ясно, что выбор в качестве независимых переменных только (S, T) (число переменных равно двум) невозможен. Таким образом, мы имеем:

независимые переменные (10) σ_{ij}, T,
зависимые переменные ε_{ij}, S и т. д.

В соответствии с этим, рассматривая единичный объем, мы можем записать

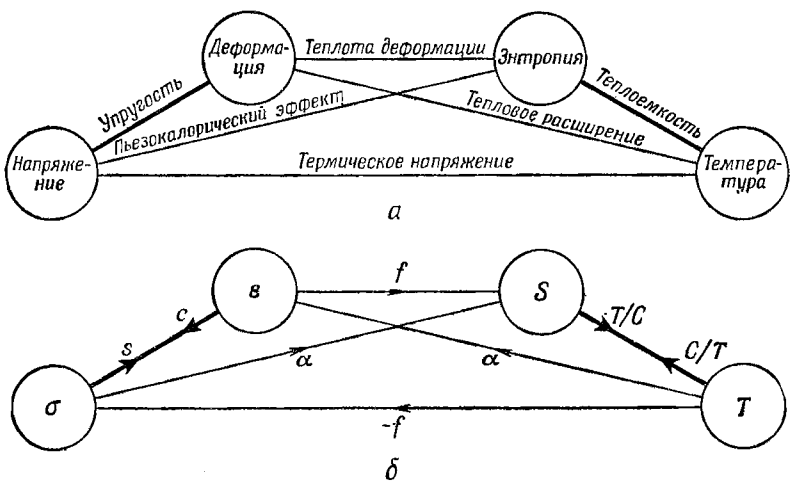
$$d\varepsilon_{ij} = \underbrace{\left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{kl}}\right)_T d\sigma_{kl}}_{\text{упругость}} + \underbrace{\left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial T}\right)_\sigma dT}_{\text{тепловое расширение}}, \tag{10.9}$$

$$dS = \underbrace{\left(\frac{\partial S}{\partial \sigma_{kl}}\right)_T d\sigma_{kl}}_{\text{пьезокалорический эффект}} + \underbrace{\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_\sigma dT}_{\text{теплоемкость}}. \tag{10.10}$$

В этих уравнениях применено обычное правило суммирования (см. гл. I, § 1, п. 1). Так, первый член в правой части уравнения (10.9) представляет собой сумму девяти членов

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{kl}}\right)_T d\sigma_{kl} = \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{11}}\right) d\sigma_{11} + \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{12}}\right) d\sigma_{12} + \ldots;$$

здесь дифференцирование по каждой компоненте напряжения проводится при *постоянных остальных компонентах напряжения*



Фиг. 59. Относящиеся к термоупругим свойствам части диаграмм, изображенных на фиг. 58а и 58б.

и постоянной температуре. Символ σ, стоящий в качестве индекса при члене $(\partial \varepsilon_{ij}/\partial T)_\sigma$, означает, что дифференцирование по T проводится при *всех* $\sigma_{ij} = \text{const}$. Так как i и j могут принимать значения 1, 2, 3, то уравнение (10.9) заменяет девять уравнений; в целом уравнения (10.9) и (10.10) символизируют десять уравнений, каждое из которых имеет десять членов в правой части.

Все четыре производные, стоящие в уравнениях (10.9) и (10.10), имеют конкретный физический смысл. Если в уравнении (10.9) положить $dT=0$ и сравнить его с уравнением (10.3), то легко видеть, что $(\partial\varepsilon_{ij}/\partial\sigma_{kl})_T$ являются изотермическими упругими податливостями, которые можно обозначить через s^T_{ijkl}; впредь верхний индекс всегда будет обозначать величину, остающуюся постоянной. Полагая $d\sigma_{kl}=0$ и сравнивая с уравнением (10.4), мы видим, что $(\partial\varepsilon_{ij}/\partial T)_\sigma$ являются коэффициентами теплового расширения α_{ij}, измеренными при постоянном напряжении. [Нет необходимости ставить индекс σ при α_{ij} и писать α^σ_{ij}, так как возможный, на первый взгляд, другой коэффициент $(\partial\varepsilon_{ij}/\partial T)_S$ оказывается бессмысленным; введение такого коэффициента означало бы, что каждая компонента ε_{ij} есть функция только двух переменных T и S, а не десяти.] Коэффициент $(\partial S/\partial\sigma_{kl})_T$ измеряет возрастание энтропии, вызванное приложенным напряжением, при постоянной температуре. Умноженный на T, он характеризует пьезокалорический эффект — тепло, выделяющееся при изотермическом сжатии кристалла. Величина $T(\partial S/\partial T)_\sigma$ определяет тепло, выделяющееся при изменении температуры, при постоянном напряжении, т. е. представляет собой теплоемкость C^σ на единицу объема при постоянном напряжении (ср. теплоемкость газа при постоянном давлении).

Вследствие взаимодействия между четырьмя только что описанными эффектами четыре дифференциальных коэффициента в уравнениях (10.9) и (10.10) не независимы. Для нахождения соотношений между ними рассмотрим энергию системы. Из первого закона термодинамики известно, что если кристалл (считаем его объем единичным) поглотит небольшое количество тепла dQ, а внешние силы произведут над ним элементарную работу dW, то приращение его внутренней энергии dU есть полный дифференциал, записываемый в виде

$$dU=dW+dQ. \tag{10.11}$$

Работа на единицу объема при изменении деформаций на малые величины $d\varepsilon_{ij}$ определяется уравнением (см. гл. VIII, § 3)

$$dW=\sigma_{ij}\,d\varepsilon_{ij}. \tag{10.12}$$

Для обратимого процесса, согласно второму закону термодинамики, справедливо уравнение

$$dQ=T\,dS. \tag{10.13}$$

Поэтому уравнение (10.11) принимает вид

$$dU=\sigma_{ij}\,d\varepsilon_{ij}+T\,dS. \tag{10.14}$$

Вместо функции U, которая удобна, когда независимыми переменными являются (ε_{ij}, S), мы рассмотрим теперь функцию Φ [1]), определяемую [2]) уравнением

$$\Phi = U - \sigma_{ij}\varepsilon_{ij} - TS. \tag{10.15}$$

(Член $\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}$ обозначает сумму девяти отдельных членов.) Дифференцирование дает

$$d\Phi = dU - \sigma_{ij}\, d\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}\, d\sigma_{ij} - T\, dS - S\, dT,$$

откуда, используя уравнение (10.14), получаем

$$d\Phi = -\varepsilon_{ij}\, d\sigma_{ij} - S\, dT. \tag{10.16}$$

Теперь в уравнении (10.15) для функции Φ все величины являются функциями параметров σ_{ij} и T, которыми, как мы условились, определяется состояние кристалла. Поэтому Φ также является функцией параметров σ_{ij} и T, и из уравнения (10.16) имеем

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\sigma_{ij}}\right)_T = -\varepsilon_{ij}, \qquad \left(\frac{\partial\Phi}{\partial T}\right)_\sigma = -S. \tag{10.17}$$

Дифференцируя первое из этих уравнений по T, а второе по σ_{ij} (при постоянных T и всех σ_{ij}, кроме одного), мы получаем важное *термодинамическое соотношение*

$$-\frac{\partial^2\Phi}{\partial\sigma_{ij}\,\partial T} = \left(\frac{\partial\varepsilon_{ij}}{\partial T}\right)_\sigma = \left(\frac{\partial S}{\partial\sigma_{ij}}\right)_T. \tag{10.18}$$

Из уравнений (10.9) и (10.10) видно, что мы установили соотношение между коэффициентами теплового расширения и коэффициентами, определяющими пьезокалорический эффект. Этот существенный результат термодинамического анализа показывает, что *матрицы коэффициентов в правых частях уравнений* (10.9) *и* (10.10) *симметричны.*

Уравнения (10.9) и (10.10) применимы независимо от того, являются ли описываемые ими четыре свойства кристаллов линейными

---

[1]) Эту термодинамическую функцию принято называть *полным термодинамическим потенциалом.* — *Прим. перев.*

[2]) Так как уравнения (10.11) и (10.13) описывают только *изменения* U и S, эти величины содержат произвольные постоянные, характеризующие соответственно внутреннюю энергию и энтропию в некотором фиксированном начальном состоянии (которое можно определить, задав начальные напряжения и температуру). Однако то состояние, относительно которого следует отсчитывать деформации ε_{ij}, еще не задано. Чтобы придать определенность значениям U, S и ε_{ij}, будем считать, что фиксированное состояние одинаково для всех трех величин; в частности, будем считать, что U, S и ε_{ij} одновременно обращаются в нуль, когда кристалл находится в некотором данном состоянии. Из уравнения (10.15) следует, что при этих условиях Φ также обращается в нуль.

или нет. Однако в достаточно малой области изменения переменных эти свойства всегда будут линейными, поэтому для малых напряжений и малых изменений температуры (т. е. *для эффектов первого порядка*) уравнения (10.9) и (10.10) можно проинтегрировать. Это дает

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} &= s^T_{ijkl}\sigma_{kl} + \alpha_{ij}\Delta T, \\ \Delta S &= \alpha_{ij}\sigma_{ij} + \frac{C^\sigma}{T}\Delta T; \end{aligned} \tag{10.19}$$

здесь коэффициенты постоянны (ε_{ij} считается равным нулю при $\sigma_{kl} = \Delta T = 0$). В двухиндексных обозначениях, описанных в гл. VII—IX, уравнения (10.19) можно записать в более краткой форме

$$\begin{aligned} \varepsilon_i &= s^T_{ij}\sigma_j + \alpha_i \Delta T, \\ \Delta S &= \alpha_j\sigma_j + \frac{C^\sigma}{T}\Delta T; \end{aligned} \tag{10.20}$$

здесь α_i — матричные элементы уравнения (9.16). Наиболее компактно эти соотношения записываются при использовании буквенных символов для обозначения матриц (см. гл. IX). Тогда мы получаем

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \mathbf{s}^T\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\alpha}\,\Delta T, \\ \Delta S &= \boldsymbol{\alpha}_t\boldsymbol{\sigma} + \frac{C^\sigma}{T}\Delta T. \end{aligned} \tag{10.21}$$

Отметим, что матрица $\boldsymbol{\alpha}_t$ (матрица-строка), стоящая во втором уравнении, не есть матрица $\boldsymbol{\alpha}$.

1. Теплота деформации и термические напряжения. Мы рассмотрели четыре эффекта, описываемые четырьмя дифференциальными коэффициентами, стоящими в уравнениях (10.9) и (10.10). Так как мы условились считать независимыми переменными σ_{ij} и T, то каждый из этих четырех эффектов характеризуется линией, связывающей величину, стоящую в верхней части фиг. 59, *а* или *б* с величиной в нижней ее части. Однако имеются две другие зависимости, которые можно исследовать: между ε_{ij} и S и между σ_{ij} и T. Первый эффект состоит в выделении тепла (изменение энтропии) при деформации; для изотермического процесса количество этого тепла определяется коэффициентом $T\,(\partial S/\partial\varepsilon_{ij})_T$. Второй эффект состоит в том, что изменение температуры вызывает механические напряжения [1]).

[1]) Некоторые авторы (например, Кэди [24]) считают, что когда кристалл деформирован за счет пьезоэлектрического эффекта или нагревания, то деформации вызываются „внутренним напряжением". Чтобы понять, как возникает такое представление, сделаем следующее предположение: пусть свободный кристалл нагревается так, что он расширяется в определенном направлении. Приложенные напряжения, а следовательно, и напряжения в кристалле (в соответствии с нашим определением) равны нулю, хотя деформации и не равны нулю. Можно считать, что это расширение вызывается не изменением

Эти напряжения в случае зажатого кристалла, т. е. при отсутствии деформаций, определяются коэффициентами $(\partial\sigma_{ij}/\partial T)_\varepsilon$. Названные эффекты являются сопряженными, и между коэффициентами теплоты деформации и коэффициентами термического напряжения имеется соотношение, так же как между коэффициентами теплового расширения и пьезоэлектрическими коэффициентами. Соотношение между ними можно получить из выражения для термодинамической функции, называемой свободной энергией Гельмгольца:

$$\Psi = U - TS. \tag{10.22}$$

Дифференцируя это выражение и используя (10.14), получаем

$$d\Psi = \sigma_{ij}\, d\varepsilon_{ij} - S\, dT. \tag{10.23}$$

Условия того, что $d\Psi$ является полным дифференциалом [ср. (10.16) и (10.18)], имеют вид

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \varepsilon_{ij}}\right)_T = -\left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial T}\right)_\varepsilon = f_{ij}; \tag{10.24}$$

это и есть искомое термодинамическое соотношение.

Таким образом, схема коэффициентов для свойств, представленных на фиг. 59, *а*, имеет такой вид, как показано на фиг. 59, *б* (нижние и верхние индексы опущены). Не все коэффициенты независимы; действительно, для определения всех термоупругих эффектов первого порядка достаточно трех тензоров: s^T_{ijkl}, α_{ij} и C^σ/T, входящих в уравнения (10.19).

2. Соотношение между адиабатическими и изотермическими упругими податливостями. Выражение для разности между упругими податливостями, измеренными при адиабатических и при изотермических условиях, можно получить следующим способом. Исключим

температуры, а некоторым „объемиым" напряжением растяжения, хотя такое напряжение реально не существует. Это фиктивное напряжение, называемое „внутренним напряжением", равно по величине и противоположно реальному напряжению (давлению), возникающему при изменении температуры в зажатом кристалле. В данной книге мы старались не применять представления о фиктивных напряжениях, так как с нашей точки зрения оно не является особенно полезным и приводит скорее к запутыванию вопроса, чем к его выяснению. При одиородном напряженном состоянии, рассматриваемом в настоящей главе, напряжения в кристалле непосредственно определяются силами, приложенными к его поверхности (кроме очень малых электрострикционных напряжений, вызываемых поверхностными зарядами). Если на кристалл действуют силы растяжения, то и напряжения будут напряжениями растяжения, если действуют сжимающие силы, то возникают сжимающие напряжения; если же поверхность кристалла свободна, то из условий равновесия следует, что в нем нет напряжений.

Фиктивное внутреннее напряжение в вышеуказанном смысле, конечно, совершеино отлично от реальных внутренних напряжений, возникающих в кристалле при неоднородном нагреве или пластической деформации.

dT из уравнений (10.9) и (10.10) и положим $dS = 0$. Тогда получим

$$de_{ij} = \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{kl}}\right)_T d\sigma_{kl} - \frac{(\partial \varepsilon_{ij}/\partial T)_\sigma (\partial S/\partial \sigma_{kl})_T \, d\sigma_{kl}}{(\partial S/\partial T)_\sigma} \qquad (S = \text{const}).$$

Разделив это выражение на $d\sigma_{kl}$, находим, учитывая соотношение (10.18),

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{kl}}\right)_S - \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{kl}}\right)_T = -\left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial T}\right)_\sigma \left(\frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial T}\right)_\sigma \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_\sigma. \qquad (10.25)$$

Это соотношение можно записать в форме

$$s^S_{ijkl} - s^T_{ijkl} = -\alpha_{ij}\alpha_{kl}\frac{T}{C^\sigma}. \qquad (10.26)$$

Поскольку обычно, хотя и не всегда (см. гл. VI), коэффициенты теплового расширения положительны, а C^σ — величина существенно положительная, то правая часть соотношения (10.26) обычно отрицательна. Следовательно, адиабатические податливости меньше изотермических. Этот факт можно интерпретировать следующим образом. При эксперименте в адиабатических условиях приложение напряжения *растяжения* вызывает *падение* температуры, а это приводит к *уменьшению* деформации. Тогда полная деформация, возникающая при данном напряжении, оказывается меньше, чем при измерении в изотермических условиях; соответственно меньше и адиабатическая податливость.

Аналогичным способом можно найти выражение для разности между теплоемкостями при постоянной деформации и при постоянном напряжении, подобное соотношению (10.26).

§ 3. Термодинамика тепловых, электрических и упругих свойств

Термодинамические методы, описанные в предыдущем параграфе, применимы и к более общему случаю (см. фиг. 58а и 58б), когда, кроме взаимодействия между тепловыми и упругими эффектами, следует учитывать и электрические эффекты [1]).

В качестве независимых переменных ниже мы, как правило, будем использовать (σ_{ij}, E_i, T) — величины, стоящие в вершинах внешнего треугольника на фиг. 58б; ε_{ij}, D_i, S и т. д. будут зависимыми переменными. Такой выбор является удобным, хотя и не единственно возможным; например, в некоторых случаях более естественно считать заданными деформации кристаллической решетки, а не напряжения. Другие варианты выбора независимых переменных: (ε_{ij}, E_i, T),

[1]) Дальнейшее обобщение с учетом магнитных эффектов см. в книге Кэди [24]. В этом случае треугольная диаграмма, изображенная на фиг. 58а и 58б, превращается в тетраэдр.

(σ_{ij}, E_l, S) или (σ_{ij}, D_l, T) и т. д.; при этом из каждого угла диаграммы на фиг. 58б берется по одной величине. В каждом случае оказывается тринадцать независимых переменных. Если же выбрать такие величины, как (E_l, D_l, S), то мы будем иметь только семь переменных, что невозможно; по этой причине следует избегать употребления таких не имеющих смысла коэффициентов, как $(\partial\varepsilon_{ij}/\partial E_k)_{D,\,S}$.

Если в качестве независимых переменных выбрать (σ_{ij}, E_l, T), то дифференциалы ε_{ij}, D_l и S можно записать в виде:

упругость — обратный пьезоэлектрический эффект — тепловое расширение

$$d\varepsilon_{ij}=\left(\frac{\partial\varepsilon_{ij}}{\partial\sigma_{kl}}\right)_{E,\,T}d\sigma_{kl}+\left(\frac{\partial\varepsilon_{ij}}{\partial E_k}\right)_{\sigma,\,T}dE_k+\left(\frac{\partial\varepsilon_{ij}}{\partial T}\right)_{\sigma,\,E}dT, \quad (10.27)$$

прямой пьезоэлектрический эффект — диэлектрическая проницаемость — пироэлектрический эффект

$$dD_l=\left(\frac{\partial D_l}{\partial\sigma_{jk}}\right)_{E,\,T}d\sigma_{jk}+\left(\frac{\partial D_l}{\partial E_j}\right)_{\sigma,\,T}dE_j+\left(\frac{\partial D_l}{\partial T}\right)_{\sigma,\,E}dT, \quad (10.28)$$

пьезокалорический эффект — электрокалорический эффект — теплоемкость

$$dS=\left(\frac{\partial S}{\partial\sigma_{ij}}\right)_{E,\,T}d\sigma_{ij}+\left(\frac{\partial S}{\partial E_l}\right)_{\sigma,\,T}dE_l+\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\sigma,\,E}dT. \quad (10.29)$$

Таким образом, мы имеем $9+3+1=13$ уравнений, в каждом из которых в правой части содержатся $9+3+1=13$ членов. Каждый из дифференциальных коэффициентов характеризует определенный физический эффект, указанный над ним. Как легко видеть, по главной диагонали в правой части системы (10.27)—(10.29) стоят коэффициенты, которые характеризуют главные эффекты, остальные же коэффициенты относятся к сопряженным эффектам. Применяя тот же способ, что и в § 2, мы найдем теперь термодинамические соотношения между коэффициентами приведенных трех уравнений.

Чтобы уравнение (10.12) описывало работу электрических сил при малом изменении состояния системы, к нему следует добавить еще один член. В гл. IV, § 4, показано, что этим членом является $E_l\,dD_l$ [1]). Так как все изменения предполагаются обратимыми, то из первого и второго законов термодинамики следует

$$dU=\sigma_{ij}\,d\varepsilon_{ij}+E_l\,dD_l+T\,dS. \quad (10.30)$$

---

[1]) В гл. IV использовалось выражение $vE_l\,dD_l$, где v — объем кристалла; при этом считалось, что поле должно быть целиком заключено в кристалле. В приложении 6 вычисления проведены так, что это ограничение может быть снято.

Если взять функцию Ф, определяемую уравнением

$$\Phi = U - \sigma_{ij}\varepsilon_{ij} - E_i D_i - TS, \tag{10.31}$$

то, дифференцируя (10.31) и используя (10.30), получаем

$$d\Phi = -\varepsilon_{ij}\, d\sigma_{ij} - D_i\, dE_i - S\, dT. \tag{10.32}$$

В уравнении (10.31) все величины в правой части являются функциями переменных (σ_{ij}, E_i, T), определяющих состояние системы. Следовательно, Ф также является функцией (σ_{ij}, E_i, T), и мы можем записать

$$d\Phi = \left(\frac{\partial\Phi}{\partial\sigma_{ij}}\right)_{E,T} d\sigma_{ij} + \left(\frac{\partial\Phi}{\partial E_i}\right)_{\sigma,T} dE_i + \left(\frac{\partial\Phi}{\partial T}\right)_{\sigma,E} dT. \tag{10.33}$$

Сравнивая коэффициенты в уравнениях (10.32) и (10.33), получаем

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\sigma_{ij}}\right)_{E,T} = -\varepsilon_{ij}, \quad \left(\frac{\partial\Phi}{\partial E_i}\right)_{\sigma,T} = -D_i, \quad \left(\frac{\partial\Phi}{\partial T}\right)_{\sigma,E} = -S. \tag{10.34}$$

Продифференцировав первое из этих уравнений по E_k, а второе по σ_{ij}, после замены индекса i на k находим

$$-\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\sigma_{ij}\,\partial E_k}\right)_T = \left(\frac{\partial\varepsilon_{ij}}{\partial E_k}\right)_{\sigma,T} = \left(\frac{\partial D_k}{\partial\sigma_{ij}}\right)_{E,T} = d^T_{kij}. \tag{10.35}$$

Аналогичным способом получаем

$$-\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\sigma_{ij}\,\partial T}\right)_E = \left(\frac{\partial\varepsilon_{ij}}{\partial T}\right)_{\sigma,E} = \left(\frac{\partial S}{\partial\sigma_{ij}}\right)_{E,T} = \alpha^E_{ij} \tag{10.36}$$

и

$$-\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial E_i\,\partial T}\right)_\sigma = \left(\frac{\partial D_i}{\partial T}\right)_{\sigma,E} = \left(\frac{\partial S}{\partial E_i}\right)_{\sigma,T} = p^\sigma_i. \tag{10.37}$$

Из этих трех уравнений следует, что матрица коэффициентов, стоящих в правой части систем уравнений (10.27)—(10.29), симметрична относительно главной диагонали. В частности, из этих уравнений видно, что:

а) коэффициенты прямого и обратного пьезоэлектрических эффектов равны друг другу;

б) коэффициенты теплового расширения равны коэффициентам пьезокалорического эффекта;

в) коэффициенты пироэлектрического эффекта равны коэффициентам электрокалорического эффекта.

Эти равенства отражены на фиг. 58б, где около каждой линии, изображающей определенную зависимость, указан коэффициент, характеризующий эту зависимость (индексы у коэффициентов опущены).

В интегральной форме уравнения (10.27)—(10.29) можно записать в виде [1])

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij} &= s^{E,T}_{ijkl}\sigma_{kl} + d^{T}_{klj}E_k + \alpha^{E}_{ij}\Delta T, \\ D_i &= d^{T}_{ijk}\sigma_{jk} + \nu^{\sigma,T}_{ij}E_j + p^{\sigma}_{i}\Delta T, \\ \Delta S &= \alpha^{E}_{ij}\sigma_{ij} + p^{\sigma}_{i}E_i + \frac{C^{\sigma,E}}{T}\Delta T. \end{aligned} \tag{10.38}$$

В этих уравнениях ε_{ij} и D_i должны рассчитываться относительно их значений при нулевых напряжениях, напряженности поля и начальной температуре.

Сводка результатов, полученных на основе термодинамического рассмотрения. Дадим теперь краткий обзор полученных выше результатов, отбросив все индексы, чтобы отчетливее выступило основное содержание полученных соотношений. (Очевидно, что при этом мы проигрываем в строгости, но такова неизбежная цена, которой мы должны расплачиваться за краткость).

Возьмем σ (девять компонент), E (три компоненты) и T в качестве независимых переменных, определяющих термодинамическое состояние. Тогда ε (девять компонент), D (три компоненты) и S будут функциями σ, E и T. Следовательно,

$$\begin{aligned} d\varepsilon &= \frac{\partial\varepsilon}{\partial\sigma}d\sigma + \frac{\partial\varepsilon}{\partial E}dE + \frac{\partial\varepsilon}{\partial T}dT, \\ dD &= \frac{\partial D}{\partial\sigma}d\sigma + \frac{\partial D}{\partial E}dE + \frac{\partial D}{\partial T}dT, \\ dS &= \frac{\partial S}{\partial\sigma}d\sigma + \frac{\partial S}{\partial E}dE + \frac{\partial S}{\partial T}dT; \end{aligned} \tag{10.39}$$

здесь частные производные имеют смысл упругих податливостей, пьезоэлектрических коэффициентов, коэффициентов теплового расширения и т. д. Из первого и второго законов термодинамики вытекает, что

$$dU = \sigma\, d\varepsilon + E\, dD + T\, dS. \tag{10.40}$$

Введем функцию

$$\Phi = U - \sigma\varepsilon - ED - TS.$$

Дифференцируя ее и используя уравнение (10.40), получаем

$$d\Phi = -\varepsilon\, d\sigma - D\, dE - S\, dT. \tag{10.41}$$

---

[1]) Число индексов можно несколько уменьшить, если при термодинамическом исследовании использовать матричные, а не тензорные обозначения. Тензорные обозначения выбраны потому, что они непосредственно показывают ранг тензора, описывающего свойство, а также потому, что они носят общий характер и легко могут быть распространены на тензоры любого ранга. Наоборот, матричные обозначения неудобны для записи тензоров выше четвертого ранга, необходимых для описания эффектов второго порядка (см. гл. XIII, § 3).

Так как Φ является функцией состояния, то отсюда следует, что

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma} = -\varepsilon, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial E} = -D, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial T} = -S, \tag{10.42}$$

откуда после дифференцирования находим

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial E} = \frac{\partial D}{\partial \sigma}, \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} = \frac{\partial S}{\partial \sigma}, \quad \frac{\partial D}{\partial T} = \frac{\partial S}{\partial E}; \tag{10.43}$$

следовательно, матрица коэффициентов, стоящих в правой части уравнений (10.39), симметрична [1]). Поэтому прямой и обратный пьезоэлектрические эффекты описываются одними и теми же коэффициентами; это же справедливо для теплового расширения и пьезокалорического, пироэлектрического и электрокалорического эффектов.

Уравнения (10.38) теперь можно записать в развернутой форме с матричными обозначениями:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1 &= s_{11}^{E,T}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{13}\sigma_3 + s_{14}\sigma_4 + s_{15}\sigma_5 + s_{16}\sigma_6 + \\
&\quad + d_{11}^{T}E_1 + d_{21}E_2 + d_{31}E_3 + \alpha_1^{E}\Delta T, \\
\varepsilon_2 &= s_{12}\sigma_1 + s_{22}\sigma_2 + s_{23}\sigma_3 + s_{24}\sigma_4 + s_{25}\sigma_5 + s_{26}\sigma_6 + \\
&\quad + d_{12}E_1 + d_{22}E_2 + d_{32}E_3 + \alpha_2\Delta T, \\
\varepsilon_3 &= s_{13}\sigma_1 + s_{23}\sigma_2 + s_{33}\sigma_3 + s_{34}\sigma_4 + s_{35}\sigma_5 + s_{36}\sigma_6 + \\
&\quad + d_{13}E_1 + d_{23}E_2 + d_{33}E_3 + \alpha_3\Delta T, \\
\varepsilon_4 &= s_{14}\sigma_1 + s_{24}\sigma_2 + s_{34}\sigma_3 + s_{44}\sigma_4 + s_{45}\sigma_5 + s_{46}\sigma_6 + \\
&\quad + d_{14}E_1 + d_{24}E_2 + d_{34}E_3 + \alpha_4\Delta T, \\
\varepsilon_5 &= s_{15}\sigma_1 + s_{25}\sigma_2 + s_{35}\sigma_3 + s_{45}\sigma_4 + s_{55}\sigma_5 + s_{56}\sigma_6 + \\
&\quad + d_{15}E_1 + d_{25}E_2 + d_{35}E_3 + \alpha_5\Delta T, \\
\varepsilon_6 &= s_{16}\sigma_1 + s_{26}\sigma_2 + s_{36}\sigma_3 + s_{46}\sigma_4 + s_{56}\sigma_5 + s_{66}\sigma_6 + \\
&\quad + d_{16}E_1 + d_{26}E_2 + d_{36}E_3 + \alpha_6\Delta T, \\
D_1 &= d_{11}^{T}\sigma_1 + d_{12}\sigma_2 + d_{13}\sigma_3 + d_{14}\sigma_4 + d_{15}\sigma_5 + d_{16}\sigma_6 + \\
&\quad + \varkappa_{11}^{\sigma,T}E_1 + \varkappa_{12}E_2 + \varkappa_{13}E_3 + p_1^{\sigma}\Delta T, \\
D_2 &= d_{21}\sigma_1 + d_{22}\sigma_2 + d_{23}\sigma_3 + d_{24}\sigma_4 + d_{25}\sigma_5 + d_{26}\sigma_6 + \\
&\quad + \varkappa_{12}E_1 + \varkappa_{22}E_2 + \varkappa_{23}E_3 + p_2\Delta T, \\
D_3 &= d_{31}\sigma_1 + d_{32}\sigma_2 + d_{33}\sigma_3 + d_{34}\sigma_4 + d_{35}\sigma_5 + d_{36}\sigma_6 + \\
&\quad + \varkappa_{13}E_1 + \varkappa_{23}E_2 + \varkappa_{33}E_3 + p_3\Delta T, \\
\Delta S &= \alpha_1^{E}\sigma_1 + \alpha_2\sigma_2 + \alpha_3\sigma_3 + \alpha_4\sigma_4 + \alpha_5\sigma_5 + \alpha_6\sigma_6 + p_1^{\sigma}E_1 + \\
&\quad + p_2E_2 + p_3E_3 + \frac{C^{\sigma,E}}{T}\Delta T.
\end{aligned} \tag{10.44}$$

[1]) Коротко говоря, якобиан матрицы ε, D, S относительно σ, E, T [матрица коэффициентов в правой части уравнений (10.39)] равен взятому со знаком минус гессиану Φ относительно σ, E, T и симметричен.

Для краткости верхние индексы даны только у первых членов в каждой группе членов правой части. Матрица α определяется уравнением (9.16). В предыдущих главах мы рассматривали по отдельности формы различных матриц для 32 кристаллографических классов. Эти результаты сведены вместе в приложении 5, где для каждого кристаллографического класса представлены полные матрицы коэффициентов, стоящих в правой части уравнений (10.44).

Если матрицы в уравнениях (10.44) обозначить просто буквами, то мы получим следующие компактные уравнения:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= s^{E,T}\sigma + \mathbf{d}_t^T\mathbf{E} + \alpha^E \Delta T, \\ \mathbf{D} &= \mathbf{d}^T\sigma + \varkappa^{\sigma,T}\mathbf{E} + \mathbf{p}^\sigma \Delta T, \\ \Delta S &= \alpha_t^E\sigma + \mathbf{p}_t^\sigma\mathbf{E} + \frac{C^{\sigma,E}}{T}\Delta T. \end{aligned} \tag{10.45}$$

Нетрудно видеть, что для доказательства термодинамических уравнений (10.35)—(10.37) мы использовали по существу такой же метод, какой применялся для доказательства равенства $\varkappa_{ij} = \varkappa_{ji}$ в гл. IV, § 4, и равенства $s_{ij} = s_{ji}$ в гл. VIII, § 3; во всех этих случаях брались вторые производные от термодинамического потенциала (Φ, Ψ и U являются термодинамическими потенциалами) по двум из независимых переменных и менялся порядок дифференцирования. Таким образом, для доказательства симметричности относительно главной диагонали матрицы коэффициентов, стоящих в правой части уравнений (10.44), достаточно провести такое же рассуждение.

Остается исследовать три прямые зависимости между S, D и ε и три такие же зависимости между T, E и σ (см. фиг. 58б). Используя соответствующие термодинамические потенциалы, можно найти следующие соотношения между шестью рассматриваемыми коэффициентами:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial D_i}\right)_{T,\,\sigma} = -\left(\frac{\partial E_i}{\partial T}\right)_{D,\,\sigma} = f_i^\sigma, \tag{10.46}$$

$$\left(\frac{\partial D_i}{\partial \varepsilon_{jk}}\right)_{E,\,T} = -\left(\frac{\partial \sigma_{jk}}{\partial E_i}\right)_{\varepsilon,\,T} = e_{ijk}^T, \tag{10.47}$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \varepsilon_{ij}}\right)_{T,\,E} = -\left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial T}\right)_{\varepsilon,\,E} = f_{ij}^E. \tag{10.48}$$

Эти три соотношения обозначены на фиг. 58б буквами t, e, f с внешней стороны большого треугольника и буквами $-t$, $-e$ и $-f$ с внутренней стороны малого треугольника.

Число коэффициентов, стоящих в правой части уравнений (10.44), достаточно для того, чтобы определить все эффекты первого порядка. Все другие первые производные [см., например, соотношения (10.46)—

(10.48)] можно выразить через них. В частности, для пьезоэлектрического эффекта легко доказать, выписывая частные производные, что

$$d_{ijk} = e_{ilm} s^E_{lmjk}, \qquad e_{ijk} = d_{ilm} c^E_{lmjk}$$

как при $T = \text{const}$, так и при $S = \text{const}$.

§ 4. Соотношения между коэффициентами, измеренными при различных условиях

В § 2, п. 2 мы уже видели, что упругие податливости, измеренные при изотермических и адиабатических условиях, различны. Теперь рассмотрим подобные различия между разными коэффициентами в общем случае, в том числе и для коэффициентов, описывающих электрические эффекты (см. фиг. 58а и 58б).

Чтобы полностью определить упругие податливости, необходимо задать не только тепловые условия (которые могут характеризоваться постоянством S или T), но фиксировать и электрические условия: так, может поддерживаться постоянным поле $\boldsymbol{E}$ или, наоборот, индукция $\boldsymbol{D}$. Аналогично, теплоемкость кристалла определяется как механическими, так и электрическими условиями, при которых она измеряется; она зависит от того, как могут изменяться величины E_i, D_i, σ_{ij} и ε_{ij}. Наиболее важными для нас условиями будут следующие.

$T = \text{const}$ (*изотермическое изменение*). Это условие выполняется, когда эксперимент проводится настолько медленно, что кристалл все время находится в равновесии с окружающей средой.

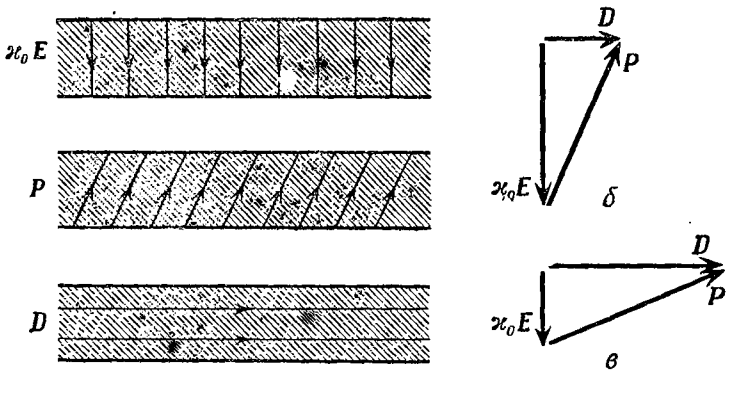
$S = \text{const}$ (*адиабатическое изменение*). В этом случае кристалл не должен ни получать, ни отдавать тепло. Такие условия реализуются при упругих колебаниях кристалла, если изменения столь быстры, что теплообмен между различными частями кристалла пренебрежимо мал.

$\boldsymbol{E} = \text{const}$. Поле $\boldsymbol{E}$ будет оставаться равным нулю, если вся поверхность кристалла находится под одним и тем же электрическим потенциалом. Когда $\boldsymbol{E} = 0$, то говорят, что кристалл *электрически свободен*, по аналогии с описанным ниже механически свободным состоянием.

$\boldsymbol{D} = \text{const}$. Если индукция $\boldsymbol{D}$ в кристалле постоянна, то $d\boldsymbol{D} = \varkappa_0 d\boldsymbol{E} + d\boldsymbol{P} = 0$; следовательно, любое изменение $\boldsymbol{P}$ за счет пьезоэлектрического или пироэлектрического эффектов должно компенсироваться равным и противоположным изменением $\varkappa_0 \boldsymbol{E}$. Такие условия в общем случае трудно осуществить экспериментально.

Тем не менее поучительно обсудить случай полностью изолированной тонкой кристаллической пластинки. Будем рассматривать условия только в центральной части пластинки вдали от ее краев (фиг. 60, *а*), хотя нетрудно распространить качественное рассмотрение и на граничные участки. Пусть вне кристалла $\boldsymbol{D} = 0$. Поскольку на границе

двух сред нормальная компонента $\boldsymbol{D}$ должна сохранять непрерывность, внутри пластинки могут существовать только компоненты $\boldsymbol{D}$, параллельные ее поверхностям (нижняя схема на фиг. 60, *а*). Наоборот, напряженность поля $\boldsymbol{E}$ должна быть перпендикулярна поверхности пластинки вследствие непрерывности на границе ее тангенциальной компоненты (равной нулю). Поляризация $\boldsymbol{P}$ будет в общем случае направлена под некоторым углом к поверхности [1]). Соотношение



Фиг. 60. Расположение векторов $\varkappa_0 E$, $\boldsymbol{P}$ и $\boldsymbol{D}$ в тонкой изолированной кристаллической пластинке вдали от ее краев (*а*), связь между векторами (*б*) и влияние изменения $\boldsymbol{P}$ (*в*).

между $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{P}$ показано на фиг. 60, *б*. Из фиг. 60, *б* видно, что если поляризация $\boldsymbol{P}$ перпендикулярна поверхностям пластинки, то индукция $\boldsymbol{D}$ будет равна нулю; при этом $\boldsymbol{E}$ — деполяризующее поле, созданное поверхностными поляризационными зарядами, — будет полностью компенсировать $\boldsymbol{P}$ ($\varkappa_0 \boldsymbol{E} = -\boldsymbol{P}$). Действительно, только в этом случае в изолированной пластинке индукция $\boldsymbol{D}$ будет постоянна (равна нулю). Чтобы убедиться, что в общем случае индукция $\boldsymbol{D}$ не постоянна, рассмотрим влияние малого изменения величины и направления вектора $\boldsymbol{P}$. Векторы $\boldsymbol{D}$ и $\varkappa_0 \boldsymbol{E}$ должны всегда оставаться соответственно параллельными и перпендикулярными поверхностям пластинки; следовательно, если мы перейдем от конфигурации, изображенной на фиг. 60, *б*, к конфигурации, изображенной на фиг. 60, *в*, то векторы $\boldsymbol{D}$ и $\varkappa_0 \boldsymbol{E}$ изменят свою величину, но останутся фиксированными по направлению. Таким образом, при изменении $\boldsymbol{P}$ остаются

[1]) На практике при статических экспериментах на поверхностях кристалла будут оседать компенсирующие заряды и экранировать поляризационные заряды. При нашем теоретическом рассмотрении мы полагаем, что это не имеет места, так как кристалл изолирован очень хорошо. Эффект экранировки не возникает при динамических экспериментах, при которых $\boldsymbol{P}$ меняет свое направление столь часто, что заряды не успевают накопиться.

неизменными (и равными нулю) только нормальная компонента $\boldsymbol{D}$ и тангенциальные компоненты $\boldsymbol{E}$.

Итак, для осуществления условия $\boldsymbol{E}=0$ достаточно, чтобы поверхность кристалла была эквипотенциальной. Вместе с тем, для выполнения условия $\boldsymbol{D}=0$ недостаточно изоляции кристалла. В общем случае в изолированной пластинке больших размеров вдали от ее краев остаются неизменными нормальная компонента $\boldsymbol{D}$ и тангенциальные компоненты $\boldsymbol{E}$, тогда как условия $\boldsymbol{D}=\text{const}$ и $\boldsymbol{E}=\text{const}$ не выполняются. Если выполняется условие $\boldsymbol{D}=0$, то говорят, что кристалл *электрически зажат*.

$\sigma=\text{const}$ [1]). (*Механически*) *свободное состояние* ($\sigma_{ij}=0$) можно приближенно осуществить, укрепив кристалл таким образом, чтобы деформации могли происходить как можно более свободно.

$\varepsilon=\text{const}$ [1]). Чтобы деформации ε_{ij} было постоянны, к кристаллу необходимо приложить такую систему механических напряжений, которая обеспечивала бы постоянство *всех* компонент деформации. Можно считать при этом, что кристалл окружен со всех сторон средой с бесконечной жесткостью. Когда $\varepsilon_{ij}=0$, то говорят, что кристалл (*механически*) *зажат*.

1. Главные эффекты. Ниже приводятся уравнения, из которых видно, как влияют условия измерений на коэффициенты, описывающие главные эффекты. Первое из этих уравнений уже было получено в § 2, п. 2. Остальные уравнения выводятся аналогично, но при этом требуются некоторые добавочные преобразования индексов; для иллюстрации этих преобразований в приложении 7 выведено уравнение (10.51). Из фиг. 58б можно видеть, что все эти уравнения должны иметь одинаковую форму. Любое уравнение, включающее величины, стоящие в соответственных вершинах обоих треугольников, имеет симметричные аналоги для каждой другой пары величин, занимающих другие соответственные вершины. Таким образом, получив одно из этих уравнений, можно из рассмотрения фиг. 58б найти остальные (за исключением индексов).

1) Изотермические и адиабатические упругие податливости (при постоянном поле)

$$s^{S}_{ijkl}-s^{T}_{ijkl}=-\alpha_{ij}\alpha_{kl}\frac{T}{C^{\sigma}} \qquad (\boldsymbol{E}=\text{const}). \tag{10.49}$$

Правую часть уравнения можно интерпретировать как термоупругую поправку к податливости.

2) Упругие (изотермические) податливости в электрически зажатом и электрически свободном состояниях

$$s^{D}_{ijkl}-s^{E}_{ijkl}=-d_{mij}\,d_{nkl}\beta^{\sigma}_{mn} \qquad (T=\text{const}) \tag{10.50}$$

(пьезоэлектрическая поправка к податливости).

[1]) В выражениях, подобных этому, мы пишем для краткости σ и ε вместо σ_{ij} и ε_{ij}.

3) Диэлектрическая проницаемость в механически зажатом и механически свободном (изотермических) состояниях

$$\varkappa_{ij}^{\varepsilon} - \varkappa_{ij}^{\sigma} = -d_{ikl}d_{jmn}c_{klmn}^{E} \qquad (T = \text{const}) \qquad (10.51)$$

(пьезоэлектрическая поправка к диэлектрической проницаемости).

4) Изотермическая и адиабатическая диэлектрическая проницаемости (при постоянных напряжениях)

$$\varkappa_{ij}^{S} - \varkappa_{ij}^{T} = -p_i p_j \frac{T}{C^{E}} \qquad (\sigma = \text{const}) \qquad (10.52)$$

(пироэлектрическая поправка к диэлектрической проницаемости).

5) Теплоемкость (при постоянных напряжениях) в электрически зажатом и электрически свободном состояниях

$$C^{D} - C^{E} = -Tp_i p_j \beta_{ij}^{T} \qquad (\sigma = \text{const}) \qquad (10.53)$$

(пироэлектрическая поправка к теплоемкости).

6) Теплоемкость (при постоянном поле) в механически зажатом и свободном состояниях

$$C^{\varepsilon} - C^{\sigma} = -T\alpha_{ij}\alpha_{kl}c_{ijkl}^{T} \qquad (\boldsymbol{E} = \text{const}) \qquad (10.54)$$

(термоупругая поправка к теплоемкости).

7) Упругие (изотермические) податливости при постоянных нормальных компонентах индукции. В качестве примера промежуточных условий можно рассмотреть изотермические упругие податливости в электрически изолированной пластинке, длина и ширина которой велики по сравнению с ее толщиной. Как мы уже видели, при этих условиях остаются постоянными компонента $\boldsymbol{D}$, нормальная к пластинке, и тангенциальные компоненты $\boldsymbol{E}$. Если Ox_1 — направление нормали к пластинке, то экспериментальные значения упругих податливостей можно записать в виде

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{kl}}\right)_{D_1,\, E_2,\, E_3} = s_{ijkl}^{*} \qquad (T = \text{const}).$$

Можно показать, что коэффициенты s_{ijkl}^{*} связаны с s_{ijkl}^{E} соотношениями

$$s_{ijkl}^{*} - s_{ijkl}^{E} = -\frac{d_{1ij}d_{1kl}}{\varkappa_{11}^{\sigma}} \qquad (T = \text{const}). \qquad (10.55)$$

2. Сопряженные эффекты. Уравнения, подобные приведенным в п.1, можно вывести и для коэффициентов, описывающих сопряженные эффекты. Все получаемые при этом уравнения также имеют общую форму, которую легко получить, обратившись опять к фиг. 58б.

1) Пироэлектрические и электрокалорические коэффициенты при постоянных напряжениях и постоянных деформациях (см. § 4, п. 4)

$$p_i^E - p_i^\sigma = -\alpha_{jk}^E c_{jklm}^{E,T} d_{ilm}^T. \tag{10.56}$$

2) Коэффициенты теплового расширения и пьезокалорические коэффициенты в электрически зажатом и электрически свободном состояниях

$$\alpha_{ij}^D - \alpha_{ij}^E = -d_{klj}^T \beta_{kl}^{\sigma,T} p_i^\sigma. \tag{10.57}$$

3) Изотермические и адиабатические коэффициенты прямого и обратного пьезоэлектрических эффектов

$$d_{ijk}^S - d_{ijk}^T = -p_i^\sigma \frac{T}{C^{\sigma,E}} \alpha_{jk}^E. \tag{10.58}$$

3. Численные значения коэффициентов. Мы говорим, что совокупность величин, характеризующих взаимосвязь между всеми рассматриваемыми свойствами кристалла, количественно определена, если известны значения частных производных — коэффициентов в уравнениях (10.27)—(10.29). Некоторые численные значения были приведены в предыдущих главах. Здесь мы дадим следующую схематическую таблицу, суммирующую порядок величин коэффициентов при комнатной температуре для неметаллических и несегнетоэлектрических кристаллов, когда эти коэффициенты не обращаются в нуль из-за симметрии:

	σ	E	T
ε	s	d	α
D	d	$\varkappa$	p
S	α	p	C/T

	σ	E	T
ε	10^{-11}	$3\cdot10^{-12}$	10^{-5}
D	$3\cdot10^{-12}$	10^{-10}	$3\cdot10^{-6}$
S	10^{-5}	$3\cdot10^{-6}$	10^{4}.

(Значения даны в рационализированной системе MKS.) Эти значения по необходимости являются весьма приближенными. Здесь не приняты во внимание ни разброс значений различных компонент каждого тензора, ни значительные расхождения в величине коэффициентов у разных кристаллов. [Для сегнетоэлектрических кристаллов (см. гл. IV, § 8) порядок величин некоторых из этих коэффициентов совершенно отличен от приведенных выше; кроме того, некоторые из коэффициентов обнаруживают заметную зависимость от температуры.]

При определении порядка величины можно проводить вычисления с тензорами так же, как со скалярами. Относительная разность между адиабатическими и изотермическими упругими податливостями $(s^{S,E} - s^{T,E})/s^{T,E}$ имеет, согласно уравнению (10.49), величину порядка $\alpha^2/(C/T)s$. Это безразмерное отношение характеризует вели-

чину термоупругого взаимодействия [1]); подставляя приведенные выше численные значения, находим, что указанное отношение должно быть равно 10^{-3}. Значения ряда относительных разностей даны в табл. 11.

ТАБЛИЦА 11

Относительные разности между значениями коэффициентов, измеренными при различных условиях

Уравнение	Разность	Относительная разность и порядок ее величины	
(10.49)	$s^{S,E} - s^{T,E}$	$\frac{\alpha^2}{(C/T)s}$	10^{-3}
(10.50)	$s^{D,T} - s^{E,T}$	$\frac{d^2}{\varkappa s}$	10^{-2}
(10.51)	$\varkappa^{\varepsilon,T} - \varkappa^{\sigma,T}$	$\frac{d^2}{\varkappa s}$	10^{-2}
(10.52)	$\varkappa^{S,\sigma} - \varkappa^{T,\sigma}$	$\frac{p^2}{(C/T)\varkappa}$	10^{-5}
(10.53)	$C^{D,\sigma} - C^{E,\sigma}$	$\frac{p^2}{(C/T)\varkappa}$	10^{-5}
(10.54)	$C^{\varepsilon,E} - C^{\sigma,E}$	$\frac{\alpha^2}{(C/T)s}$	10^{-3}
(10.56)	$p^{\varepsilon} - p^{\sigma}$	$\frac{d\alpha}{sp}$	1
(10.57)	$\alpha^D - \alpha^E$	$\frac{dp}{\varkappa\alpha}$	10^{-2}
(10.58)	$d^S - d^T$	$\frac{p\alpha}{(C/T)d}$	10^{-3}

Как видно из данных, приведенных в последнем столбце таблицы, разности между коэффициентами, измеренными при различных условиях являются в общем случае лишь малыми поправками, не превышающими 1% (впрочем, следует помнить, что эти числа получены как произведения и отношения коэффициентов, определенных лишь весьма приближенно). Отметим, однако, что относительная разность между пироэлектрическими эффектами при постоянных напряжениях и деформациях не является малой величиной; она имеет порядок 100%. Этим особым положением пироэлектрического эффекта и объясняется то

[1]) Квадратные корни из отношений, подобных этому, называются *коэффициентами термоупругой, электротермической и электромеханической связи.*

которая в свою очередь за счет пьезоэлектрической зависимости $\varepsilon \to D$ создает электрическую индукцию.

Выразив $(\partial D/\partial \varepsilon)_T$ в уравнении (10.59) как произведение двух производных, получаем

$$\left(\frac{\partial D}{\partial T}\right)_\sigma = \underbrace{\left(\frac{\partial D}{\partial T}\right)_\varepsilon}_{\text{первичный эффект}} + \underbrace{\left(\frac{\partial D}{\partial \sigma}\right)_T \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon}\right)_T \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_\sigma}_{\text{вторичный эффект}}, \qquad (E = \text{const}). \quad (10.60)$$

Это уравнение, эквивалентное (10.56), выражает вторичный эффект через пьезоэлектрические коэффициенты, упругие жесткости и коэффициенты теплового расширения (путь $T \to \varepsilon \to \sigma \to D$ на фиг. 61).

Практически вторичный эффект иногда численно превышает первичный; может даже оказаться, что первичный эффект настолько мал, что его не удастся обнаружить. Обычно измеряемой величиной является именно $(\partial D/\partial T)_\sigma$; чтобы получить из нее $(\partial D/\partial T)_\varepsilon$, нужно знать пьезоэлектрические и упругие коэффициенты и коэффициенты теплового расширения. Так как величина $(\partial D/\partial T)_\varepsilon$ относительно мала, то небольшая ошибка в определении $(\partial D/\partial T)_\sigma$ может привести к тому, что первичный эффект будет вообще не замечен [1]).

Связь между вторичным пироэлектрическим эффектом и кристаллографической симметрией — вопрос, заслуживающий некоторого внимания. Три главных эффекта (см. фиг. 58а и 58б) наблюдаются во всех кристаллах. У всех кристаллов наблюдаются также тепловое расширение и термоупругие эффекты. Однако пироэлектрический эффект (первичный и вторичный) и пьезоэлектрический эффект возможны только у кристаллов, принадлежащих к определенным классам. Далее, симметрия некоторых кристаллов такова, что они могут иметь пьезоэлектрические свойства, но не могут иметь пироэлектрических свойств. Тогда возникает вопрос: что при этом делается с вторичным пироэлектрическим эффектом, появляющимся благодаря тепловому расширению и пьезоэлектрическому эффекту? Согласно кристаллографической симметрии, он не может существовать, хотя при той же симметрии возможно существование теплового расширения и пьезоэлектричества. Примером такого кристалла является α-кварц (класс 32). Он имеет три оси второго порядка, причем давление вдоль любой из них вызывает появление пьезоэлектрических зарядов. При нагревании кристалл расширяется так, что вдоль каждой из трех осей второго порядка возникают равные деформации. Эти деформации привели бы к появлению пьезоэлектрических зарядов, если бы они не были направлены под углом 120° друг к другу; в данном же случае все эффекты взаимно уничтожаются. Следовательно, вторичный пироэлектрический эффект отсутствует. Можно отметить, между прочим, что кварц, который в силу своей симметрии не может быть пиро-

[1]) Дальнейшие подробности см. в книге Кэди [24].

электриком, не может обнаруживать и вторичного пьезоэлектрического эффекта, возникающего за счет термоупругого и пироэлектрического эффектов [уравнение (10.58)].

Такое же рассмотрение применимо к кубическому кристаллу сульфида цинка (цинковая обманка, класс $\bar{4}3m$), имеющему четыре полярные оси третьего порядка. Этот кристалл является пьезоэлектриком, но не пироэлектриком. Наоборот, гексагональная модификация (вюрцит, класс $6mm$), у которой гексагональная ось особенная, является и пьезоэлектриком, и пироэлектриком.

При рассмотрении всех явлений, с которыми мы имели дело в настоящей главе, состояние кристалла предполагалось одинаковым во всех его точках. *Третичный пироэлектрический эффект* (или „ложный пироэлектрический эффект второго рода") практически представляет собой результат неоднородно напряженного состояния. Неравномерное нагревание создает градиент температуры, который за счет теплового расширения вызывает появление неоднородных напряжений и деформаций. Благодаря пьезоэлектрическому эффекту эти напряжения и деформации в свою очередь приводят к возникновению поляризации, которую можно ошибочно принять за первичное или вторичное пироэлектричество (если эксперимент выполнен недостаточно тщательно).

РЕЗЮМЕ

На фиг. 58а и 58б представлена связь между тепловыми, электрическими и упругими свойствами кристалла. Если величины, стоящие в трех вершинах внешнего треугольника, принять за независимые переменные, то эффекты первого порядка (линейные) можно в матричной записи выразить в виде

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \mathbf{s}^{E,\,T}\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{d}_t^T\mathbf{E} + \boldsymbol{\alpha}^E\Delta T, \\ \mathbf{D} &= \mathbf{d}^T\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\varkappa}^{\sigma,\,T}\mathbf{E} + \mathbf{p}^{\sigma}\Delta T, \\ \Delta S &= \boldsymbol{\alpha}_t^E\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{p}_t^{\sigma}\mathbf{E} + \frac{C^{\sigma,\,E}}{T}\Delta T. \end{aligned} \tag{10.45}$$

Члены, расположенные на главной диагонали правой части этой системы уравнений, описывают *главные свойства*, а именно упругость, диэлектрическую проницаемость и теплоемкость. Недиагональные члены представляют *сопряженные эффекты*: прямой и обратный пьезоэлектрические эффекты, тепловое расширение и пьезокалорический эффект, пироэлектрический и электрокалорический эффекты. Симметрия полной матрицы коэффициентов, стоящих в правой части этих уравнений, вытекает из термодинамических соображений, приведенных в § 3 и суммированных на стр. 220.

Из диаграмм, приведенных на фиг. 58а и 58б, видно, что свойства кристалла являются формально симметричными. Так, вычисление

разности между изотермическими и адиабатическими упругими податливостями (при постоянном поле) выполняется совершенно аналогично вычислению разности между теплоемкостями при постоянных напряжениях и при постоянных деформациях (при постоянном поле). Вычисление разности между изотермическими диэлектрическими проницаемостями при постоянных напряжениях и при постоянных деформациях также производится аналогично. Эти разности выражаются уравнениями (10.49)—(10.58). Уравнения (10.49)—(10.54) выражают соответственно термоупругие и пьезоэлектрические поправки к упругим податливостям, пьезоэлектрические и пироэлектрические поправки к диэлектрической проницаемости, пироэлектрические и термоупругие поправки к теплоемкости. Уравнения (10.56)—(10.58) описывают вторичный пироэлектрический эффект, возникающий за счет теплового расширения и пьезоэлектрического эффекта, вторичное тепловое расширение, возникающее благодаря пироэлектрическому и пьезоэлектрическому эффектам, и вторичный пьезоэлектрический эффект, возникающий из-за пьезокалорического и пироэлектрического эффектов. Эти вторичные эффекты обычно составляют 1% или меньше от основного эффекта. Однако вторичный пироэлектрический эффект не является малым эффектом и обусловливает основную часть обычно наблюдаемых пироэлектрических явлений.

ЗАДАЧИ

1. Доказать, что $\left(\frac{\partial T}{\partial \varepsilon_{ij}}\right)_S = \left(\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial S}\right)_\varepsilon$ и что $\left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial S}\right)_\sigma = -\left(\frac{\partial T}{\partial \sigma_{ij}}\right)_S$.

Часть III

СВОЙСТВА, ХАРАКТЕРИЗУЮЩИЕ ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА

Гл. XI и XII посвящены трем свойствам кристаллов, также описываемым тензорами: теплопроводности, электропроводности и термоэлектрическим свойствам. Так как эти свойства связаны с процессами переноса и термодинамически необратимыми явлениями, они не укладываются в схему обратимых эффектов, данную в гл. X. Поэтому более удобно и логично рассмотреть их теперь отдельно.

Глава XI

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ

§ 1. Тензоры коэффициентов теплопроводности и теплового сопротивления

1) Теплопроводность. Если между различными частями тела поддерживается разность температур, то в общем случае между ними происходит перенос тепла путем теплопроводности. Если h_1, h_2, h_3 — количества тепла, протекающего в единицу времени через единичные площадки, перпендикулярные соответственно Ox_1, Ox_2 и Ox_3, то, как легко показать, h_1, h_2, h_3 являются компонентами вектора $\boldsymbol{h}$ (в смысле определения, данного в гл. I, § 3). Вектор $\boldsymbol{h}$ лежит в направлении потока тепла, и если единичная площадка перпендикулярна $\boldsymbol{h}$, то скорость теплового потока через нее есть h. В изотропном теле процесс переноса тепла путем теплопроводности подчиняется закону

$$\boldsymbol{h} = -k \operatorname{grad} T, \tag{11.1}$$

где k — положительный коэффициент, называемый *коэффициентом теплопроводности*. Таким образом, перенос тепла происходит в направлении наибольшего перепада температур, причем скорость потока прямо пропорциональна градиенту температуры. В индексном обозначении мы можем записать

$$h_i = -k \frac{\partial T}{\partial x_i}. \tag{11.2}$$

В кристалле вектор $\boldsymbol{h}$ в общем случае не параллелен grad T, и уравнение (11.2) заменяется на

$$h_i = -k_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j}. \tag{11.3}$$

Каждая компонента $\boldsymbol{h}$ зависит теперь от всех трех компонент градиента температуры, а не от одной из них, как в случае изотропной среды. Так как коэффициенты k_{ij} связывают два вектора, то они образуют тензор второго ранга называемый *тензором коэффициентов теплопроводности*. Каждый из коэффициентов k_{ij} имеет определенный физический смысл. Например, если единичный градиент температуры направлен вдоль Ox_2, то тепловой поток [1]) вдоль этой

[1]) В подобном контексте мы будем всегда под тепловым потоком подразумевать количество тепла, протекающего за единицу времени через единицу поверхности, перпендикулярной направлению потвка, т. е. скорость потока через единичную поперечную площадку.

оси равен $-k_{22}$, а два поперечных потока, параллельных Ox_1 и Ox_3, равны соответственно $-k_{12}$ и $-k_{32}$.

Можно доказать (это будет обсуждаться в § 5 и 6), что

$$k_{ij} = k_{ji}. \tag{11.4}$$

Поэтому $[k_{ij}]$ является симметричным тензором и может быть записан в виде

$$\begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{31} \\ k_{12} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{23} & k_{33} \end{bmatrix},$$

или, при приведении к главным осям, в виде

$$\begin{bmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 \end{bmatrix}.$$

Когда тензор $[k_{ij}]$ приведен к главным осям, уравнения (11.3) принимают простую форму:

$$h_1 = -k_1 \frac{\partial T}{\partial x_1}, \quad h_2 = -k_2 \frac{\partial T}{\partial x_2}, \quad h_3 = -k_3 \frac{\partial T}{\partial x_3}. \tag{11.5}$$

Характеристическая поверхность второго порядка для коэффициентов теплопроводности описывается уравнением

$$k_{ij} x_i x_j = 1, \tag{11.6}$$

которое при переходе к главным осям принимает вид

$$k_1 x_1^2 + k_2 x_2^2 + k_3 x_3^2 = 1. \tag{11.7}$$

Экспериментальные значения k_1, k_2 и k_3 всегда положительны, и поэтому уравнение (11.7) описывает эллипсоид — *характеристический эллипсоид коэффициентов теплопроводности*. Его форма и ориентация должны согласовываться с симметрией кристалла (см. гл. I, § 5, п. 1). Некоторые численные значения коэффициентов теплопроводности приведены в табл. 12.

2) *Тепловое сопротивление*. Если три уравнения (11.3) разрешить относительно $\partial T/\partial x_j$, то получим

$$\frac{\partial T}{\partial x_i} = -r_{ij} h_j, \tag{11.8}$$

где r_{ij} — функции k_{ij}. Коэффициенты r_{ij} связывают два вектора и поэтому образуют тензор второго ранга, так называемый *тензор коэффициентов теплового сопротивления*. Если этот тензор записать в виде матрицы ($\mathbf{r} = r_{ij}$), то последняя, очевидно, будет обратной матрице коэффициентов теплопроводности $\mathbf{k} = (k_{ij})$ (см. гл. IX, § 4, п. 2):

$$\mathbf{r} = \mathbf{k}^{-1}. \tag{11.9}$$

ТАБЛИЦА 12

Коэффициенты теплопроводности кристаллов *

Кристалл	Система	Температура, °С	k_1, k_2 **	k_3
Кварц	Тригональная	30	6,5	11,3
Кальцит	»	30	4,18	4,98
Висмут	»	18	9,24	6,65
Графит	Гексагональная	30	355	89
Алюминий	Кубическая	30	208	
Медь	»	0	410	

* В таблице указаны значения главных коэффициентов теплопроводности в единицах системы MKS [*дж/м·сек·град*]. Данные взяты из таблиц [54].

** Для всех приведенных в таблице кристаллов $k_1 = k_2$; но это, конечно, не справедливо для оптически двуосных кристаллов.

Едва ли необходимо отмечать, что компоненты $[r_{ij}]$ по отдельности в общем случае не являются просто обратными величинами соответствующих компонент $[k_{ij}]$. Так, например,

$$r_{12} \neq (k_{12})^{-1}.$$

Коэффициенты k_{12} и r_{12} определяются при совершенно различных экспериментах. Коэффициент k_{12} находится при измерении компоненты теплового потока вдоль x_1, когда градиент температуры направлен вдоль x_2, т. е.

$$h_1 = -k_{12}\frac{\partial T}{\partial x_2}.$$

Наоборот, r_{12} определяется из эксперимента, в котором измеряется компонента градиента температуры вдоль x_1, когда полный тепловой поток направлен вдоль x_2, т. е.

$$\frac{\partial T}{\partial x_1} = -r_{12}h_2.$$

Так как $k_{ij} = k_{ji}$, то из соотношения

$$r_{ij} = \frac{(-1)^{i+j}\Delta_{ij}}{|k_{ij}|},$$

где Δ_{ij} — детерминант, получаемый из $|k_{ij}|$ вычеркиванием i-й строки и j-го столбца (см. гл. IX, § 4, п. 2), легко получить, что

$$r_{ij} = r_{ji}. \tag{11.10}$$

Когда симметричный тензор $[r_{ij}]$ приведен к главным осям (они совпадают с главными осями тензора коэффициентов теплопроводности), то уравнения (11.8) принимают простую форму

$$\frac{\partial T}{\partial x_1} = -r_1 h_1, \quad \frac{\partial T}{\partial x_2} = -r_2 h_2, \quad \frac{\partial T}{\partial x_3} = -r_3 h_3,$$

откуда получаются соотношения

$$r_1 = \frac{1}{k_1}, \quad r_2 = \frac{1}{k_2}, \quad r_3 = \frac{1}{k_3}.$$

Характеристический эллипсоид коэффициентов теплового сопротивления при приведении к главным осям описывается уравнением

$$r_1 x_1^2 + r_2 x_2^2 + r_3 x_3^2 = 1.$$

Легко видеть, что длины полуосей этого эллипсоида обратно пропорциональны длинам полуосей характеристического эллипсоида коэффициентов теплопроводности.

§ 2. Два частных случая стационарного теплового потока

Поучительно рассмотреть геометрические условия для двух частных случаев стационарного теплового потока. Поток тепла является стационарным в том случае, когда величина потока и температура в любой точке не изменяются со временем.

1) Тепловой поток через плоскую пластинку. Пусть поверхности плоско-параллельной кристаллической пластинки находятся в контакте с двумя хорошими проводниками тепла (фиг. 62, *а*) и имеют разную температуру.

Положим, что длина и ширина кристаллической пластинки значительно больше ее толщины; тогда, если не учитывать краевых эффектов, изотермические поверхности в кристалле должны быть параллельны поверхностям пластинки. Следовательно, градиент температуры должен быть направлен перпендикулярно поверхностям пластинки, а тепловой поток в общем случае будет иметь некоторое другое направление.

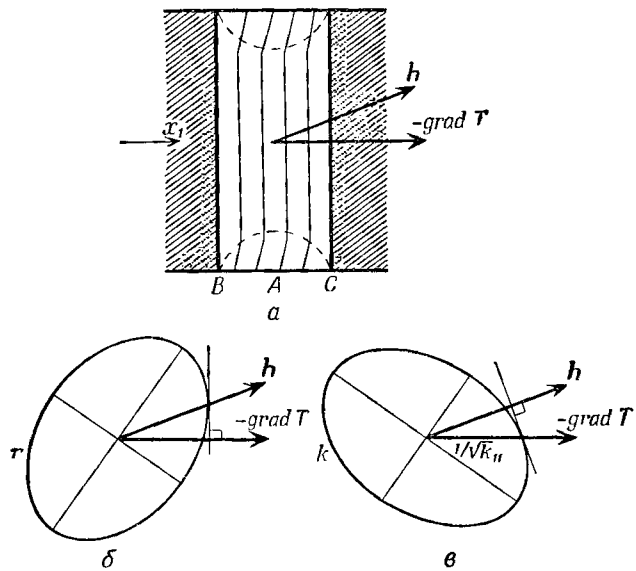
На фиг. 62, *б* и *в* показано (для двумерного случая) расположение векторов $\boldsymbol{h}$ и $-\operatorname{grad} T$ соответственно относительно эллипсоида коэффициентов теплового сопротивления и эллипсоида коэффициентов теплопроводности. Легко убедиться, что эта картина аналогична той, которая имела место для анизотропного диэлектрика, помещенного между двумя проводящими плоскими электродами, и была изображена на фиг. 24.

Прежде чем выразить результат аналитически, отметим следующее обстоятельство. Так как в рассматриваемом нами случае предопре-

деляется направление $\operatorname{grad} T$, а не $\boldsymbol{h}$, то удобнее оперировать с коэффициентами теплопроводности, а не с коэффициентами теплового сопротивления; поэтому мы запишем

$$h_1 = -k_{11}\frac{dT}{dx_1}, \quad h_2 = -k_{12}\frac{dT}{dx_2}, \quad h_3 = -k_{31}\frac{dT}{dx_3}$$

(здесь принято, что направление x_1 перпендикулярно поверхностям пластинки). Скорость теплового потока через пластинку задается



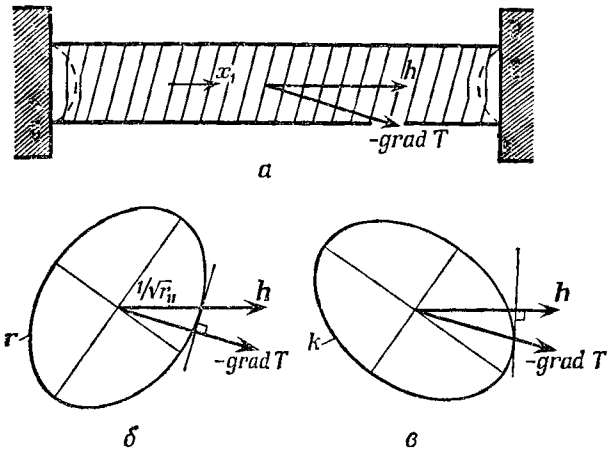
Фиг. 62. Поток тепла через плоскопараллельную пластинку, находящуюся между двумя хорошими проводниками тепла.

На схеме представлена ориентация векторов $-\operatorname{grad} T$ и $\boldsymbol{h}$ по отношению к пластинке (*а*), эллипсоиду коэффициентов теплового сопротивления (*б*) и эллипсоиду коэффициентов теплопроводности (*в*).

теперь не через $\boldsymbol{h}$, а компонентой h_1. Компоненты h_2 и h_3 характеризуют поперечные тепловые потоки (ниже мы рассмотрим, какие значения имеют h_2 и h_3 на границах). Следовательно, k_{11} является наиболее легко измеримой величиной. На фиг. 62, *в* величина $1/\sqrt{k_{11}}$ представлена как длина радиуса-вектора в направлении x_1.

2) *Тепловой поток вдоль длинного стержня.* Пусть образец в форме длинного стержня, изображенного на фиг. 63, *а*, вырезан из того же кристалла и ориентирован так же, как пластинка, показанная на фиг. 62, *а*. Пусть между торцами этого стержня поддерживается разность температур, причем предполагается, что теплопроводность кристалла значительно превышает теплопроводность окружающей среды. Тогда направление теплового потока должно

быть параллельно оси стержня. Следовательно, градиент температуры будет направлен под некоторым углом к оси. Ориентация $\boldsymbol{h}$ и $-\operatorname{grad} T$ относительно эллипсоидов коэффициентов теплового сопротивления и теплопроводности дана для этого случая на фиг. 63, *б* и *в*.



Фиг. 63. Поток тепла вдоль длинного стержня.

На схемах представлена ориентация векторов $-\operatorname{grad} T$ и $\boldsymbol{h}$ по отношению к стержню (*а*), эллипсоиду коэффициентов теплового сопротивления (*б*) и эллипсоиду коэффициентов теплопроводности (*в*).

Так как на этот раз предопределено направление $\boldsymbol{h}$ (параллельное x_1), то теперь удобнее оперировать с коэффициентами теплового сопротивления. Поэтому мы можем написать

$$\frac{\partial T}{\partial x_1} = -r_{11}h_1, \quad \frac{\partial T}{\partial x_2} = -r_{12}h_1, \quad \frac{\partial T}{\partial x_3} = -r_{31}h_1.$$

На этот раз наиболее легко измеримой величиной является градиент температуры вдоль длины стержня, $\partial T/\partial x_1$. Он связан с тепловым потоком вдоль стержня коэффициентом r_{11}. Величина $1/\sqrt{r_{11}}$ есть длина радиуса-вектора в направлении x_1, как показано на фиг. 63, *б*.

3) *Краевые эффекты.* На краях пластинки, изображенной на фиг. 62, *а*, тепловой поток должен быть параллелен x_1; это в свою очередь означает, что изотермические поверхности уже не будут параллельны главным поверхностям пластинки. Фактическая ориентация $\boldsymbol{h}$ и $\operatorname{grad} T$ в точке A на фиг. 62, *а* и в подобных точках будет такой же, как показано на фиг. 63. Точки B и C являются особыми. Таким образом, в областях, ограниченных на фиг. 62, *а* штриховыми линиями, будут наблюдаться краевые эффекты.

Поскольку концы стержня, изображенного на фиг. 63, *а*, прямоугольны и прилегают к хорошим проводникам тепла (как это показано на фигуре), здесь также будут иметь место краевые эффекты.

Изотермические поверхности у торцов стержня будут при этом перпендикулярны оси стержня; соответственно направление $\boldsymbol{h}$ будет таким, как показано на фиг. 62, *а*. Краевые эффекты можно устранить, если придать краям пластинки на фиг. 62, *а* такую форму, чтобы они были параллельны направлению $\boldsymbol{h}$ в центре пластинки, а концы стержня (фиг. 63, *а*) сделать параллельными изотермам в центральной части стержня.

4) Общие замечания. Два рассмотренных нами случая лежат в основе большинства методов измерения коэффициентов теплопроводности кристалла. Когда мы имеем плоскопараллельную пластинку, то наиболее легко измеримой величиной является, очевидно, k_{11} — коэффициент *теплопроводности* в направлении нормали к пластинке, тогда как в случае стержня такой величиной является r_{11} — коэффициент *теплового сопротивления* стержня. Это положение аналогично встречавшемуся уже при рассмотрении упругости: прикладывая известные напряжения, мы измеряем податливость; задавая деформации, мы измеряем жесткость.

Главные коэффициенты теплопроводности и теплового сопротивления и ориентацию их главных осей можно определить по данным, полученным в результате измерений в различных направлениях. Такое вычисление проводится по существу так же, как для любого другого свойства, описываемого тензором второго ранга; некоторые примеры были даны на стр. 130 и в гл. IX, § 7.

§ 3. Общий случай стационарного теплового потока

Рассмотрим теперь общие уравнения, описывающие перенос тепла путем теплопроводности в кристалле в случае стационарного состояния. Предположим для общности, что по всему кристаллу непрерывно распределены источники и поглотители тепла, причем суммарная скорость выделения тепла в единичном объеме кристалла равна $\dot{q}$. Величина $\dot{q}$ может быть как положительной, так и отрицательной. В стационарном состоянии разность между количествами тепла, втекающего в любой объем и уходящего из него, равна количеству тепла, создаваемого в этом объеме. Следовательно, мы можем записать уравнение сохранения

$$\operatorname{div} \boldsymbol{h} = \dot{q}, \quad \text{или} \quad \frac{\partial h_i}{\partial x_i} = \dot{q}.$$

Подставляя значение h_i из уравнения (11.3), получаем

$$k_{ij} \frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} = -\dot{q}. \tag{11.11}$$

Это дифференциальное уравнение для температуры T по форме идентично уравнению для электрического потенциала φ в кристалле с непрерывно распределенными объемными зарядами [см. (4.17)].

Используя тот факт, что $k_{ij} = k_{ji}$, и переходя к главным осям тензора $[k_{ij}]$, мы получаем для T уравнение

$$k_1 \frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} + k_2 \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2} + k_3 \frac{\partial^2 T}{\partial x_3^2} = -\dot{q}. \tag{11.12}$$

Общая задача формулируется следующим образом: зная значения температуры на границах и распределение источников тепла в кристалле (если они имеются), нужно решить уравнение (11.12) и, таким образом, найти распределение температуры внутри кристалла.

Если среда изотропна и имеет коэффициент теплопроводности k, то уравнение (11.12) упрощается и принимает вид

$$k\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x_3^2}\right) = -\dot{q} \tag{11.13}$$

(уравнение Пуассона). Для многих различных краевых условий и распределений источников решения этого уравнения известны (например, из электростатики). Теперь мы опишем простую подстановку, посредством которой можно получить решение любой задачи о стационарном потоке тепла в кристалле из решения соответствующей задачи для изотропной среды.

Преобразуем уравнение (11.12) с помощью подстановок

$$\begin{gathered} x_1 = (k_1 k_2 k_3)^{-1/6} k_1^{1/3} X_1, \qquad x_2 = (k_1 k_2 k_3)^{-1/6} k_2^{1/2} X_2, \\ x_3 = (k_1 k_2 k_3)^{-1/6} k_3^{1/2} X_3. \end{gathered} \tag{11.14}$$

Это преобразование можно представить как однородную деформацию. Однако объем малого элемента при этом преобразовании остается фиксированным, так как

$$dX_1\, dX_2\, dX_3 = dx_1\, dx_2\, dx_3,$$

поэтому мощность источников $\dot{q}$ на единицу объема не изменяется. В результате такой подстановки уравнение (11.12) переходит в

$$(k_1 k_2 k_3)^{1/3}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial X_1^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial X_2^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial X_3^2}\right) = -\dot{q}.$$

Но это уравнение является уравнением распределения температуры, создаваемого источниками $\dot{q}$ в изотропной среде с коэффициентом теплопроводности, равным $(k_1\, k_2\, k_3)^{1/3}$.

Используя полученный результат, можно предложить следующий способ решения задачи для анизотропной среды. Начнем с решения соответствующей задачи о теплопроводности изотропной среды с коэффициентом теплопроводности $(k_1\, k_2\, k_3)^{1/3}$. Таким образом, мы получим некоторую картину распределения воображаемых источников, границ, изотерм и линий теплового потока. Затем исказим

картину согласно преобразованию (11.14). Тогда мы получим новое распределение, соответствующее решению задачи для анизотропной среды с коэффициентами теплопроводности k_1, k_2, k_3. При этом мы ставим условие, что мощность источников и температура, соответствующая определенным изотермам, не изменяются.

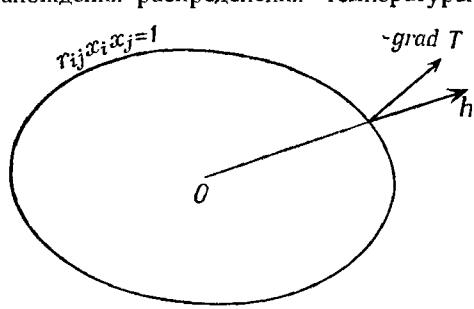
Теперь необходимо убедиться в законности такой процедуры. Справедливость этого преобразования для изотерм следует из всего вышеизложенного. Применимость же этого преобразования для векторов теплового потока требует дополнительного обоснования. Легко доказать, что если в задаче для изотропной среды H_1, H_2, H_3 — компоненты теплового потока в точке X_1, X_2, X_3, и если в соответствующей задаче для анизотропной среды h_1, h_2, h_3 — компоненты теплового потока в точке x_1, x_2, x_3, то

$$\frac{h_1}{H_1} = \frac{x_1}{X_1} \text{ и т. д.}$$

Таким образом, компоненты теплового потока преобразуются подобно координатам, что и требовалось доказать. Заметим, что этот результат неприменим к векторам градиента температуры, так как они в обоих случаях перпендикулярны изотермам.

Процесс преобразования иллюстрируется примером, приведенным ниже.

1. Тепловой поток от точечного источника. Описанный выше метод можно применить для нахождения распределения температуры вокруг точечного источника тепла, находящегося в бесконечно протяженном кристалле. Предварительно заметим, что форму изотермических поверхностей в этой задаче можно получить непосредственно, используя свойства радиуса-вектора и нормали характеристической поверхности. Забегая вперед, укажем, что тепло от точечного источника распространяется по прямым линиям (см. § 5); следовательно, если построить эллипсоид коэффициентов теплового сопротивления с центром в этой точке (фиг. 64), то радиус-вектор всегда лежит в направлении $\boldsymbol{h}$, а внешняя нормаль к поверхности эллипсоида в конце радиуса-вектора дает направление $-\operatorname{grad} T$. Поэтому сам эллипсоид подобен изотермической поверхности. *Изотер-*



Фиг. 64. Пример изотермической поверхности вокруг точечного источника тепла в бесконечном кристалле.

Такие поверхности по форме и ориентации подобны эллипсоиду коэффициентов теплового сопротивления кристалла.

мические поверхности вокруг точечного источника тепла в бесконечно протяженном кристалле по форме и ориентации всегда подобны эллипсоиду коэффициентов теплового сопротивления кристалла.

Переходя теперь к нахождению распределения температур, начнем с решения соответствующей задачи для изотропной среды. Пусть точечный источник тепла помещен в начале координат и выделяет в единицу времени количество тепла $\dot{Q}$. Во всех точках среды, за исключением начала координат, $\dot{q}=0$, поэтому из уравнения (11.13), используя X_1, X_2, X_3 вместо x_1, x_2, x_3, получаем

$$\frac{\partial^2 T}{\partial X_1^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial X_2^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial X_3^2}=0$$

(уравнение Лапласа). Как известно (и как легко проверить), решение этого уравнения записывается в виде

$$T=\frac{A}{R}+T_\infty, \tag{11.15}$$

где A — константа, $R=\left(X_1^2+X_2^2+X_3^2\right)^{1/2}$ и T_∞ — температура вдали от источника. Выбор такого вида решения объясняется тем, что изотермические поверхности являются сферами. Согласно уравнению (11.15), в начале координат T обращается в бесконечность, однако эту трудность легко избежать, предположив, что тепло распространяется не от точечного, а от малого, но конечного сферического источника.

Значение A можно определить, вычисляя скорость теплового потока через сферу радиусом R и приравнивая ее $\dot{Q}$. Таким образом, радиальный градиент температуры равен $-A/R^2$, поэтому тепловой поток через единицу поверхности равен kA/R^2, и, следовательно,

$$\frac{kA}{R^2}\,4\pi R^2=\dot{Q}.$$

Отсюда

$$A=\frac{\dot{Q}}{4\pi}\,k^{-1}.$$

Подставляя это значение A в уравнение (11.15), получаем следующее выражение для распределения температуры в изотропном случае:

$$T-T_\infty=\frac{\dot{Q}}{4\pi}\,k^{-1}\left(X_1^2+X_2^2+X_3^2\right)^{-1/2}.$$

Переход к анизотропному случаю осуществляем так, как это было описано в § 3. Выбирая Ox_1, Ox_2, Ox_3 в качестве главных осей, полагаем

$$k=(k_1k_2k_3)^{1/3};$$

делая подстановку (11.14), получаем

$$T - T_\infty = \frac{\dot{Q}}{4\pi}(k_1 k_2 k_3)^{-1/2}\left(\frac{x_1^2}{k_1}+\frac{x_2^2}{k_2}+\frac{x_3^2}{k_3}\right)^{-1/2}, \qquad (11.16)$$

что и является искомым распределением.

Очевидно, что вдоль любого выбранного радиуса разность $(T - T_\infty)$ падает обратно пропорционально расстоянию от источника. Нетрудно видеть также, что наше предварительное утверждение относительно формы изотермических поверхностей подтверждается, так как сферические изотермические поверхности, имеющие место для изотропного случая, искажаются в эллипсоид, подобный эллипсоиду коэффициентов теплового сопротивления. Отметим также, что в соответствии со сказанным в конце § 3, линии теплового потока остаются прямыми, тогда как линии максимального градиента температуры искажаются.

§ 4. Электропроводность

Формальное рассмотрение процесса переноса электричества в анизотропных кристаллах аналогично проведенному рассмотрению переноса тепла путем теплопроводности. Основным уравнением является обобщенный закон Ома:

$$j_i = -\sigma_{ik}\frac{\partial\varphi}{\partial x_k} = \sigma_{ik}E_k, \qquad (11.17)$$

где j_i — плотность тока, σ_{ik} — тензор удельной электропроводности, φ — потенциал и E_k — напряженность электрического поля. Вместе с тем, используя тензор удельного электрического сопротивления ρ_{ik}, можно выразить компоненты напряженности поля через компоненты плотности тока в виде

$$E_i = \rho_{ik} j_k. \qquad (11.18)$$

Матрица удельного электрического сопротивления обратна матрице удельной электропроводности. Численные значения удельного электрического сопротивления некоторых металлических кристаллов приведены в табл. 13.

Скорость выделения *джоулева тепла* в проводнике выражается скалярным произведением плотности тока и напряженности поля. Следовательно, количество тепла, выделяющегося в единице объема кристалла в единицу времени, равно

$$j_i E_i = \rho_{ik} j_i j_k = \rho j^2, \qquad (11.19)$$

где j — плотность тока, а ρ — удельное сопротивление в направлении тока.

ТАБЛИЦА 13

Удельные электрические сопротивления металлических кристаллов при 20 С*

Кристалл	Система	ρ_1, ρ_2, 10^{-8} ом·м	ρ_3, 10^{-8} ом·м
Олово	Тетрагональная	9,9	14,3
Висмут	Тригональная	109	138
Кадмий	Гексагональная	6,80	8,30
Цинк	»	5,91	6,13
Вольфрам	Кубическая	5,48	
Медь	»	1,51	

* Данные взяты из таблиц [54].

§ 5. О симметричности тензора $[k_{ij}]$ [1])

Обсуждая явление переноса тепла в анизотропном кристалле, мы считали справедливым соотношение

$$k_{ij} = k_{ji}. \tag{11.4}$$

Однако законность этого предположения совершенно не очевидна. Из него следует, например, что если градиент температуры в направлении x_1 вызывает некоторый тепловой поток в направлении x_2 (определяемый коэффициентом k_{21}), то тот же самый градиент температуры, направленный по x_2, будет вызывать тепловой поток (определяемый коэффициентом k_{12}) точно такой же величины в направлении x_1. Чтобы уяснить содержание рассматриваемого предположения, полезно сначала определить, к каким следствиям привело бы невыполнение соотношения (11.4).

Сначала разложим тензор $[k_{ij}]$ на симметричную и антисимметричную части (см. стр. 122). Затем повернем оси координат до совпадения с главными осями симметричной части тензора. Вторая часть при преобразовании осей координат остается антисимметричной (см. гл. I, § 3, п. 2). В итоге тензор принимает вид

$$\begin{bmatrix} k_{11} & 0 & 0 \\ 0 & k_{22} & 0 \\ 0 & 0 & k_{33} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & k_{12} & -k_{31} \\ -k_{12} & 0 & k_{23} \\ k_{31} & -k_{23} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & -k_{31} \\ -k_{12} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & -k_{23} & k_{33} \end{bmatrix}.$$

Если кристалл обладает симметрией то, очевидно, на компоненты тензора будут налагаться определенные ограничения. В качестве

[1]) § 5 и 6 настоящей главы являются более трудными и могут быть опущены при первом чтении.

примера возьмем кристалл, имеющий ось (поворотную или инверсионную) второго, третьего, четвертого или шестого порядков; пусть эта ось параллельна оси x_3. Если градиент температуры направлен вдоль x_3, то в силу симметрии тепловой поток также должен быть параллелен x_3. Поэтому

$$k_{23} = k_{31} = 0,$$

и тензор упрощается, принимая вид

$$\begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & 0 \\ -k_{12} & k_{22} & 0 \\ 0 & 0 & k_{33} \end{bmatrix}. \tag{11.20}$$

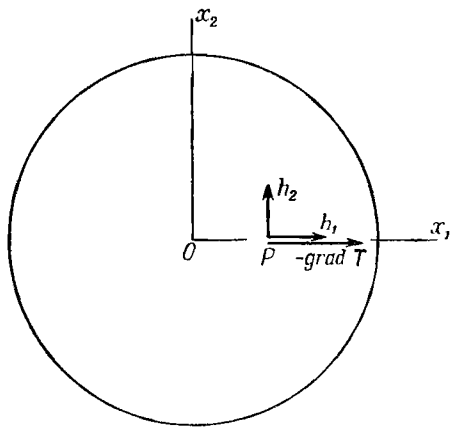
Из рассмотрения симметрии очевидно также, что наличие оси (поворотной или инверсионной) третьего, четвертого или шестого порядков обеспечивает выполнение соотношения $k_{11} = k_{22}$; следовательно, при этих условиях мы имеем

$$\begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & 0 \\ -k_{12} & k_{11} & 0 \\ 0 & 0 & k_{33} \end{bmatrix}. \tag{11.21}$$

Можно доказать непосредственно, что тензор, имеющий такую форму, не изменяется при *любом* повороте системы координат вокруг оси x_3.

Если в кристалле присутствуют плоскости симметрии, параллельные x_3, то легко доказать, что налагается дальнейшее ограничение

$$k_{12} = 0. \tag{11.22}$$



Фиг. 65. Схема, показывающая, что при $k_{ij} \neq k_{ji}$ распространение тепла будет происходить по спирали.

Теперь представим себе круглую пластинку (фиг. 65) из кристалла, принадлежащего к классу, для которого тензор $[k_{ij}]$ имеет форму (11.21); пластинка вырезана перпендикулярно главной оси симметрии x_3 и нагревается в центре O. Чтобы температура по всему периметру пластинки была одинаковой, поместим пластинку в круглый ящик из хорошо проводящего тепло материала. Как мы только что убедились, в рассматриваемом случае тензор коэффициентов теплопроводности, а следовательно, и уравнения, описывающие перенос тепла, имеют круговую симметрию относительно оси x_3. Форма и расположение пластинки при опыте таковы, что здесь сохраняется та же симметрия. Отсюда следует, что изотермы на плоской поверхности пластинки представляют собой окружности.

В точке P на оси x_1 тепловые потоки описываются выражениями

$$h_1 = -k_{11}\frac{\partial T}{\partial x_1}, \quad h_2 = -k_{21}\frac{\partial T}{\partial x_1} = k_{12}\frac{\partial T}{\partial x_1}, \quad h_3 = 0.$$

Следовательно, $\boldsymbol{h}$ составляет с Ox_1 угол θ, определяемый соотношением

$$\operatorname{tg}\theta = \frac{h_2}{h_1} = -\frac{k_{12}}{k_{11}}.$$

Вследствие круговой симметрии, направление $\boldsymbol{h}$ должно составлять с радиусом-вектором в любой точке пластинки тот же самый угол. Поэтому тепло должно распространяться по раскручивающейся спирали с постоянным наклоном касательной относительно радиуса-вектора.

Был предпринят ряд попыток обнаружить такое „спиралеобразное" распространение тепла в кристаллах, но все они закончились неудачей (Сорет, 1893, 1894 гг. [84, 85]; Фойгт, 1903 г. [92]). В связи с этим авторами было сделано общее заключение, что по крайней мере в пределах ошибок эксперимента распространение тепла от изолированного точечного источника происходит по прямым линиям и что соотношение (11.4) выполняется.

§ 6. Термодинамическое рассмотрение. Принцип Онзагера

При установлении симметричности таких тензоров, как тензоры диэлектрической и магнитной проницаемости и упругой жесткости, нам не приходилось непосредственно прибегать к экспериментальным данным. В симметричности этих тензоров мы убеждались, записывая выражение для энергии кристалла (точнее, ее изменения) в виде функции электрического и магнитного полей и компонент деформаций. При этом мы использовали то обстоятельство, что энергия являлась функцией только этих переменных (при условии, что они не были слишком велики). В данном случае такой способ неприменим; действительно, здесь нельзя написать подобное выражение для энергии, поскольку мы имеем дело с существенно отличным типом свойства кристаллов. Выше при рассмотрении других свойств мы считали, что кристалл находится в равновесном состоянии; например, при описании упругих свойств кристалла мы осуществляли деформацию кристалла так, что он сколь угодно медленно переходил из одного состояния равновесия в другое. На языке термодинамики это означает, что изменения были обратимы. Наоборот, процесс переноса тепла путем теплопроводности нельзя описывать, считая, что кристалл находится в равновесном состоянии. Тепло протекает через кристалл с конечной скоростью, и законы термодинамики обратимых процессов в этом случае неприменимы. При этом кристалл может находиться в стационарном состоянии, т. е. в состоянии, не изменяющемся со временем, но это состояние

нельзя считать равновесным, потому что системы, с которыми кристалл взаимодействует (тепловые источники или, если тепло создается за счет электрической энергии, электрические батареи и т. д.), испытывают непрерывные изменения. Термодинамическая теория, применимая к этому случаю, была впервые сформулирована Онзагером [1]) [72, 73] в 1931 г. Старую термодинамику более точно следует называть „термостатикой" в противоположность теории Онзагера, являющейся по существу термо*динамикой* необратимых процессов.

Теперь мы рассмотрим так называемый *принцип Онзагера* — общий принцип, приложимый ко всем явлениям переноса, к которым можно отнести и передачу тепла путем теплопроводности, и перенос электрических зарядов, и перенос вещества путем диффузии.

Уравнение, описывающее электрический ток в изотропном материале,

$$\boldsymbol{j} = -\sigma \operatorname{grad} \varphi,$$

можно записать в виде

$$\boldsymbol{j}_1 = L_1 \boldsymbol{X}_1, \tag{11.23}$$

где $\boldsymbol{j}_1 = \boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{X}_1 = -\operatorname{grad}\varphi$. Вектор $\boldsymbol{j}_1$ представляет собой *поток* (заряда), а $\boldsymbol{X}_1$ — *силу*. Аналогично, поток тепла пропорционален силе, согласно уравнению

$$\boldsymbol{j}_2 = L_2 \boldsymbol{X}_2, \tag{11.24}$$

где вектор $\boldsymbol{j}_2$ есть плотность теплового потока, ранее обозначавшаяся через $\boldsymbol{h}$, а сила $\boldsymbol{X}_2 = -(1/T)\operatorname{grad} T$. Причина введения множителя $1/T$ будет разъяснена позднее (T — абсолютная температура).

Уравнения (11.23) и (11.24) были бы справедливы в том виде, в каком они записаны, если бы оба процесса — перенос электричества и перенос тепла — происходили независимо друг от друга. Однако в общем случае это условие не выполняется; когда в цепи, состоящей из двух различных металлов, одновременно происходят оба процесса, они влияют друг на друга, что проявляется в возникновении различных термоэлектрических эффектов. В общем случае необходимо применять более универсальные уравнения

$$\begin{aligned} \boldsymbol{j}_1 &= L_{11}\boldsymbol{X}_1 + L_{12}\boldsymbol{X}_2, \\ \boldsymbol{j}_2 &= L_{21}\boldsymbol{X}_1 + L_{22}\boldsymbol{X}_2, \end{aligned} \tag{11.25}$$

в каждом из которых потоки линейно связаны с *обеими* силами, а не только с одной из них. Линейность зависимости между потоком и силой является предположением теории; вообще говоря, такое предположение будет справедливо лишь при достаточно малых силах. Принцип Онзагера утверждает, что в таком случае при условии правильного выбора потоков и сил (см. ниже)

$$L_{12} = L_{21}. \tag{11.26}$$

[1]) Более поздние работы рассмотрены в книге де-Гроота [30].

Можно проверить, что при нашем выборе определений $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{X}$ размерности L_{12} и L_{21} одинаковы.

В более общем случае, когда количество потоков (и соответственно сил) больше двух, уравнения (11.25) записываются в следующем виде:

$$j_l = L_{ij} X_j \qquad (l,\ j = 1,\ 2,\ \ldots,\ n). \tag{11.27}$$

Согласно принципу Онзагера,

$$L_{ij} = L_{ji}. \tag{11.28}$$

Важно отметить, что прежде чем применять принцип Онзагера, следует правильно выбрать $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{X}$ в уравнениях (11.25) и (11.27). Под словами „правильно выбрать" мы подразумеваем, что j и X должны подчиняться определенным правилам. Имея, например, дело с уравнением (11.27), мы должны прежде всего представлять себе, какие силы соответствуют нашим потокам, для того чтобы знать, какие члены расположены на главной диагонали, а какие являются побочными. В случае уравнений (11.25) совершенно ясно, что тепловой поток следует связывать с градиентом температуры, а электрический ток — с градиентом потенциала; однако необходимо дать общее правило для всех случаев. Сжатая сводка таких правил дана в книге де-Гроота [30]. В рамках этих правил имеется определенная свобода выбора $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{X}$ и для каждой выбранной системы $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{X}$ соотношение Онзагера (11.28) остается справедливым. Множитель $1/T$, входящий по определению в $\boldsymbol{X}_2$ в уравнения (11.25), появляется именно вследствие применения этих правил.

Мы еще вернемся к обсуждению уравнений (11.25), когда перейдем в следующей главе к рассмотрению термоэлектрических явлений. Здесь мы привели эти уравнения потому, что они могут служить простой иллюстрацией применения принципа Онзагера, приложимого также и к теплопроводности анизотропных кристаллов — непосредственному предмету рассмотрения в настоящей главе. Обсуждаемые нами потоки являются тремя компонентами теплового потока, параллельными трем осям координат. В общем случае они взаимодействуют друг с другом; это ясно из того факта, что градиент температуры, параллельный x_1, создает тепловой поток не только вдоль x_1, но также вдоль x_2 и вдоль x_3. Применение принципа Онзагера к этому случаю (несколько примитивное, как мы увидим ниже) дает соотношение (11.4).

Следует иметь в виду, что мы по существу не доказываем соотношение (11.4), а просто подводим его под более широкое утверждение, каким является принцип Онзагера.

Критика Казимира. Казимир [27] обратил внимание на определенные трудности, возникающие при применении принципа Онзагера к уравнениям (11.3). Во-первых, тепловые потоки не удовлетворяют одному из условий правильного выбора потоков, согласно которому

они должны быть производными по времени от переменных, определяющих термодинамическое состояние системы. Во-вторых, три компоненты теплового потока не являются непосредственно наблюдаемыми физическими величинами; в любом эксперименте, строго говоря, измеряется только дивергенция потока тепла (разность между теплом, втекающим в данный объем и вытекающим из него). Это последнее обстоятельство означает, что мы можем добавить к $[k_{ij}]$ произвольный тензор $[k^0_{ij}]$, не изменяющий $\operatorname{div} \boldsymbol{h}$, т. е. такой, что [1])

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(k^0_{ij}\frac{\partial T}{\partial x_j}\right)=0,$$

или

$$\frac{\partial k^0_{ij}}{\partial x_i}\frac{\partial T}{\partial x_j}+k^0_{ij}\frac{\partial^2 T}{\partial x_i\,\partial x_j}=0.$$

Это уравнение удовлетворяется для любых распределений температур при условии, что

$$k^0_{ij}=-k^0_{ji}, \tag{11.29}$$

$$\frac{\partial k^0_{ij}}{\partial x_i}=0. \tag{11.30}$$

Таким образом, тензор $[k_{ij}]$ определен не вполне однозначно, так как добавление антисимметричного тензора $[k^0_{ij}]$, удовлетворяющего условию (11.30), не приводит к изменению $\operatorname{div} \boldsymbol{h}$, а следовательно, не может быть обнаружено экспериментально. Поэтому мы не можем рассчитывать, что нам удастся каким-либо методом доказать симметричность $[k_{ij}]$. В соответствии с этим, Казимир показал, что корректное применение теории Онзагера приводит не к соотношению

$$k_{ij}-k_{ji}=0,$$

а скорее к соотношению

$$\frac{\partial (k_{ij}-k_{ji})}{\partial x_i}=0. \tag{11.31}$$

Если никаких добавочных предположений не вводится, то можно исходить только из утверждения (11.31). Однако мы видели, что наличие антисимметричной части в тензоре принципиально приводит к ненаблюдаемым физическим следствиям при условии, что эта часть удовлетворяет соотношению (11.30). Далее, согласно принципу Онзагера [соотношение (11.31)], антисимметричная часть $[k_{ij}]$ действительно удовлетворяет условию (11.30). Отсюда вытекает, что антисимметричная часть $[k_{ij}]$ не может быть обнаружена экспериментально. Ввиду

[1]) Мы должны считать, что $[k_{ij}]$ и $[k^0_{ij}]$ могут быть функциями координат, поскольку мы хотим в дальнейшем получить уравнения, применимые при переходе через границу кристалла.

этого мы вполне можем положить антисимметричную часть $[k_{ij}]$ равной нулю [1]) и записать

$$k_{ij} = k_{ji}. \tag{11.4}$$

Мы не обязательно должны делать так, но это допустимо.

Предположим, что соотношение (11.4) не выполняется. Тогда, как будет показано ниже, необходимо считать, что теплопроводность вакуума не равна нулю. Чтобы показать это, рассмотрим плоскую поверхность кристалла, перпендикулярную x_3. Если соотношение (11.4) не выполняется, то в кристалле

$$k_{31} - k_{13} \neq 0. \tag{11.32}$$

Согласно принципу Онзагера, записанному в форме (11.31), имеем

$$\frac{\partial (k_{31} - k_{13})}{\partial x_3} = 0$$

(производная берется по нормали к границе кристалла). Следовательно, неравенство (11.32) справедливо и для вакуума, откуда следует, что коэффициенты k_{31} и k_{13} не равны нулю. (Мы не можем, конечно, *доказать*, что в вакууме потоки тепла отсутствуют, так как у нас нет способа обнаружения тепловых потоков без дивергенции.) Если, наоборот, *предполагается*, что тензор $[k_{ij}]$ симметричен в вакууме [2]), то он *должен* быть симметричен и в кристалле; *тем более*, если положить тензор $[k_{ij}]$ в вакууме равным *нулю*, то в кристалле он должен быть симметричным.

Как мы нашли выше, наличие антисимметричной части у тензора $[k_{ij}]$ привело бы к тому, что при нагревании круглой кристаллической пластинки в ее центре тепло распространялось бы по спирали. Тепловой поток в таком случае состоял бы из двух частей: чисто радиального потока, определяемого мощностью источника, и чисто циркулярного потока. Этот второй поток не имеет дивергенции; мы могли бы сказать, что поэтому он принципиально не наблюдаем и что сделанные Соретом и Фойгтом попытки обнаружить его экспериментально основывались на ошибочных предположениях. Однако такое заключение не было бы совершенно корректным. Эти эксперименты показали только, что *если предполагать тензор* $[k_{ij}]$ *равным нулю в вакууме*, то в пределах экспериментальных ошибок в исследованных кристаллах он симметричен. Принцип Онзагера, записанный в форме соотношения (11.31), дает теоретическую основу экспериментальным исследованиям.

1. Теоретическое обоснование принципа Онзагера. Мы пока ничего не говорили о каком-либо доказательстве принципа Онзагера. Теоретическое обоснование его справедливости дает статистическая

[1]) Мы применяли аналогичные рассуждения при обосновании симметричности пьезоэлектрических тензоров (см. гл. VII, § 1).

[2]) Это можно считать следствием принципа Неймана (см. стр. 35).

механика. Рассмотрение этого вопроса выходит за рамки данной книги, и мы ограничимся лишь несколькими общими замечаниями.

Можно показать, что соотношения (11.28) являются следствием предположения о „микроскопической обратимости", которое состоит в том, что если скорости всех частиц, имеющихся в системе, одновременно заменить на противоположные, то все частицы должны будут двигаться обратно по пройденным ими путям, непрерывно повторяя в обратном порядке последовательность существовавших конфигураций. Иными словами, механические уравнения движения отдельных частиц симметричны по отношению ко времени, т. е. эти уравнения инвариантны относительно преобразования $t \to -t$. Это предположение относится к законам, управляющим процессами в микромире. Оно справедливо как для классических, так и для квантовомеханических законов движения при отсутствии магнитных полей [1]). Интересно отметить, что в магнитных полях микроскопическая обратимость перемещения не будет иметь места для заряженных частиц (это объясняется формой выражения для лоренцевой силы). Обратимость будет наблюдаться только в том случае, если при изменении направления скорости изменить на противоположное и направление поля. Поэтому соотношения (11.28) заменяются соотношениями

$$L_{ij}(\boldsymbol{H}) = L_{ji}(-\boldsymbol{H}). \tag{11.33}$$

Иными словами, L_{ij} является такой же функцией $\boldsymbol{H}$, как L_{ji} — функцией $-\boldsymbol{H}$.

Доказательство, данное Онзагером [72, 73] для своего принципа, носит общий характер и не зависит от частных особенностей конкретных процессов переноса; следовательно, получаемые с помощью этого принципа результаты справедливы для любых необратимых процессов переноса. Принцип Онзагера занимает в термодинамике необратимых процессов такое же место, как второй закон термодинамики в обычной термодинамике (термостатике). Второй закон термодинамики может быть принят в качестве аксиомы или может быть выведен из законов статистической механики; то же самое относится и к принципу Онзагера.

РЕЗЮМЕ

Закон распространения тепла в кристалле выражается в виде

$$h_i = -k_{ij}\frac{\partial T}{\partial x_j}, \tag{11.3}$$

где h_i — скорость теплового потока через единицу поверхности, перпендикулярную потоку, $\partial T/\partial x_j$ — градиент температуры

[1]) А также при отсутствии кориолисовых сил [72, 73].

и k_{ij} — коэффициенты теплопроводности. Коэффициенты k_{ij} образуют тензор второго ранга. Уравнение (11.3) можно разрешить относительно $\partial T/\partial x_j$; это дает

$$\frac{\partial T}{\partial x_i} = -r_{ij}h_j, \tag{11.8}$$

где r_{ij} — коэффициенты теплового сопротивления. Матрица коэффициентов теплового сопротивления $\mathbf{r} = (r_{ij})$ обратна матрице коэффициентов теплопроводности $\mathbf{k} = (k_{ij})$:

$$\mathbf{r} = \mathbf{k}^{-1}. \tag{11.9}$$

Можно доказать (см. ниже), что $k_{ij} = k_{ji}$; поэтому $r_{ij} = r_{ji}$, и оба тензора $[k_{ij}]$ и $[r_{ij}]$ можно привести к общим главным осям. Главные коэффициенты теплопроводности и главные коэффициенты теплового сопротивления являются взаимно обратными величинами: $r_1 = 1/k_1$, $r_2 = 1/k_2$, $r_3 = 1/k_3$. Характеристический эллипсоид коэффициентов теплопроводности

$$k_1x_1^2 + k_2x_2^2 + k_3x_3^2 = 1 \tag{11.7}$$

и характеристический эллипсоид коэффициентов теплового сопротивления

$$r_1x_1^2 + r_2x_2^2 + r_3x_3^2 = 1$$

должны согласовываться с симметрией кристалла в соответствии с принципом Неймана.

Когда тепловой поток протекает через плоскопараллельную пластинку, поверхности которой являются изотермическими, то в общем случае, наряду с переносом тепла по нормали к пластинке, происходит перенос тепла параллельно ее поверхности. Отношение теплового потока, нормального к пластинке, к градиенту температуры равно коэффициенту теплопроводности в направлении нормали к пластинке. Если же тепло распространяется вдоль длинного стержня, то в общем случае имеет место как продольный, так и поперечный градиенты температуры. Отношение продольного градиента температуры к тепловому потоку равно коэффициенту теплового сопротивления в направлении длины стержня.

Для стационарного теплового потока в однородном кристалле уравнение (11.3) можно объединить с уравнением сохранения

$$\operatorname{div} \boldsymbol{h} = \dot{q}, \quad \text{или} \quad \frac{\partial h_i}{\partial x_i} = \dot{q},$$

где $\dot{q}$ — скорость выделения тепла источниками в единице объема; это дает

$$k_{ij}\frac{\partial^2 T}{\partial x_i \partial x_j} = -\dot{q}, \tag{11.11}$$

или при приведении к главным осям

$$k_1\frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2}+k_2\frac{\partial^2 T}{\partial x_2^2}+k_3\frac{\partial^2 T}{\partial x_3^2}=-\dot{q}. \qquad (11.12)$$

С помощью простой подстановки (11.14) решение любой задачи о стационарном тепловом потоке в анизотропной среде можно получить непосредственно из решения аналогичной задачи для изотропной среды.

Изотермические поверхности вокруг точечного источника тепла, находящегося в бесконечно протяженном кристалле, по форме и ориентации подобны эллипсоиду коэффициентов теплового сопротивления для такого кристалла. Этот результат прямо следует из свойства радиуса-вектора и нормали характеристической поверхности. Вдоль любой прямой, идущей из точки, где находится источник, разность температур $(T-T_\infty)$ изменяется обратно пропорционально расстоянию от источника.

Уравнения, описывающие электрический ток проводимости в кристаллах, формально аналогичны уравнениям, описывающим перенос тепла:

$$j_l=-\sigma_{ik}\frac{\partial\varphi}{\partial x_k}=\sigma_{ik}E_k, \qquad (11.17)$$

$$E_i=\rho_{ik}j_k; \qquad (11.18)$$

здесь j_l — плотность тока, φ — потенциал, E_k — напряженность поля, σ_{ik} и ρ_{ik} — соответственно тензоры удельной электропроводности и удельного сопротивления. Количество джоулева тепла, выделяющегося в единице объема, определяется выражением

$$j_iE_i=\rho_{ik}j_ij_k. \qquad (11.19)$$

Соотношение $k_{ij}=k_{ji}$. Если $k_{ij}\neq k_{ji}$, то от изолированного точечного источника тепло должно распространяться по спирали. Поскольку эксперименты, поставленные с целью обнаружения такого спирального распространения тепла, окончились неудачей, было сделано заключение, что $k_{ij}=k_{ji}$. Это соотношение теперь рассматривается как частный случай принципа Онзагера. Принцип Онзагера утверждает, что если соответствующим образом выбранные потоки $\boldsymbol{j_i}$ и силы $\boldsymbol{X_j}$ связаны между собой линейными соотношениями

$$\boldsymbol{j_l=L_{ij}X_j}\qquad (\boldsymbol{l},\ \boldsymbol{j}=1,\ 2,\ \ldots,\ n), \qquad (11.27)$$

то $L_{ij}=L_{jl}$ [при наличии магнитных полей $L_{ij}(\boldsymbol{H})=L_{ji}(-\boldsymbol{H})$].

Непосредственное использование принципа Онзагера позволяет, казалось бы, заключить, что $k_{ij}=k_{ji}$. Однако, как показывает более тщательный анализ, для того чтобы строго вывести соотношение

$k_{ij} = k_{ji}$ из принципа Онзагера, необходимо предположить, что тензор $[k_{ij}]$ в вакууме симметричен или, в частности, равен нулю.

Роль принципа Онзагера в термодинамике необратимых процессов соответствует роли второго закона в обычной термодинамике (термостатике). Оба они могут быть получены на основании законов статистической механики.

ЗАДАЧИ

1. Считая, что на фиг. 63, *а* изображен образец, вырезанный из кристалла кварца, и используя значения коэффициентов теплопроводности, приведенные в табл. 12, найти ориентацию кристалла, при которой угол θ между векторами $-\operatorname{grad} T$ и $\boldsymbol{h}$ будет наибольшим. Вычислить значение $\theta_{\text{макс}}$.

Глава XII

ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСТВО[1])

В предыдущей главе перенос тепла и электрический ток проводимости в кристаллах рассматривались как два отдельных процесса. Это было возможно потому, что мы обсуждали только такие случаи, когда имеет место лишь один из двух названных процессов. Однако мы отмечали, что если оба процесса происходят одновременно, то они взаимодействуют друг с другом; результат такого взаимодействия проявляется в виде термоэлектрических эффектов. В настоящей главе мы сформулируем основные уравнения, описывающие термоэлектрические явления в кристаллах, и покажем, как эти уравнения применяются к различным наблюдаемым эффектам. Сначала рассмотрим термоэлектрические эффекты в изотропных проводниках.

§ 1. Термоэлектрические эффекты в изотропных проводниках

В изотропных проводниках возможны три термоэлектрических эффекта.

1. Термо-э.д.с. (*эффект Зеебека*). Если из двух различных металлов a и b составить замкнутую цепь и места контактов поддерживать при различных температурах, то в этой цепи возникает э.д.с. Если, например, в участок a цепи (фиг. 66) включен конденсатор, то он зарядится.

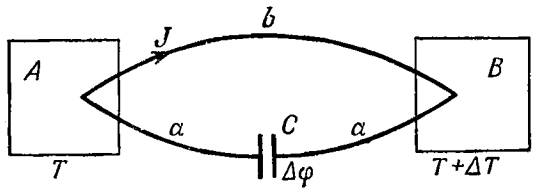
2. Эффект Пельтье. Пусть через контакт между двумя различными металлами течет электрический ток. Тогда для того, чтобы поддерживать температуру этого контакта постоянной, необходимо непрерывно подводить к нему (или отводить от него) тепло. Количество этого тепла пропорционально протекающему току и изменяет знак при изменении направления тока на обратное. Можно записать

$$\dot{Q}_{ab} = \Pi_{ab} J, \tag{12.1}$$

где $\dot{Q}_{ab}$ — скорость, с которой тепло поглощается в контакте, когда от металла a к металлу b течет ток J, и Π_{ab} — *коэффициент Пельтье*, зависящий от рода соприкасающихся проводников и от температуры.

[1]) Эта глава, более трудная, чем остальные, может быть опущена при первом чтении.

3. Эффект Томсона. Пусть через неравномерно нагретую проволоку постоянного поперечного сечения, изготовленную из однородного металла, пропускается ток. Чтобы при этом распределение температуры оставалось неизменным, к проволоке необходимо подводить тепло. Количество тепла, которое надо подводить в единицу времени



Фиг. 66. Схема мысленного опыта для получения соотношений Томсона.

к элементу проволоки, имеющему перепад температуры в направлении тока, равный dT, определяется формулой

$$d\dot{Q} = \tau J\, dT, \tag{12.2}$$

где τ — *коэффициент Томсона.*

1. Вывод соотношений Томсона. Введенные выше величины, характеризующие эффекты Зеебека, Пельтье и Томсона, связаны двумя соотношениями, известными под названием *соотношений Томсона.* Сейчас мы выведем эти соотношения, используя методы термодинамики необратимых процессов, описанные в предыдущей главе[1]).

Рассмотрим цепь, изображенную на фиг. 66. Предположим, что контакты между проводниками a и b помещены в два больших резервуара тепла A и B, имеющих температуру T и $T+\Delta T$, и что на обкладках конденсатора C установилась разность потенциалов $\Delta\varphi$, причем обкладка, ближайшая к B, имеет более высокий потенциал. Предполагается, что конденсатор не обладает теплоемкостью, а проводники a и b термически (и электрически) изолированы. В гл. XI, § 6, мы записали уравнения, связывающие электрический ток j_1 и поток тепла j_2 с „силами“ $X_1 = -\operatorname{grad}\varphi$ и $X_2 = -(1/T)\operatorname{grad} T$, в виде

$$\begin{aligned} j_1 &= L_{11}X_1 + L_{12}X_2, \\ j_2 &= L_{21}X_1 + L_{22}X_2 \end{aligned} \tag{12.3}$$

и соотношение Онзагера

$$L_{12} = L_{21}. \tag{12.4}$$

[1]) Нижеследующий вывод, сделанный Полдером, взят с некоторыми изменениями из книги де-Гроота ([30], § 57).

Для рассматриваемой нами цепи эти уравнения принимают форму

$$J = -L_{11}\Delta\varphi - L_{12}\frac{\Delta T}{T}, \tag{12.5}$$

$$H = -L_{21}\Delta\varphi - L_{22}\frac{\Delta T}{T}, \tag{12.6}$$

где H — скорость, с которой тепло распространяется вдоль проводников от A к B, а J — ток, текущий в цепи, как показано на фиг. 66 (для $\Delta T = 0$ и $\Delta\varphi > 0$ ток J *отрицателен*; для $\Delta\varphi = 0$ и $\Delta T > 0$ скорость H *отрицательна*). Вследствие эффектов Джоуля и Томсона в проволоке будет выделяться тепло. Скорость выделения джоулева тепла пропорциональна квадрату силы тока J^2, который в свою очередь, согласно уравнению (12.5), пропорционален ΔT^2; скорость выделения тепла Томсона пропорциональна $J\Delta T$, т. е., согласно уравнению (12.5), пропорциональна ΔT^2. Скорость самого потока тепла в соответствии с уравнением (12.6) пропорциональна ΔT. Поэтому в первом приближении можно пренебречь как джоулевым теплом, так и теплом Томсона и считать поток тепла между резервуарами *равномерным*. Следует принять во внимание, что во всех случаях учитываются только члены первого порядка и что, например, в уравнениях (12.5) и (12.6) опущены члены более высокого порядка, чем ΔT и $\Delta\varphi$.

Отметим сначала, что если $\Delta T = 0$, то

$$J = -L_{11}\Delta\varphi, \tag{12.7}$$

и, следовательно, L_{11} есть изотермическая электропроводность цепи, содержащей конденсатор. Теплопроводность λ цепи между резервуарами в отсутствие тока ($J = 0$) находим, исключая $\Delta\varphi$ из уравнений (12.5) и (12.6); при этом получаем

$$H = -\lambda\Delta T, \tag{12.8}$$

где

$$\lambda = \frac{L_{11}L_{22} - L_{12}L_{21}}{L_{11}}\frac{1}{T}.$$

Задаваясь уравнениями (12.5) и (12.6), легко показать существование перечисленных выше термоэлектрических явлений и вывести соотношения между соответствующими коэффициентами. Предположим сначала, что величина ΔT фиксирована, и рассмотрим стационарное состояние, когда ток отсутствует ($J = 0$). Тогда из уравнения (12.5) следует, что

$$\frac{\Delta\varphi}{\Delta T} = -\frac{L_{12}}{L_{11}T}, \tag{12.9}$$

где $\Delta\varphi$ есть термо-э.д.с., а уравнение (12.9) определяет *термоэлектрическую мощность* контакта, т. е. разность потенциалов на единицу разности температур в отсутствие тока.

Положим теперь $\Delta T = 0$. Разность потенциалов будет вызывать как электрический ток, так и тепловой поток (обусловленный эффектом Пельтье) между тепловыми резервуарами. Отношение этих потоков равно

$$\frac{H}{J} = \frac{L_{21}}{L_{11}} = \Pi_{ab}. \tag{12.10}$$

Здесь Π_{ab} — коэффициент Пельтье, определяющий количество тепла, поглощаемого в контакте A.

Из соотношений Онзагера (12.4) с учетом (12.9) и (12.10) сразу же вытекает, что

$$\frac{d\varphi}{dT} = -\frac{\Pi_{ab}}{T}. \tag{12.11}$$

Это соотношение есть второе соотношение Томсона; оно связывает термоэлектрическую мощность с коэффициентом Пельтье. Интересно напомнить, что Томсон вывел это соотношение, используя законы термодинамики (термостатики). Второй закон термостатики (записанный в виде равенства) неприменим к термоэлектрическим эффектам из-за необратимости неизбежно сопровождающих их процессов переноса тепла и переноса заряда. Томсон исходил из предположения, что выделение тепла Томсона и тепла Пельтье можно рассматривать как обратимые процессы, и поэтому применил к ним второй закон термодинамики. Таким способом он получил уравнение (12.11) (см., например, книгу Эпштейна [37]), которое позднее было полностью подтверждено экспериментально. Разделение явления на обратимую и необратимую части не может быть обосновано термодинамически и является, как ясно сознавал Томсон, дополнительным предположением. Необходимость введения такого предположения является недостатком теории; этой трудности удалось избежать только в результате создания новой термодинамики. При новом подходе, в котором явление рассматривается в целом, уравнение (12.11) оказывается следствием принципа Онзагера.

Первое соотношение Томсона непосредственно следует из первого закона термостатики:

$$\Pi_{ab} J - (\Pi_{ab} + \Delta\Pi_{ab}) J + (\tau_b - \tau_a) J \Delta T = J \Delta\varphi,$$

или

$$-\Delta\Pi_{ab} + (\tau_b - \tau_a)\Delta T = \Delta\varphi, \tag{12.12}$$

где τ_a и τ_b — теплоты Томсона. Исключая φ из соотношений Томсона (12.11) и (12.12), мы получаем

$$\tau_b - \tau_a = \frac{d\Pi_{ab}}{dT} - \frac{\Pi_{ab}}{T}; \tag{12.13}$$

это соотношение связывает тепло Томсона и тепло Пельтье. Исключая Π_{ab}, находим

$$\tau_a - \tau_b = T\frac{d^2\varphi}{dT^2}; \tag{12.14}$$

последнее соотношение связывает тепло Томсона и производную от термоэлектрической мощности.

Полезно запомнить, что при заданной температуре тепло Пельтье пропорционально $d\varphi/dT$ [согласно соотношению (12.11)], а разность между количествами тепла Томсона пропорциональна $d^2\varphi/dT^2$ [согласно уравнению (12.14)].

§ 2. Термоэлектрические эффекты в изотропной непрерывной среде

В § 1, п. 1 мы имели дело с термоэлектрическими эффектами в замкнутой цепи, состоящей из двух однородных проводников из разных металлов. Прежде чем переходить к кристаллам, рассмотрим теорию термоэлектрических эффектов в изотропной непрерывной среде (де-Гроот [30], Кэллен [25]). Будем считать, что свойства среды меняются от точки к точке; это, очевидно, необходимо, коль скоро мы включили в рассмотрение и эффект Пельтье. Тогда выделение тепла Пельтье будет распределено по всей среде. Обычный эффект Пельтье в контакте является частным случаем этой теории, если считать, что каждый из металлов образует однородную среду и что только в месте контакта происходит скачкообразное изменение свойств.

Мы будем излагать теорию так, чтобы облегчить ее последующее обобщение на анизотропную среду.

1. Вывод уравнений потока. Зададимся следующими основными уравнениями, связывающими потоки и силы:

$$\boldsymbol{j}^e = -\alpha \operatorname{grad} \bar{\mu} - \beta \frac{\operatorname{grad} T}{T}, \tag{12.15}$$

$$\boldsymbol{h} = -\beta \operatorname{grad} \bar{\mu} - \gamma \frac{\operatorname{grad} T}{T}. \tag{12.16}$$

Эти уравнения являются обобщением уравнений (12.5) и (12.6). Предположим, что в результате движения электронов с зарядом $-e$ в среде создается электрический ток плотностью $\boldsymbol{j}$. Тогда $\boldsymbol{j}^e = -\boldsymbol{j}/e$ есть плотность потока электронов (число электронов, проходящих за единицу времени через единицу поверхности, нормальной к направлению их движения). Вектор $\boldsymbol{h}$, как и прежде, означает плотность потока тепла. Позднее мы подробнее остановимся на строгом определении $\boldsymbol{h}$. Величина $\bar{\mu}$ есть электрохимический потенциал электронов проводимости в металле (см. ниже), α, β и γ — константы. Выбор потоков $\boldsymbol{j}^e$ и $\boldsymbol{h}$ и сил $-\operatorname{grad}\bar{\mu}$ и $-(\operatorname{grad} T)/T$ сделан в соответствии с правилами термодинамики необратимых процессов (см. стр. 250) [1]), поэтому

[1]) Отметим, что более строгое рассмотрение следует проводить с учетом критики Казимира (см. стр. 250).

мы имеем право применить принцип Онзагера и положить коэффициент при $-\operatorname{grad}\bar{\mu}$ в уравнении (12.16) равным β.

Записывая потенциал $\bar{\mu}$ в виде

$$\bar{\mu} = \mu - e\varphi, \tag{12.17}$$

мы разделяем его на две части: химическую часть, зависящую от состава и температуры среды, и электрическую часть $-e\varphi$. Следует отметить, что вследствие зависимости μ от температуры $\operatorname{grad}\bar{\mu}$ содержит часть, зависящую от $\operatorname{grad} T$. Таким образом, влияние градиента температуры описывается не только вторыми членами в уравнениях (12.15) и (12.16). Это не совсем удобно, поэтому можно было бы изменить форму уравнений (12.15) и (12.16) так, чтобы они содержали по два независимых члена в правой части: один — отражающий лишь влияния неоднородности состава, другой — описывающий только влияние градиента температуры. Однако, несмотря на некоторое неудобство, лучше использовать имеющуюся систему уравнений, так как в том случае, когда уравнения (12.15) и (12.16) заданы, последующее рассмотрение сравнительно просто.

2. Скорость выделения тепла. Чтобы понять физический смысл коэффициента α в уравнении (12.15), рассмотрим равномерно нагретую однородную среду. Тогда $\operatorname{grad}\mu = 0$ и $\operatorname{grad}\bar{\mu} = -e\operatorname{grad}\varphi$. Поэтому

$$\boldsymbol{j}^e = -\frac{\boldsymbol{j}}{e} = \alpha e \operatorname{grad}\varphi,$$

откуда следует, что $\alpha e^2 = \sigma$ (σ — удельная электропроводность), или

$$\alpha^{-1} = e^2\rho, \tag{12.18}$$

где ρ — удельное электрическое сопротивление.

Найдем теперь из уравнений (12.15) и (12.16) выражение для скорости выделения тепловой энергии. Сначала определим $\operatorname{grad}\bar{\mu}$ из уравнения (12.15), а затем подставим его в (12.16). Тогда

$$\operatorname{grad}\bar{\mu} = -\alpha^{-1}\boldsymbol{j}^e - \alpha^{-1}\beta\frac{\operatorname{grad} T}{T}, \tag{12.19}$$

$$\boldsymbol{h} = \alpha^{-1}\beta\boldsymbol{j}^e + (\alpha^{-1}\beta^2 - \gamma)\frac{\operatorname{grad} T}{T}. \tag{12.20}$$

Введем обозначение $\alpha^{-1}\beta/T = \Sigma$. Позднее мы увидим (см. стр. 265), что $-\Sigma/e$ есть абсолютная термоэлектрическая мощность проводника в данной точке при данной температуре. Уравнения (12.19) и (12.20) теперь переходят в

$$\operatorname{grad}\bar{\mu} = -\alpha^{-1}\boldsymbol{j}^e - \Sigma\operatorname{grad} T, \tag{12.21}$$

$$\boldsymbol{h} = T\Sigma\boldsymbol{j}^e - k\operatorname{grad} T, \tag{12.22}$$

где $k = -(\alpha^{-1}\beta^2 - \gamma)/T$ — коэффициент теплопроводности в отсутствие электрического тока ($\boldsymbol{j}^e = 0$). Заметим, что Σ связывает градиент электрохимического потенциала с градиентом температуры.

Если электрический ток отсутствует, то поток энергии (скорость протекания энергии через единицу поверхности, перпендикулярной направлению потока), который мы обозначим через $\boldsymbol{j}^u$, равен тепловому потоку $\boldsymbol{h}$. Однако, когда происходит перенос электронов, поток $\boldsymbol{j}^u$ должен содержать член, учитывающий это движение. Можно показать, что, в действительности,

$$\boldsymbol{j}^u = \boldsymbol{h} + \bar{\mu}\boldsymbol{j}^e. \tag{12.23}$$

Поскольку не вполне очевидно, что следует понимать под скоростью теплового потока при наличии электрического тока, определения, даваемые различными авторами, не одинаковы. Если не выходить за пределы задач, которые ставятся в настоящей книге, то можно предложить читателю просто принять уравнение (12.23) в качестве определения $\boldsymbol{h}$, а также считать, что величина $\boldsymbol{h}$, определенная таким путем, удовлетворяет уравнению (12.16).

Используя выражение (12.22) для $\boldsymbol{h}$, уравнение (12.23) для потока энергии можно записать в виде

$$\boldsymbol{j}^u = (T\Sigma + \bar{\mu})\boldsymbol{j}^e - k \operatorname{grad} T. \tag{12.24}$$

Таким образом, $\boldsymbol{j}^u$ состоит из двух слагаемых: одно из них обусловлено протекающим электрическим током, а второе, уже известное нам, возникает за счет градиента температуры.

Скорость выделения тепла в единичном объеме в окрестности данной точки равна взятой со знаком минус дивергенции вектора $\boldsymbol{j}^u$. Таким образом,

$$-\operatorname{div}\boldsymbol{j}^u = -\boldsymbol{j}^e \operatorname{grad}(T\Sigma + \bar{\mu}) - (T\Sigma + \bar{\mu}) \operatorname{div}\boldsymbol{j}^e + \operatorname{div}(k \operatorname{grad} T).$$

Так как мы рассматриваем только стационарные состояния, то $\operatorname{div}\boldsymbol{j}^e = 0$ и второй член в правой части исчезает. Следовательно, мы имеем

$$-\operatorname{div}\boldsymbol{j}^u = -\boldsymbol{j}^e(\Sigma \operatorname{grad} T + \operatorname{grad}\bar{\mu}) - T\boldsymbol{j}^e \operatorname{grad}\Sigma + \operatorname{div}(k \operatorname{grad} T).$$

Используя уравнение (12.21) и формулу (12.18), получаем

$$-\operatorname{div}\boldsymbol{j}^u = e^2\rho(\boldsymbol{j}^e)^2 - T\boldsymbol{j}^e \cdot \operatorname{grad}\Sigma + \operatorname{div}(k \operatorname{grad} T). \tag{12.25}$$

Таково полное выражение для скорости выделения тепла в единичном объеме тела при наличии: 1) электрического тока (с плотностью $-e\boldsymbol{j}^e$), 2) градиента состава ($\operatorname{grad}\Sigma$) и 3) градиента температуры ($\operatorname{grad} T$). Первый член в правой части представляет собой джоулево тепло, второй — тепло, обусловленное термоэлектрическими

эффектами. Последний член имеет для нас наибольший интерес; обозначим его через $\dot{q}$:

$$\dot{q} = -Tj^e \operatorname{grad} \Sigma. \tag{12.26}$$

Третий член в правой части (12.25) есть тепло, отводимое в соседние элементы объема благодаря обычной теплопроводности (в отсутствие электрических токов).

Если тело находится в стационарном состоянии, то в нем, конечно, не может происходить выделение тепла, так как оно приводило бы к повышению его температуры. Таким образом, в стационарном состоянии — $\operatorname{div} \boldsymbol{j}^u = 0$, и все три члена в правой части уравнения (12.25) должны иметь такие значения, чтобы их сумма была равна нулю. Например, *выделение* тепла в некотором объеме за счет эффекта Джоуля и термоэлектрических явлений должно компенсироваться точно таким же *отводом* тепла, что обусловливается соответствующим распределением температур, характеризуемым последним членом в уравнении (12.25).

3. Вывод из полученных уравнений формул для наблюдаемых термоэлектрических эффектов. Из уравнений (12.15) и (12.16) мы получили уравнения (12.21) и (12.22) и, наконец, уравнение (12.25) для скорости выделения тепла. Рассмотрим теперь, как можно вывести из этих уравнений выражения для наблюдаемых термоэлектрических величин — термо-э.д.с., тепла Пельтье и тепла Томсона.

1) Термо-э.д.с. Выражение для термо-э.д.с. термопары в зависимости от Σ для двух металлов получается интегрированием правой и левой частей уравнения (12.21) по замкнутой цепи, изображенной на фиг. 66. Для стационарного состояния $\boldsymbol{j}^e = 0$, и уравнение (12.21) принимает форму

$$\operatorname{grad}(\mu - e\varphi) = -\Sigma \operatorname{grad} T; \tag{12.27}$$

тогда интегрирование дает

$$\int d\mu - e \int d\varphi = -\int \Sigma\, dT.$$

Если мы начнем с одной обкладки конденсатора и, проинтегрировав по всей цепи, придем к другой, то начальное и конечное значения μ будут равны, так как они относятся к одному и тому же металлу при одной и той же температуре; поэтому первый член равен нулю. В результате интегрирования получаем

$$e\,\Delta\varphi = \left(\Sigma^{(b)} - \Sigma^{(a)}\right)\Delta T.$$

Отсюда определяем термоэлектрическую мощность:

$$\frac{\Delta\varphi}{\Delta T} = -\frac{\Sigma^{(a)} - \Sigma^{(b)}}{e}. \tag{12.28}$$

Члены $-\Sigma^{(a)}/e$ и $-\Sigma^{(b)}/e$ можно назвать *абсолютными термоэлектрическими мощностями* двух рассматриваемых металлов в том смысле, что разность между такими величинами для любой пары металлов дает наблюдаемое значение термоэлектрической мощности.

2) *Эффект Пельтье.* Так как $\operatorname{div} \boldsymbol{j}^e = 0$, то $\boldsymbol{j}^e$ можно ввести под знак производной в уравнении (12.26) для тепла термоэлектрического эффекта, которое при этом принимает другую форму

$$\dot{q} = -T \operatorname{div} (\Sigma \boldsymbol{j}^e). \tag{12.26a}$$

Для поверхности контакта между проводниками уравнение (12.26а) упрощается: выражение для скорости выделения тепла на единицу площади контакта имеет вид

$$-T\Delta_n(\Sigma \boldsymbol{j}^e),$$

где $\Delta_n(\Sigma \boldsymbol{j}^e)$ — скачок нормальной компоненты $\Sigma \boldsymbol{j}^e$. Так как компонента $\boldsymbol{j}^e$, нормальная к поверхности контакта, непрерывна, это выражение можно записать в виде

$$-T\left(\Sigma^{(a)} - \Sigma^{(b)}\right) j_n^e, \tag{12.29}$$

где индексы (a) и (b) относятся к двум различным проводникам, а j_n^e — нормальная компонента, направленная в сторону a. Выражение (12.29) описывает выделение тепла Пельтье в общем случае и остается справедливым даже тогда, когда ток пересекает поверхность контакта не по направлению нормали. Если направление вектора плотности тока $\boldsymbol{j}$ на поверхности контакта совпадает с направлением нормали от a к b (т. е. поток электронов направлен от b к a), то выражение для скорости выделения тепла на единицу площади контакта имеет вид

$$-T\left(\Sigma^{(a)} - \Sigma^{(b)}\right)\frac{j}{e}.$$

Поэтому, учитывая определение (12.1), получаем

$$\Pi_{ab} = \frac{T\left(\Sigma^{(a)} - \Sigma^{(b)}\right)}{e}. \tag{12.30}$$

Из формулы (12.30) в сочетании с соотношением (12.28) сразу следует второе соотношение Томсона (12.11).

3) Эффект Томсона. Чтобы получить формулу для тепла Томсона из уравнения (12.26), рассмотрим вновь условия, при которых было введено определение тепла Томсона. Как уже указывалось на стр. 258, мы рассматриваем неравномерно нагретую проволоку из однородного металла с постоянным поперечным сечением A, через которую пропускается электрический ток J. Пространственные изменения происходят только вдоль проволоки; это направление мы примем за ось x. Пусть ток J течет в сторону возрастания x. Тогда вектор $\boldsymbol{j}^e$

направлен в сторону уменьшения x. Поэтому из уравнения (12.26) получаем

$$\dot{q} = T j^e \frac{d\Sigma}{dx}.$$

Таким образом, в элементе длины dx в единицу времени выделяется тепло

$$\dot{q} A\, dx = T j^e A\, d\Sigma = T\left(\frac{J}{e}\right) d\Sigma = -\tau J\, dT,$$

где коэффициент Томсона τ связан с Σ выражением

$$\tau = -\frac{T}{e}\left(\frac{\partial \Sigma}{\partial T}\right)_x. \tag{12.31}$$

Записывая это выражение для обоих проводников a и b и комбинируя его с формулой (12.30), легко получить уравнение (12.13).

4) Тепло Пельтье и тепло Томсона. Покажем теперь другим способом, что уравнение (12.26) дает выражения для тепла Пельтье и тепла Томсона. Для этого нужно учесть, что Σ зависит от координаты двояким образом: Σ меняется с координатой, во-первых, вследствие неоднородности свойств среды (например, при пересечении поверхности контакта между различными металлами) и, во-вторых, вследствие неравномерного распределения температуры. Следовательно, grad Σ содержит два члена, и мы можем записать

$$\dot{q} = -j_i^e T \frac{\partial \Sigma}{\partial x_i} = -j_i^e T\left(\frac{\partial \Sigma}{\partial x_i}\right)_T - j_i^e T\left(\frac{\partial \Sigma}{\partial T}\right)_x \frac{\partial T}{\partial x_i}. \tag{12.32}$$

Первый член в правой части представляет собой тепло Пельтье, пропорциональное току и существующее благодаря изменениям свойств среды с координатой (при постоянной температуре). Второй член представляет собой тепло Томсона, пропорциональное току и градиенту температуры.

4. Порядок величины коэффициентов. Оценим порядок величины коэффициентов, стоящих в уравнениях (12.15) и (12.16). Для хорошего проводника измеряемые величины обычно имеют следующие типичные значения в единицах MKS:

$$k = 420 \ \textit{дж/м} \cdot \textit{сек} \cdot \textit{град},$$
$$\rho = 1{,}8 \cdot 10^{-8} \ \textit{ом} \cdot \textit{м}.$$

Так как $e = 1{,}6 \cdot 10^{-19}$ ед. MKS, то абсолютная термоэлектрическая мощность

$$\frac{\Sigma}{e} = 1{,}0 \cdot 10^{-5} \ \textit{в/град}, \qquad \Sigma = 1{,}6 \cdot 10^{-24}.$$

Далее, находим

$$\alpha^{-1} = e^2\rho = 4{,}6 \cdot 10^{-46}; \quad \alpha = \mathbf{2{,}2 \cdot 10^{45}}.$$

Если взять $T = 300^\circ$ K, то

$$\beta = T\Sigma\alpha = \mathbf{1{,}1 \cdot 10^{24}}.$$

Так как

$$k = -\frac{\alpha^{-1}\beta^2 - \gamma}{T},$$

то

$$\gamma = kT + \alpha^{-1}\beta^2 = 1{,}3 \cdot 10^5 + 5{,}6 \cdot 10^2,$$

и мы можем считать, что $\gamma = \mathbf{1{,}3 \cdot 10^5}$.

Отношение $\beta^2/(\alpha\gamma)$ безразмерно и является мерой связи между тепловыми и электрическими эффектами. Для данного случая

$$\frac{\beta^2}{(\alpha\gamma)} = \mathbf{4 \cdot 10^{-3}}.$$

§ 3. Термоэлектрические эффекты в кристаллах

1. Вывод уравнений потока. Теперь, когда мы получили уравнения (12.15) и (12.16) для изотропных проводников и увидели, как из них получаются выражения для наблюдаемых термоэлектрических эффектов, очень просто обобщить эти уравнения и для случая анизотропных проводников (Доменикали [32])[1]. Единственное изменение состоит в том, что коэффициенты α, β, γ теперь оказываются тензорами второго ранга. Чтобы выяснить, какими именно термоэлектрическими свойствами вызвано это изменение, будем оперировать с исходными уравнениями так же, как и раньше. При этом удобнее рассматривать α, β, γ и все векторы как матрицы (см. гл. IX). Тогда в индексных обозначениях можно записать

$$j_i^e = -\alpha_{ik}\frac{\partial\bar{\mu}}{\partial x_k} - \beta_{ik}\frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial x_k}, \tag{12.33}$$

$$h_i = -\beta_{ki}\frac{\partial\bar{\mu}}{\partial x_k} - \gamma_{ik}\frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial x_k}. \tag{12.34}$$

Согласно принципу Онзагера (см. стр. 249), полная матрица коэффициентов, стоящих в правой части этой системы уравнений, должна быть симметричной. Отсюда сразу следует, что (α_{ik}) и (γ_{ik}) — симметричные матрицы. Отсюда вытекает также, что девять коэффициентов при $(1/T)(\partial T/\partial x_k)$ в уравнении (12.33) одинаковы с девятью коэффициентами при $\partial\bar{\mu}/\partial x_k$ в уравнении (12.34); но, развертывая члены,

[1] Приведенное ниже рассмотрение по форме несколько отлично от того, которое дал Доменикали, но по существу совпадает с ним.

легко видеть, что в первом уравнении стоят коэффициенты β_{kl}, тогда как во втором β_{lk}. Таким образом, в матричной записи мы получаем

$$\mathbf{j}^e = -\alpha \operatorname{grad} \bar{\mu} - \beta \frac{\operatorname{grad} T}{T}, \tag{12.33a}$$

$$\mathbf{h} = -\beta_t \operatorname{grad} \bar{\mu} - \gamma \frac{\operatorname{grad} T}{T}, \tag{12.34a}$$

где β_t — транспонированная матрица по отношению к матрице β. В общем случае β — несимметричная матрица.

2. Скорость выделения тепла. Аналогично уравнению (12.18) для изотропного случая, мы теперь имеем

$$\alpha^{-1} = e^2 \rho, \tag{12.35}$$

где ρ — матрица удельного электрического сопротивления. Поэтому симметричность ρ следует из симметричности α.

Уравнения (12.21) и (12.22) принимают вид[1])

$$\operatorname{grad} \bar{\mu} = -\alpha^{-1}\mathbf{j}^e - \Sigma \operatorname{grad} T, \tag{12.36}$$

$$\mathbf{h} = T\Sigma_t \mathbf{j}^e - \mathbf{k} \operatorname{grad} T, \tag{12.37}$$

где $\Sigma = (\alpha^{-1}\beta)/T$ и $\mathbf{k} = -(\beta_t\alpha^{-1}\beta - \gamma)/T$, причем Σ и $\mathbf{k}$ — теперь матрицы ($\mathbf{k}$ — матрица коэффициентов теплопроводности, а Σ — матрица, характеризующая термоэлектрические свойства кристалла). Их компоненты являются функциями координат и температуры. Легко доказать, что из симметричности α и γ следует симметричность $\mathbf{k}$. Однако матрица Σ, вообще говоря, несимметрична.

Отметим, что, полагая в уравнении (12.36) $\mathbf{j}^e = 0$ и разлагая $\bar{\mu}$ на химическую и электрическую части, согласно соотношению (12.17), мы получаем уравнение для термо-э.д.с. на единицу длины, а именно:

$$-\operatorname{grad} \varphi = -\frac{1}{e}(\Sigma \operatorname{grad} T + \operatorname{grad} \mu), \tag{12.38}$$

или в индексном обозначении

$$-\frac{\partial \varphi}{\partial x_l} = -\frac{1}{e}\Sigma_{lk}\left(\frac{\partial T}{\partial x_k} + \frac{\partial \mu}{\partial x_l}\right). \tag{12.38a}$$

Поток энергии определяется уравнением, аналогичным (12.23):

$$\mathbf{j}^u = \mathbf{h} + \bar{\mu}\mathbf{j}^e, \tag{12.39}$$

---

[1]) Можно легко показать, что если $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ — матрицы, то $(\mathbf{AB})_t = \mathbf{B}_t\mathbf{A}_t$. Следовательно,

$$\Sigma_t = \frac{1}{T}\beta_t(\alpha^{-1})_t = \frac{1}{T}\beta_t\alpha^{-1},$$

так как α^{-1} — симметричная матрица.

где все три члена — матрицы-столбцы. Обобщением (12.24) является уравнение

$$\mathbf{j}^u = (T\boldsymbol{\Sigma}_t + \bar{\mu}\mathbf{I})\,\mathbf{j}^e - \mathbf{k}\,\mathrm{grad}\,T, \tag{12.40}$$

или в индексном обозначении

$$j_k^u = (T\Sigma_{ik} + \bar{\mu}\delta_{ik})\,j_i^e - k_{ki}\frac{\partial T}{\partial x_i}. \tag{12.40a}$$

Скорость выделения тепла описывается уравнением

$$-\frac{\partial j_k^u}{\partial x_k} = -\left(\Sigma_{ik}\frac{\partial T}{\partial x_k} + \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial x_k}\delta_{ik}\right) j_i^e - T\frac{\partial}{\partial x_k}\left(j_i^e\Sigma_{ik}\right) + \\ + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(k_{ki}\frac{\partial T}{\partial x_i}\right). \tag{12.41}$$

Уравнение (12.36) показывает, что выражение, заключенное в первых скобках в правой части, является i-й компонентой матрицы $-\alpha^{-1}\mathbf{j}^e$, а именно $-(\alpha^{-1})_{ik}j_k^e$. Следовательно, первый член в правой части уравнения (12.41) есть джоулево тепло

$$e^2\rho_{ik}j_i^e j_k^e.$$

Окончательно мы имеем

$$-\frac{\partial j_k^u}{\partial x_k} = e^2\rho_{ik}j_i^e j_k^e - T\frac{\partial}{\partial x_k}\left(j_i^e\Sigma_{ik}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(k_{ki}\frac{\partial T}{\partial x_i}\right); \tag{12.42}$$

здесь первый член в правой части представляет собой джоулево тепло, второй — тепло, выделяющееся за счет термоэлектрических эффектов, а третий — тепло, отводимое благодаря теплопроводности.

3. О нагревании за счет термоэлектрических эффектов. Второй член в правой части уравнения (12.42)

$$\dot{q} = -T\frac{\partial}{\partial x_k}\left(j_i^e\Sigma_{ik}\right) \tag{12.43}$$

представляет собой тепло, выделяющееся за счет термоэлектрических эффектов [1]).

Мы видим, что член $\dot{q}/T$ равен взятой со знаком минус дивергенции вектора $j_i^e\Sigma_{ik}$, который в общем случае не параллелен вектору

---

[1]) Это выражение впервые получили Эренфест и Рутгерс [35], исходя из постулата, согласно которому термоэлектрические эффекты можно рассматривать как обратимые и не зависящие от сопровождающих их необратимых эффектов. Это было сделано до того, как Онзагер сформулировал свою теорию необратимых процессов. Такой „псевдотермостатический" подход, использованный Эренфестом и Рутгерсом, не является удовлетворительным, как мы уже видели на стр. 260, хотя он и дает правильный результат.

плотности потока электронов j_i^e. Можно считать вектор $j_i^e \Sigma_{ik}$ плотностью потока энтропии, переносимого потоком электронов.

Для поверхности контакта выражение (12.43) для скорости выделения тепла на единицу площади принимает форму

$$-T\Delta_n\left(j_i^e \Sigma_{ik}\right), \tag{12.44}$$

где, как и прежде, символ $\Delta_n(\ )$ означает скачок нормальной компоненты вектора, заключенного в скобки. С другой стороны, мы можем использовать j_i вместо j_i^e и записать выражение для выделяющегося тепла в виде

$$\Delta_n\left(j_i \Pi_{ik}\right), \tag{12.45}$$

где Π_{ik} — *матрица* (или *тензор*) *Пельтье*, определяемый для каждого проводника формулой

$$\Pi_{ik} = T\frac{\Sigma_{ik}}{e}. \tag{12.46}$$

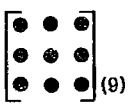
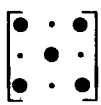
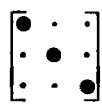
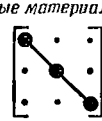
При наличии элементов симметрии у кристалла число независимых компонент Σ_{ik} (и Π_{ik}) уменьшается, как легко можно показать

ТАБЛИЦА 14

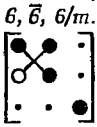
Формы термоэлектрического тензора

Обозначения

- компонента, равная нулю,
- ● компонента, отличная от нуля,
- ●—● равные компоненты,
- ●—○ компоненты, численно равные, но противоположные по знаку.

Триклинная система *(оба класса)*	Моноклинная система *(все классы)*	Орторомбическая система *(все классы)*	Кубическая система *(все классы) и изотропные материалы*
 (9)	 (5)	 (3)	 (1)

Тригональная, тетрагональная и гексагональная системы

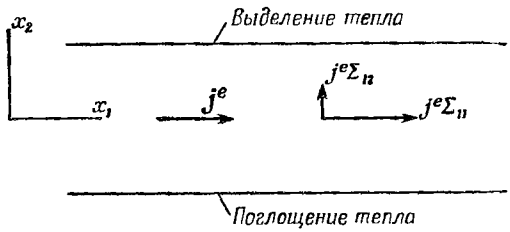
Классы	*Классы*
3, $\bar{3}$,	*32, 3m, $\bar{3}$m,*
4, $\bar{4}$, 4/m,	*422, 4mm, $\bar{4}$2m, 4/mmm,*
6, $\bar{6}$, 6/m.	*622, 6mm, $\bar{6}$m2, 6/mmm.*
 (3)	(2)

обычными методами. Следует помнить, что в общем случае

$$\Sigma_{lk} \neq \Sigma_{kl}. \tag{12.47}$$

Форма $[\Sigma_{lk}]$ при обычной ориентации кристаллов (см. приложение 2) приведена для различных кристаллографических классов в табл. 14, где используются те же символы, что и выше.

Переходя к частным случаям, как это делалось для изотропных материалов, мы можем выяснить значение различных компонент Σ_{lk}. Компоненты, стоящие на главной диагонали, связаны с эффектами, аналогичными тем, какие наблюдаются в изотропных материалах, хотя теперь, конечно, эти эффекты зависят от направления для всех кристаллов, кроме кубических. Недиагональные компоненты Σ_{lk} определяют существование *поперечного эффекта Пельтье*, который специфичен для некубических кристаллов [см. (12.44)]. Это можно видеть на примере стержня из некубического кристалла (фиг. 67)



Фиг. 67. Схема, поясняющая возникновение поперечного эффекта Пельтье.

с длиной, параллельной x_1, и прямоугольным поперечным сечением. Пусть вдоль стержня течет поток электронов с равномерной плотностью $\boldsymbol{j}^e = [j^e, 0, 0]$. При этом вектор $j_i^e\Sigma_{lk}$ не будет, вообще говоря, параллелен $\boldsymbol{j}^e$, так как наряду с продольной компонентой $j^e\Sigma_{11}$ существуют поперечные компоненты $j^e\Sigma_{12}$ и $j^e\Sigma_{13}$. На верхней грани, перпендикулярной x_2, имеет место скачок нормальной компоненты $j_i^e\Sigma_{lk}$, равный $-j^e\Sigma_{12}$, а поэтому, согласно уравнению (12.44), будет происходить выделение тепла в количестве $Tj^e\Sigma_{12}$. На противоположной грани будет поглощаться равное количество тепла. Аналогичное выделение и поглощение тепла происходит и на гранях, перпендикулярных x_3.

Если мы продифференцируем правую часть уравнения (12.43), то получим интересный результат. При этом необходимо помнить, что Σ_{lk} зависит от x_k двояким образом. Во-первых, так же как для изотропной среды, Σ_{lk} меняется с координатой, когда изменяются свойства среды (например, когда мы пересекаем поверхность контакта между двумя различными кристаллами или между одинаковыми, но по-разному ориентированными кристаллами). Во-вторых, Σ_{lk} меняется

с координатой вследствие неравномерности распределения температуры. Поэтому при дифференцировании появляются два члена. Таким образом мы получаем

$$\dot{q} = -j_i^e T\left(\frac{\partial \Sigma_{ik}}{\partial x_k}\right)_T - j_i^e T\left(\frac{\partial \Sigma_{ik}}{\partial T}\right)_x \frac{\partial T}{\partial x_k} - T\Sigma_{ik}\frac{\partial j_i^e}{\partial x_k}. \qquad (12.48)$$

Первый член в правой части представляет собой тепло Пельтье, пропорциональное току и возникающее вследствие изменения свойств среды с координатой (при постоянной температуре). То обстоятельство, что j_i и x_k имеют в этом члене различные индексы, показывает, что изменения Σ_{ik} не в направлении тока также играют роль; кроме продольного эффекта Пельтье, описываемого членами с $i = k$, они дают еще поперечный эффект Пельтье.

Второй член в правой части уравнения (12.48) представляет собой тепло Томсона, пропорциональное току и градиенту температуры. Поскольку в анизотропной среде играет роль градиент температуры не только в направлении тока, то наряду с продольным эффектом Томсона имеет место и *поперечный эффект Томсона*. Полное выражение для тепла Томсона, выделяемого в единице объема за единицу времени, можно записать в виде

$$-j_i \tau_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k}, \qquad (12.49)$$

где τ_{ik} — *тензор тепла Томсона*, задаваемый в виде

$$\tau_{ik} = -\frac{T}{e}\left(\frac{\partial \Sigma_{ik}}{\partial T}\right)_x \qquad (12.50)$$

[ср. формулу (12.31)].

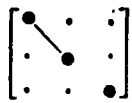
Последний член в правой части уравнения (12.48) описывает эффект, с которым мы еще не встречались и который, подобно поперечным эффектам Пельтье и Томсона, присущ только кристаллам. Для изотропного кристалла сохраняются лишь диагональные компоненты Σ_{ik} и последний член становится равным просто

$$-T\Sigma\frac{\partial j_i^e}{\partial x_i}.$$

Для стационарных токов $\partial j_i^e/\partial x_i = 0$, следовательно, этот член исчезает. В анизотропных же кристаллах этот член приводит к дополнительному выделению тепла — *тепла Бриджмена*. Указанный эффект обусловливается неоднородностью распределения токов.

В качестве примера эффекта Бриджмена рассмотрим L-образный кристалл, части которого имеют единичное поперечное сечение (фиг. 68). Будем считать, что ориентация обеих частей кристалла одинакова и весь кристалл имеет одну и ту же температуру. Пусть поток электронов с равномерной плотностью j^e течет вдоль части кристалла параллельно x_1, а затем изменяет направление и течет

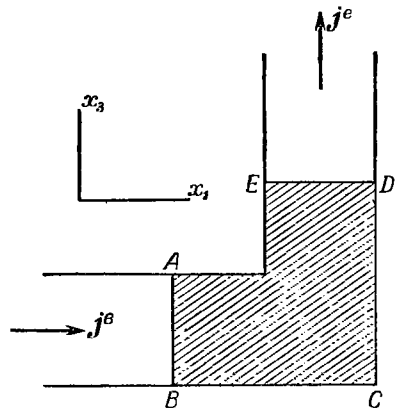
параллельно x_3 вдоль другой части. Возьмем такой кристалл, для которого тензор $[\Sigma_{ik}]$ имеет форму



и ориентируем его так, чтобы главная ось симметрии была параллельна x_3 (тогда поперечное тепло Пельтье не будет усложнять картину). Применим теперь уравнение (12.43) к заштрихованной на фиг. 68 части объема. Компоненты Σ_{ik} постоянны, и величина $-\dot{q}/T$ равна дивергенции $j_i^e\Sigma_{ik}$, проинтегрированной по всему объему. По теореме Гаусса такой интеграл равен потоку нормальных компонент $j_i^e\Sigma_{ik}$, направленному наружу через поверхности, ограничивающие этот объем. Направленные в сторону внешней нормали нормальные компоненты потока через AB и DE равны соответственно $-j^e\Sigma_{11}$ и $j^e\Sigma_{33}$. Вблизи поверхностей кристалла поток электронов параллелен граням, вне кристалла он равен нулю. Следовательно, на этих сторонах рассматриваемого объема нормальные компоненты $j_i^e\Sigma_{ik}$ отсутствуют.

Таким образом,

$$\dot{q} = Tj^e(\Sigma_{11} - \Sigma_{33}).$$



Ф и г. 68. Схема, поясняющая выделение тепла Бриджмена.

Тепло выделяется потому, что поток электронов j^e изменяет свое направление в кристалле.

Мы получили для рассматриваемого случая выражение для тепла Бриджмена, возникновение которого обусловлено просто изменением направления j^e в кристалле.

В общем случае любое неоднородное распределение плотности тока в анизотропном кристалле будет приводить к тому, что члены $\partial j_i^e/\partial x_k$ в уравнении (12.48) не будут обращаться в нуль, а следовательно, будет наблюдаться и выделение тепла Бриджмена.

РЕЗЮМЕ

1. Термоэлектрические эффекты в изотропных проводниках. *1) Термо-э.д.с. термопары.* Если между двумя контактами термопары имеется разность температур ΔT, то возникает термо-э.д.с. $\Delta\varphi$. Величина $d\varphi/dT$ есть ***термоэлектрическая мощность.***

2) Эффект Пельтье. Скорость поглощения тепла в контакте при протекании тока J от металла a к металлу b определяется формулой

$$\dot{Q}_{ab} = \Pi_{ab} J, \tag{12.1}$$

где Π_{ab} — *коэффициент Пельтье.*

3) Эффект Томсона. Скорость притока тепла, необходимого для поддержания стационарного распределения температуры в элементе проволоки, в котором прирост температуры в направлении электрического тока равен dT, определяется формулой

$$d\dot{Q} = \tau J\, dT, \tag{12.2}$$

где τ — *коэффициент Томсона.*

Первое соотношение Томсона, вытекающее из первого закона термодинамики, имеет вид

$$-\Delta\Pi_{ab} + (\tau_b - \tau_a)\,\Delta T = \Delta\varphi. \tag{12.12}$$

Второе соотношение Томсона следует из принципа Онзагера; оно записывается так:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial T} = -\frac{\Pi_{ab}}{T}. \tag{12.11}$$

Поэтому мы можем записать для тепла Пельтье и разности между двумя значениями тепла Томсона выражения

$$\Pi_{ab} = -T\frac{d\varphi}{dT}, \tag{12.11a}$$

$$\tau_a - \tau_b = T\frac{d^2\varphi}{dT^2}. \tag{12.14}$$

2. Термоэлектрические эффекты в изотропной непрерывной среде. Задавшись соответствующими уравнениями потока, связывающими электрический ток и тепловой поток с действующими на них силами (возникающими за счет градиента потенциала и градиента температуры), и используя принцип Онзагера, мы находим следующие уравнения.

Для термо-э.д.с. на единицу длины имеем [из (12.27)]

$$-\operatorname{grad}\varphi = -\frac{1}{e}(\Sigma \operatorname{grad} T + \operatorname{grad}\mu), \tag{12.27a}$$

где Σ — константа для данной точки проводника при заданной температуре.

Для скорости выделения тепла в единице объема имеем, с учетом (12.26а),

$$-\operatorname{div} j^u = e^2\rho j^{e2} - T\operatorname{div}(\Sigma j^e) + \operatorname{div}(k \operatorname{grad} T). \tag{12.25}$$

Первый член в правой части представляет собой джоулево тепло, второй — тепло, выделяющееся за счет термоэлектрических эффектов, и третий — тепло, отводимое благодаря теплопроводности.

Второй член правой части, который можно записать в виде $-Tj^e \operatorname{grad}\Sigma$, учитывает как тепло Пельтье, так и тепло Томсона, а именно:

$$-j_l^e T\frac{\partial\Sigma}{\partial x_l} = -j_l^e T\left(\frac{\partial\Sigma}{\partial x_l}\right)_T - j_l^e T\left(\frac{\partial\Sigma}{\partial T}\right)_x \frac{\partial T}{\partial x_l}; \qquad (12.32)$$

здесь первый член в правой части представляет собой тепло Пельтье, а второй — тепло Томсона. Скорость выделения тепла в контакте на единицу его площади равна

$$-T\left(\Sigma^{(a)} - \Sigma^{(b)}\right) j_n^e, \qquad (12.29)$$

где j_n^e — нормальная компонента, направленная в сторону a. Таким образом,

$$\Pi_{ab} = \frac{T\left(\Sigma^{(a)} - \Sigma^{(b)}\right)}{e}. \qquad (12.30)$$

Выражения для всех упомянутых выше величин, характеризующих наблюдаемые термоэлектрические эффекты, можно вывести из этих уравнений.

3. Термоэлектрические эффекты в кристаллах. В случае кристаллов скаляр Σ замещается тензором Σ_{lk}. Уравнения, соответствующие уравнениям (12.27а) и (12.25), имеют вид

$$-\frac{\partial\varphi}{\partial x_l} = -\frac{1}{e}\left(\Sigma_{lk}\frac{\partial T}{\partial x_k} + \frac{\partial\mu}{\partial x_l}\right) \qquad (12.38а)$$

и

$$-\frac{\partial j_k^u}{\partial x_k} = e^2\rho_{ik} j_i^e j_k^e - T\frac{\partial}{\partial x_k}\left(j_i^e\Sigma_{ik}\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(k_{kl}\frac{\partial T}{\partial x_l}\right). \qquad (12.42)$$

Первый член в правой части представляет собой джоулево тепло, второй — тепло, обусловленное термоэлектрическими эффектами, третий — тепло, отводимое благодаря теплопроводности.

Второй член в правой части можно представить следующим образом:

$$-T\frac{\partial}{\partial x_k}\left(j_i^e\Sigma_{ik}\right) = -j_i^e T\left(\frac{\partial\Sigma_{ik}}{\partial x_k}\right)_T - j_i^e T\left(\frac{\partial\Sigma_{ik}}{\partial T}\right)_x \frac{\partial T}{\partial x_k} - T\Sigma_{ik}\frac{\partial j_i^e}{\partial x_k}. \qquad (12.48)$$

т. е. в виде суммы тепла Пельтье, тепла Томсона и тепла Бриджмена. *Тепло Пельтье*, выделяющееся в единице площади контакта, определяется формулой

$$-T\Delta_n\left(j_i^e\Sigma_{ik}\right) = \Delta_n\left(j_i\Pi_{ik}\right), \qquad (12.44),\ (12.45)$$

где Δ_n — скачок нормальной компоненты и $\Pi_{ik} = T\left(\Sigma_{ik}/e\right)$ есть *матрица* (или *тензор*) *Пельтье*. В общем случае имеют место как продольный, так и поперечный эффекты Пельтье.

Тепло Томсона, выделяющееся в единице объема за единицу времени, равно

$$-j_i \tau_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k}, \tag{12.49}$$

где

$$\tau_{ik} = -\frac{T}{e}\left(\frac{\partial \Sigma_{ik}}{\partial T}\right)_x; \tag{12.50}$$

здесь τ_{ik} есть *тензор тепла Томсона*. В общем случае происходит выделение как продольного, так и поперечного тепла Томсона.

Тепло Бриджмена, выделяющееся в единице объема за единицу времени, описывается последним членом в уравнении (12.48). Выделение тепла Бриджмена есть эффект, свойственный только кристаллам, и обусловливается неоднородностью распределения электрического тока.

Таким образом, все термоэлектрические эффекты определяются тензором Σ_{ik}, температурой и их производными по объему. В общем случае

$$\Sigma_{ik} \neq \Sigma_{ki}.$$

Кубические кристаллы ведут себя как изотропные материалы. Свойства всех остальных кристаллов анизотропны; в самом общем случае имеется девять независимых коэффициентов Σ_{ik}.

Часть IV

КРИСТАЛЛООПТИКА

Глава XIII

ЕСТЕСТВЕННОЕ И ИСКУССТВЕННОЕ ДВОЙНОЕ ЛУЧЕПРЕЛОМЛЕНИЕ. ЭФФЕКТЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА

§ 1. Двойное лучепреломление

В данной главе мы рассмотрим некоторые явления, связанные с прохождением света через кристалл. Мы будем изучать главным образом *двойное лучепреломление* (или *двойную рефракцию*): естественное двойное лучепреломление, возникающее благодаря естественной анизотропии кристалла, и искусственное двойное лучепреломление, вызываемое электрическим полем (электрооптический эффект) или механическим напряжением (фотоупругость). Вопрос о *вращении плоскости поляризации* (или *оптической активности*) будет обсуждаться в следующей главе. Поглощение света кристаллами мы рассматривать не будем.

Предполагается, что читатель уже имеет представление о явлении двойного лучепреломления (см., например, книгу Хартшорна и Стюарта [48][1]). В п. 1—3 излагаются основные элементарные факты, представляющие для нас интерес. Доказательства описанных в п. 1 свойств индикатрисы, которые основаны на уравнениях Максвелла, даны в приложении 8; для понимания последующего изложения они не являются необходимыми.

1. Индикатриса. В *изотропной* среде диэлектрические свойства на оптических частотах описываются уравнениями

$$\boldsymbol{D} = \varkappa \boldsymbol{E}, \quad \text{или} \quad \boldsymbol{D} = \varkappa_0 K \boldsymbol{E}, \tag{13.1}$$

где $\varkappa$ — диэлектрическая проницаемость среды, $\varkappa_0$ — диэлектрическая проницаемость вакуума и K — относительная диэлектрическая проницаемость, или диэлектрическая постоянная ($\varkappa$ и K, вообще говоря, не совпадают с диэлектрической проницаемостью и диэлектрической постоянной, измеренными статическими методами или на низких частотах). Из уравнений Максвелла следует, что если относительную магнитную проницаемость $M = \mu/\mu_0$ (см. стр. 74) положить равной единице, то скорость распространения электромагнитных волн через среду описывается формулой

$$v = \frac{c}{\sqrt{K}}, \tag{13.2}$$

[1]) См. также [119, 122]. — *Прим. перев.*

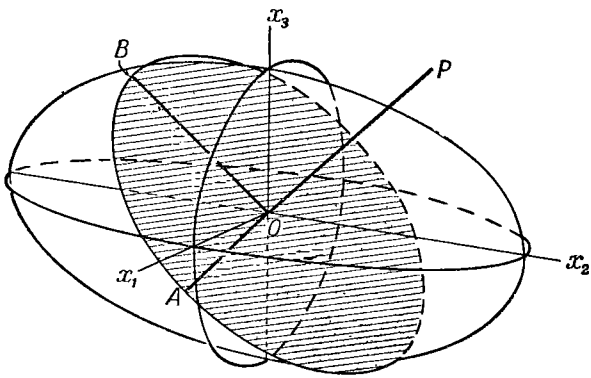
где c — скорость в вакууме $\left(c = 1/\sqrt{\varkappa_0\mu_0}\right)$ (см., например, книгу Абрагама и Беккера [1] [1]). Таким образом, *показатель преломления* n, определяемый как c/v, записывается в виде

$$n = \sqrt{K}. \tag{13.3}$$

В случае *анизотропной* среды (см. стр. 90) уравнения (13.1) заменяются на

$$D_i = \varkappa_{ij}E_j, \quad \text{или} \quad D_i = \varkappa_0 K_{ij}E_j. \tag{13.4}$$

Когда в уравнениях Максвелла вместо (13.1) используются уравнения (13.4), то получается следующий результат, доказанный в приложении 8: в общем случае через кристалл могут распространяться



Фиг. 69. Построение индикатрисы.

Это построение дает два показателя преломления и направления колебаний вектора $\boldsymbol{D}$ для двух плоско-поляризованных волн, связанных с заданной волновой нормалью.

не одна, а *две* волны, имеющие данную волновую нормаль. Эти волны плоскополяризованы и скорость их различна. Значение c/v для каждой волны можно назвать *показателем преломления* n для данной волны. Чтобы изобразить зависимость показателя преломления для этих двух волн от направления их общей волновой нормали, обычно строят эллипсоид, называемый (оптической) *индикатрисой*. Если x_1, x_2, x_3 — главные оси тензора диэлектрической постоянной (или диэлектрической проницаемости), то индикатриса определяется уравнением

$$\frac{x_1^2}{n_1^2} + \frac{x_2^2}{n_2^2} + \frac{x_3^2}{n_3^2} = 1, \tag{13.5}$$

где $n_1 = \sqrt{K_1}$, $n_2 = \sqrt{K_2}$, $n_3 = \sqrt{K_3}$ (K_1, K_2, K_3 — главные диэлектрические постоянные).

Индикатриса имеет следующее важное свойство. Проведем из начала координат прямую OP в произвольном направлении (фиг. 69). По-

[1]) См. также [117]. — *Прим. перев.*

строив центральное сечение индикатрисы, перпендикулярное этой прямой, получим эллипс. Тогда показатели преломления для двух волн, фронты которых нормальны к OP, равны длинам полуосей этого эллипса: OA и OB. Вектор индукции $\boldsymbol{D}$ в плоско-поляризованной волне, показатель преломления для которой равен OA, колеблется параллельно OA. Аналогично, в волне, для которой показатель преломления равен OB, вектор $\boldsymbol{D}$ колеблется параллельно OB. Отсюда как частный случай следует, что для двух возможных волн с волновой нормалью x_1 показатели преломления будут равны n_2 и n_3, а вектор $\boldsymbol{D}$ в этих волнах параллелен соответственно x_2 и x_3. Аналогично, волновая нормаль x_2 соответствует двум волнам, для которых показатели преломления равны n_3 и n_1, а вектор $\boldsymbol{D}$ параллелен x_3 и x_1. Такое рассуждение можно провести и для волновой нормали x_3. По этой причине n_1, n_2, n_3 и называются *главными показателями преломления*.

Отметим, что сам по себе показатель преломления не есть тензор, хотя его изменения с направлением определяются, как мы видели, диэлектрической постоянной, являющейся тензором.

Уравнение (13.5) можно записать в иной форме

$$B_1x_1^2+B_2x_2^2+B_3x_3^2=1, \tag{13.6}$$

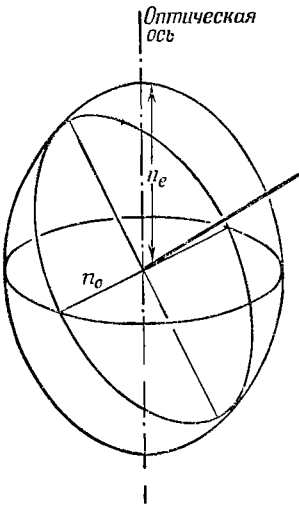
где $B_1=1/n_1^2=1/K_1$, а B_2 и B_3 имеют аналогичный смысл. Иными словами, B_1, B_2, B_3 являются величинами, обратными главным диэлектрическим постоянным, и называются относительными *диэлектрическими непроницаемостями*. Нетрудно понять, что уравнение (13.6) представляет собой уравнение характеристической поверхности второго порядка (см. стр. 31) для относительной диэлектрической непроницаемости. Следовательно, эта характеристическая поверхность совпадает с индикатрисой.

2. Влияние симметрии кристалла. До сих пор мы рассматривали общий случай, т. е. считали, что симметрия кристалла не налагает ограничений на его оптические свойства. Если кристалл обладает симметрией, то форма и ориентация индикатрисы подчиняются тем же ограничениям, что и характеристическая поверхность для любого свойства, описываемого тензором второго ранга (см. гл. I, § 5, п. 1). Отсюда следует, что индикатриса кубических кристаллов является сферой; так как все центральные сечения сферы представляют собой окружности, эти кристаллы не обладают двойным лучепреломлением.

Для *гексагональных*, *тетрагональных* и *тригональных* кристаллов индикатриса представляет собой эллипсоид вращения вокруг главной оси симметрии (фиг. 70). Принимая эту ось за ось x_3, уравнение индикатрисы можно записать в виде

$$\frac{x_1^2}{n_0^2}+\frac{x_2^2}{n_0^2}+\frac{x_3^2}{n_e^2}=1.$$

Центральное сечение, перпендикулярное главной оси (и только это центральное сечение), есть окружность (радиусом n_0). Поэтому только для волновой нормали, направленной вдоль главной оси, двойное лучепреломление отсутствует. Главная ось называется *оптической осью*, а такие кристаллы — *одноосными*. Показатели преломления n_0 и n_e принято называть соответственно *обыкновенным* и *необыкновенным*. Кристалл называют *положительным*, если $(n_e - n_0) > 0$, и *отрицательным*, если $(n_e - n_0) < 0$.



Фиг. 70. Индикатриса для (положительного) одноосного кристалла.

Для трех остальных кристаллографических систем — *орторомбической*, *моноклинной* и *триклинной* — индикатриса является трехосным эллипсоидом. Она имеет *два* круговых сечения, как показано на фиг. 71; следовательно, имеются два избранных направления волновых нормалей, для которых двойное лучепреломление отсутствует. Эти два направления называются *оптическими осями первого рода*, или просто *оптическими осями*, а такие кристаллы — *двуосными*.

3. Волновая поверхность [1]**.** Предположим, что внутри кристалла помещен точечный источник света. Фронт испускаемой волны в любой момент времени образует непрерывно расширяющуюся поверхность. Представим себе, что в некоторый момент мы зафиксировали положение волнового фронта. Образованную таким путем поверхность называют *волновой поверхностью* [2]).

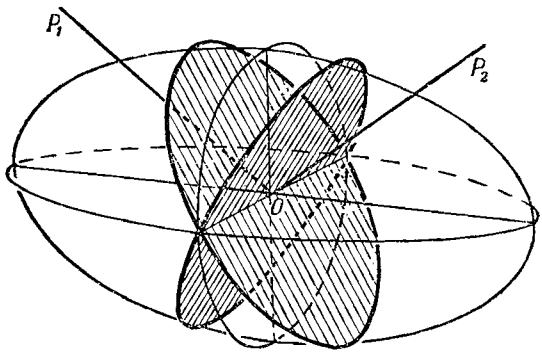
1) Одноосный кристалл. Волновая поверхность одноосного кристалла состоит из сферы и эллипсоида вращения, касающихся друг друга в точках, лежащих на оптической оси (фиг. 72, *а* и *б*). Это можно доказать путем построения индикатрисы. В данном случае индикатриса является эллипсоидом вращения (см. фиг. 70), и радиус ее кругового центрального сечения равен n_0. Следовательно, одна главная полуось

---

[1]) Этот раздел не является необходимым для понимания остальной части главы, но мы будем использовать его результаты в гл. XIV.

[2]) Эта терминология согласуется с той, которую используют Дана, Хартшорн и Стюарт, Хаустон, Роджерс и Керр, Туттон, Вуд. Де-Гроот, Иохансен и Вустер называют определяемую таким способом поверхность *лучевой поверхностью*, поскольку она служит геометрическим местом точек, достигаемых лучами к данному моменту времени.

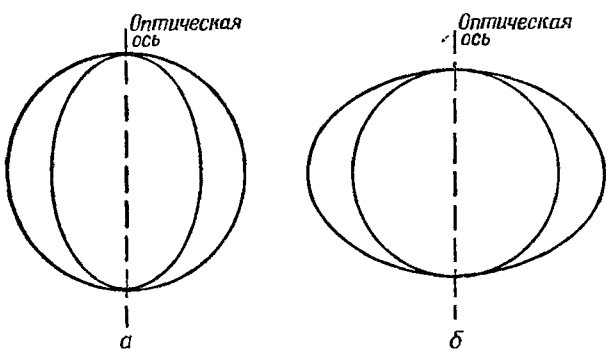
любого центрального сечения будет всегда равна n_0. Другая главная полуось будет иметь значение, промежуточное между n_0 и n_e (см. фиг. 70). Мы знаем, что в кристалле от точечного источника в любом направлении



Фиг. 71. Два круговых сечения индикатрисы и две оптические оси первого рода OP_1 и OP_2 в случае двуосного кристалла.

Оба круговых сечения содержат главную ось индикатрисы, длина которой имеет промежуточную величину между длинами остальных двух осей индикатрисы. Следовательно, радиус этих сечений равен среднему главному показателю преломления.

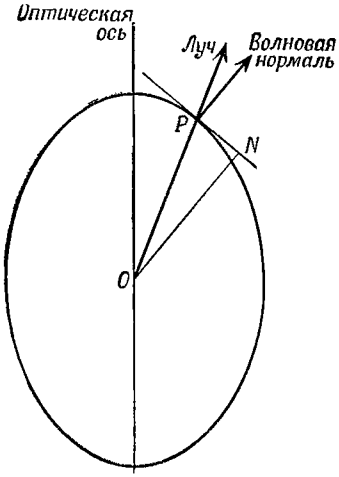
распространяются две волны. Построение индикатрисы показывает, что для одной из них показатель преломления в любом направлении равен n_0; следовательно, скорость этой волны не зависит от направления



Фиг. 72. Волновые поверхности одноосного кристалла.

а — для положительного кристалла; *б* — для отрицательного кристалла.

и всегда одинакова; для другой волны показатель преломления изменяется от n_0 до n_e в зависимости от направления волновой нормали. Следовательно, волновая поверхность будет состоять из двух полостей: сферы (обыкновенная волна) и поверхности вращения вокруг

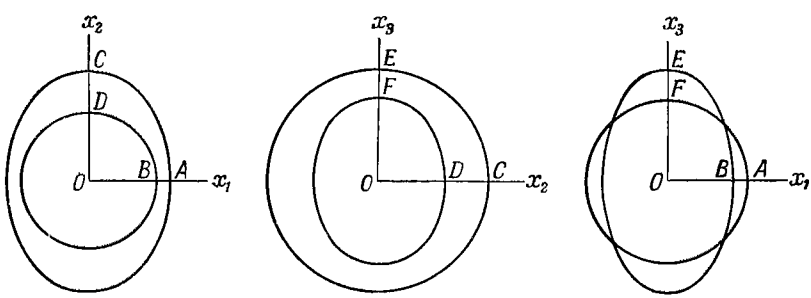


Фиг. 73. Волновая поверхность необыкновенной волны для (положительного) одноосного кристалла.

Волновая скорость v элемента волнового фронта в точке P пропорциональна ON; лучевая скорость пропорциональна OP.

оптической оси (необыкновенная волна); обе полости касаются друг друга в точках, лежащих на оптической оси.

Волновая поверхность необыкновенной волны изображена отдельно на фиг. 73. Необходимо различать волновую нормаль и *направление луча*, ибо, как ясно из чертежа, эти два направления не идентичны; например, в точке P луч направлен по OP и не совпадает с нормалью к поверхности в этой точке. *Все утверждения, сделанные нами относительно индикатрисы, касались волновых нормалей* [1]). На фиг. 73 *волновая скорость* для участка волнового фронта в точке P пропорциональна ON — отрезку, перпендикулярному касательной в точке P, тогда как *лучевая скорость* пропорциональна OP. Путем построения индикатрисы определяется волновая скорость. Следовательно, построение индикатрисы дает длину отрезка ON в том случае, когда известно его направление. Методами аналитической геометрии легко показать, что



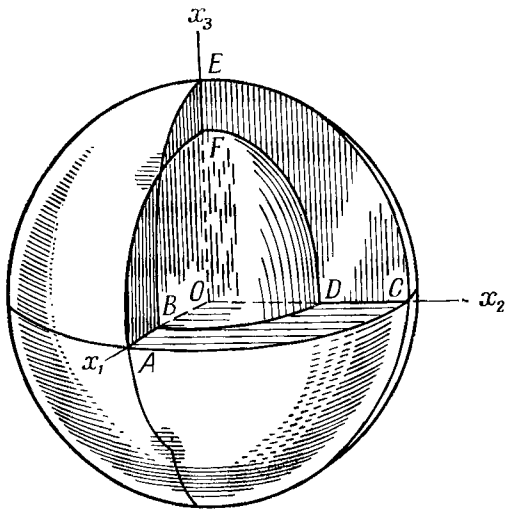
Фиг. 74. Главные сечения волновой поверхности двуосного кристалла.

Оптические оси лежат в плоскости x_1x_3. См. также фиг. 75.

волновая поверхность необыкновенной волны есть эллипсоид вращения вокруг оптической оси (это доказательство мы приводить не будем). Длины осей этого эллипсоида пропорциональны $1/n_e$, $1/n_e$, $1/n_0$.

[1]) Определение направления луча с помощью индикатрисы рассматривается в книге Вустера [96]. В этой книге приводятся также другие полезные геометрические построения и соотношения, которые мы здесь опускаем.

2) Двуосный кристалл. Волновая поверхность для двуосного кристалла не так проста, как для одноосного. Для волновых нормалей, лежащих в любой из трех главных плоскостей индикатрисы, картина очень близка к описанной выше для одноосных кристаллов.



Фиг. 75. Общий вид и сечение волновой поверхности двуосного кристалла (по Хартшорну и Стюарту [48]).

Путем построения индикатрисы легко показать (мы предоставляем сделать это читателю), что волновая поверхность состоит из двух полостей и каждая главная плоскость пересекает их по окружности и эллипсу. Главные сечения волновой поверхности показаны на фиг. 74, а сама поверхность [1]) изображена на фиг. 75.

§ 2. Электрооптический эффект и фотоупругость

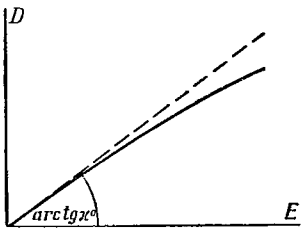
1. Электрооптический эффект. Основные положения. В гл. X было показано, что в общей форме диэлектрическая проницаемость при постоянных механических напряжениях и постоянной температуре может быть задана в виде $(\partial D_i/\partial E_j)_{\sigma, T}$. Во многих задачах вполне допустимо считать, что коэффициенты диэлектрической проницаемости кристалла при заданной температуре постоянны и не зависят от напряженности электрического поля. Однако рассматриваемый ниже эффект является прямым следствием зависимости диэлектрической проницаемости от поля. Рассмотрим тетрагональный или моноклинный кристалл,

[1]) Аналитическое рассмотрение этой поверхности можно найти в книге Джуса [59].

в котором действует поле $\boldsymbol{E}$, параллельное главной оси симметрии. Такой пример мы выбираем для того, чтобы индукция $\boldsymbol{D}$ была параллельна полю $\boldsymbol{E}$; при этом по причине, которая станет ясной позднее, будем рассматривать кристалл без центра симметрии. Зависимость D от E можно представить в виде ряда

$$D = \varkappa^0 E + \alpha E^2 + \beta E^3 + \ldots, \qquad (13.7)$$

где $\varkappa^0$, α, β — константы. (Следует отличать $\varkappa^0$ от $\varkappa_0$ — диэлектрической проницаемости вакуума.) На фиг. 76 прямая линия с угловым коэффициентом $\varkappa^0$ изображает первый член правой части уравнения (13.7); члены второго и более высокого порядков характеризуют отклонение графика зависимости от этой прямой; величина отклонения стремится к нулю при $E \to 0$. Коэффициент α обычно отрицателен, поэтому при заданном поле E величина D при учете всех членов оказывается меньше, чем при использовании одного только первого члена.



Ф и г. 76. Нелинейность зависимости D от E.

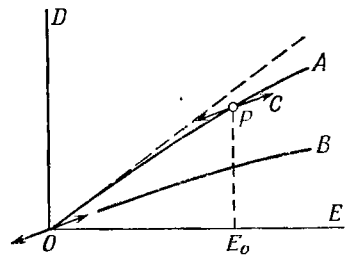
Диэлектрическая проницаемость, определенная по угловому коэффициенту кривой, записывается в виде

$$\varkappa = \frac{dD}{dE} = \varkappa^0 + 2\alpha E + 3\beta E^2 + \ldots . \qquad (13.8)$$

При обычно достижимых значениях напряженности поля члены второго и более высокого порядков дают ничтожно малую добавку к диэлектрической проницаемости, так что связанные с ними эффекты обычно трудно обнаружить. Однако *на оптических частотах* малые изменения диэлектрической проницаемости эквивалентны малым изменениям показателя преломления, которые могут быть измерены с высокой степенью точности. Используя эффект двойного лучепреломления и оптическую интерферометрию, можно без труда измерить разность показателей преломления для двух волн, поляризованных во взаимно перпендикулярных направлениях, составляющую $1 \cdot 10^{-6}$, что соответствует разности диэлектрических проницаемостей, равной $2 \cdot 10^{-6}$. Поправка к диэлектрической проницаемости, обусловленная конечной величиной поля, может и не превышать по относительной величине поправок к другим величинам, например к упругим константам. Тем не менее первая величина занимает особое положение, ибо ее легче измерить. Изменение показателя преломления кристалла, вызываемое электрическим полем, называется *электрооптическим эффектом*.

Следует напомнить, что диэлектрическая проницаемость зависит от частоты электрического поля. Обратимся снова к обсуждавшемуся выше частному случаю, т. е. будем считать, что индукция $\boldsymbol{D}$ параллельна полю $\boldsymbol{E}$. Кривая A на фиг. 77 изображает зависимость D от E на низких частотах. Кривая B показывает связь между D и E

на оптических частотах. Предположим, что световая волна проходит через кристалл так, что вектор E параллелен особенной оси. Колебания, вызываемые световой волной, можно представить двойной стрелкой, исходящей из начала координат. Показатель преломления пропорционален квадратному корню из углового коэффициента кривой B в начале координат. Теперь предположим, что в рассматриваемом нами направлении приложено статическое электрическое поле E_0, так что связь между D и E при этом статическом поле изображается точкой P. Теперь колебания, возникающие при прохождении световой волны через кристалл, изображаются двойной стрелкой C, исходящей из точки P. Угол, составляемый этой стрелкой с осью абсцисс, который определяет новый показатель преломления, будет меньше, чем угол наклона кривой A в точке P. Таким образом, величина электрооптического эффекта характеризуется изменением углового коэффициента стрелки C в точке P при изменении смещающего поля E_0. Этот эффект нельзя описать просто уравнением (13.8), потому что смещающее поле является статическим, в то время как поле E под знаком производной dD/dE изменяется с высокой частотой. Однако мы можем разложить $n^2 = \varkappa/\varkappa_0$ в ряд по степеням смещающего поля E_0; извлекая затем квадратный корень, получаем



Фиг. 77. Зависимость D от E в отсутствие и при наличии смещающего поля.

$$n = n^0 + aE_0 + bE_0^2 + \ldots, \qquad (13.9)$$

где a и b — константы, а n^0 — показатель преломления при $E_0 = 0$.

Предположим теперь, что кристалл имеет центр симметрии. Если направление смещающего поля изменится на обратное, то физическая картина не изменяется, а следовательно, не изменится и показатель преломления, однако знак при E_0 в уравнении (13.9) должен быть изменен. Поэтому мы имеем

$$n = n^0 - aE_0 + bE_0^2 - \ldots. \qquad (13.10)$$

Уравнения (13.9) и (13.10) совместны лишь при $a = 0$. В итоге мы получаем

$$n = n^0 + bE_0^2 + \ldots. \qquad (13.11)$$

Если же у кристалла отсутствуют элементы симметрии, приводящие к эквивалентности двух противоположных направлений смещающего поля, то при изменении направления поля на обратное показатель преломления уже не должен оставаться неизменным; следовательно, в этом случае член первого порядка (aE_0) должен остаться [1]). Число

[1]) Мы называем aE_0 членом первого порядка потому, что он дает *изменение* первого порядка ($n - n^0$) в значении показателя преломления.

коэффициентов, необходимое для описания электрооптического эффекта в кристаллах различной симметрии, обсуждается ниже. Приведенные рассуждения показывают, что при наличии центра симметрии эффект первого порядка в кристалле отсутствует. В центросимметричных кристаллах и в жидкостях могут существовать только эффекты, описываемые членом второго порядка (bE_0^2) и членами более высоких четных порядков, поэтому можно ожидать, что в неслишком сильных полях эти эффекты очень малы. Эффект, определяемый членом второго порядка bE_0^2 и членами более высоких четных порядков и возможный в любых материалах, называется *эффектом Керра*.

2. Фотоупругость. Основные положения. Диэлектрическая проницаемость и диэлектрическая постоянная, а следовательно, и показатель преломления являются, вообще говоря, функциями не только приложенного электрического поля, но также и механических напряжений в кристалле. Изменение показателя преломления, вызываемое механическими напряжениями, называется *фотоупругостью* (*пьезооптическим эффектом*). Мы выберем в качестве примера кристалл, рассматривавшийся в предыдущем разделе. Если к кристаллу вдоль его особенной оси наряду с электрическим смещающим полем E_0 приложено одноосное механическое напряжение σ, то показатель преломления для световой волны с электрическим вектором, колеблющимся в этом направлении, определяется выражением

$$n = n^0 + aE_0 + a'\sigma + bE_0^2 + b'\sigma^2 + b''E_0\sigma + \ldots, \qquad (13.12)$$

где a, a', b, b', b'' — константы. Выше мы показали, что у центросимметричных кристаллов член aE_0 обращается в нуль. Однако это не относится к соответствующему члену первого порядка в выражении для пьезооптического эффекта (т. е. к члену $a'\sigma$). Действительно изменение направления E_0 на обратное не вызывает никаких изменений в кристалле, тогда как перемена знака у σ влияет на состояние кристалла (растяжение заменяется сжатием) и поэтому в общем случае сказывается на величине n. Вот почему даже в изотропных материалах, таких, как стекло, наблюдается пьезооптический эффект первого порядка, хотя электрооптический эффект первого порядка отсутствует.

3. Общий случай. Показатель преломления кристалла можно представить с помощью индикатрисы, которая, как мы видели в § 1, имеет форму эллипсоида; коэффициенты уравнения этого эллипсоида являются компонентами тензора относительной диэлектрической непроницаемости B_{ij} на оптических частотах, т. е.

$$B_{ij}x_ix_j = 1 \qquad (13.13)$$

(по определению $B_{ij} = \varkappa_0 \partial E_i / \partial D_j$). Таким образом, небольшое изменение показателя преломления, вызванное действием электрического

поля или механического напряжения, идентично небольшому изменению формы, размера и ориентации индикатрисы. Это изменение наиболее удобно описывать, задавая малые изменения коэффициентов B_{ij}. Если пренебречь членами порядка выше первого в выражениях для электрических полей и механических напряжений, то изменения ΔB_{ij} коэффициентов при приложении поля E_k и напряжений σ_{kl} запишутся в виде

$$\Delta B_{ij} = z_{ijk} E_k + \pi_{ijkl} \sigma_{kl}, \tag{13.14}$$

где z_{ijk} — тензор третьего ранга, компоненты которого определяют электрооптический эффект, и π_{ijkl} — тензор четвертого ранга, определяющий пьезооптический эффект. Коэффициенты z_{ijk} называются *электрооптическими*, а коэффициенты π_{ijkl} — *пьезооптическими*. Приведем типичные значения этих коэффициентов (в единицах MKS):

$$z_{ijk} \approx 10^{-12} \text{ м/в},$$
$$\pi_{ijkl} \approx 10^{-12} \text{ м}^2/\text{н} = 10^{-13} \text{ см}^2/\text{дн}.$$

Отметим, что уравнение (13.14) совершенно аналогично уравнению, описывающему деформацию кристалла под действием электрического поля (обратный пьезоэлектрический эффект) и механических напряжений (упругость)

$$\varepsilon_{ij} = d_{kij} E_k + s_{ijkl} \sigma_{kl}, \tag{13.15}$$

где d_{kij} — пьезоэлектрические коэффициенты и s_{ijkl} — податливости. Подобно ΔB_{ij}, ε_{ij} — безразмерная величина. Размерности d и s совпадают соответственно с размерностями z и π. Более того, эти коэффициенты близки по порядку величины; так, в единицах MKS

$$d_{kij} \approx 3 \cdot 10^{-12}, \quad s_{ijkl} \approx 10^{-11}.$$

Пьезооптический эффект иногда выражают через деформации, а не через напряжения. Так как $\sigma_{kl} = c_{klrs} \varepsilon_{rs}$ (см. стр. 162), то уравнение (13.14) можно переписать в форме

$$\Delta B_{ij} = z_{ijk} E_k + p_{ijrs} \varepsilon_{rs}, \tag{13.16}$$

где

$$p_{ijrs} = \pi_{ijkl} c_{klrs}, \quad \pi_{ijkl} = p_{ijrs} s_{rskl}. \tag{13.17}$$

Коэффициенты p_{ijrs} называются *упругооптическими*. Заметим, что они являются безразмерными величинами.

Так как $\pi \approx 10^{-12}$ и $c \approx 10^{11}$, то p имеет следующий порядок величины: $\sim 10^{-12} \cdot 10^{11} = 10^{-1}$. Коэффициенты B_{ij} по порядку величины равны единице, поэтому ΔB_{ij} являются мерой относительного искажения индикатрисы. Таким образом, это относительное искажение, грубо говоря, равно десятой доле деформации.

4. Первичный и вторичный электрооптические эффекты. При обсуждении электрооптического эффекта мы до сих пор не указывали механического состояния кристалла: кристалл мог быть свободен (напряжения равны нулю) или зажат (деформации равны нулю). Однако механическое состояние кристалла нельзя считать несущественным. Так, если кристалл свободен, то вследствие обратного пьезоэлектрического эффекта статическое электрическое поле будет вызывать деформации, которые в свою очередь вследствие пьезооптического эффекта будут приводить к изменению показателя преломления. Эта ситуация очень похожа на ту, которая имела место для случая первичного и вторичного пироэлектрических эффектов (см. гл. X, § 4, п. 4). Электрооптический эффект, возникающий в кристалле с запрещенными деформациями, называется *первичным* (или „истинным"), а эффект, обусловленный пьезоэлектрическим и пьезооптическим эффектами, — *вторичным* (или „ложным"). Эффект, наблюдаемый в свободном кристалле, является суммой первичного и вторичного эффектов.

Порядок величины вторичного эффекта можно определить следующим образом. Поле E вызывает пьезоэлектрические деформации $\varepsilon = dE$. Эти деформации в свою очередь вызывают изменение B, записываемое следующим образом:

$$\Delta B = p\varepsilon = (pd)E.$$

Используя приводившиеся выше приближенные данные, получаем, что коэффициент pd, характеризующий вторичный эффект, по порядку величины равен

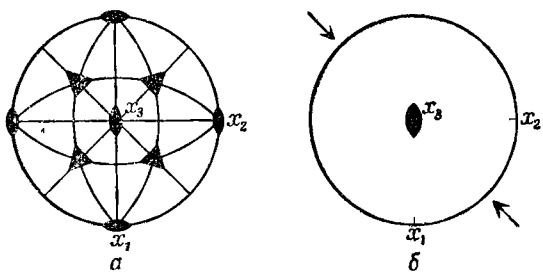
$$10^{-1} \cdot 3 \cdot 10^{-12} = 3 \cdot 10^{-13}.$$

Таким образом, вторичный эффект сравним по порядку величины с эффектом, наблюдаемым в свободном кристалле; последний, как мы уже видели, задается коэффициентом $z \approx 10^{-12}$.

Если в экспериментах к свободному кристаллу приложено постоянное поле, то измеряется именно эффект при постоянных механических напряжениях, т. е. сумма первичного и вторичного эффектов. Эффект при постоянной деформации (первичный эффект) можно измерить, приложив к кристаллу переменное поле высокой частоты. Деформации кристалла тогда очень малы (предполагается, что частота поля и крепление кристалла выбраны так, что резонанс не возникает). Результирующее двойное лучепреломление изменяет знак с частотой поля и может быть измерено (Карпентер [26]).

5. Влияние симметрии. *1) Общие соображения, основанные на анализе симметрии.* Чтобы четко представить себе влияние, оказываемое на индикатрису приложенным электрическим полем или механическими напряжениями, полезно воспользоваться следующим общим принципом: *кристалл, находящийся под влиянием внешнего*

воздействия, будет обладать только теми элементами симметрии, которые являются общими для кристалла в отсутствие воздействия и воздействия в отсутствие кристалла [1]). Справедливость этого принципа почти очевидна. Если мы действуем одним из этих общих элементов симметрии на воздействие (перед его приложением к кристаллу) и на кристалл (в отсутствие воздействия), то ни воздействие, ни кристалл не изменятся. Отсюда следует, что кристалл при приложении данного внешнего воздействия будет также обладать этим элементом симметрии. Если же мы будем действовать элементом симметрии, не являющимся общим для кристалла и воздействия, то это приведет к определенным изменениям. Отсюда следует, что кристалл при приложении данного внешнего воздействия не будет, вообще говоря, обладать этим элементом симметрии.



а *б*

Фиг. 78. Стереограммы элементов симметрии кубического кристалла класса 23.

а — элементы симметрии в отсутствие электрического поля или механического напряжения; *б* — элементы симметрии, общие для ненапряженного кристалла и одноосного сжимающего напряжения, параллельного [110].

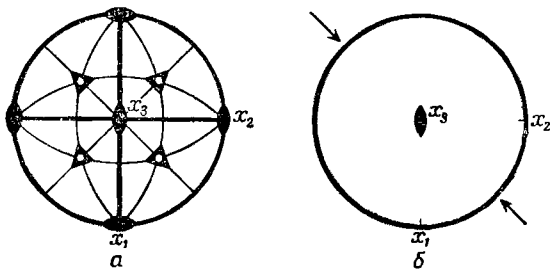
Как пример применения этого принципа рассмотрим случай, когда к кубическому кристаллу класса 23 (фиг. 78, *а*) приложено электрическое поле, параллельное оси третьего порядка. Ось третьего порядка является единственным элементом симметрии, общим для поля и кристалла. Поэтому оптические свойства такого кристалла будут соответствовать свойствам одноосного кристалла тригонального класса 3.

Мы можем непосредственно видеть, что при приложении одноосного механического напряжения параллельно оси третьего, четвертого или шестого порядков кристалл будет оптически одноосным с осью, параллельной направлению напряжения. Если же одноосное напряжение приложено вдоль оси второго порядка или в произвольном направлении, то кристалл становится оптически двуосным. Эти же

[1]) Этот принцип в еще более общей форме впервые был сформулирован Пьером Кюри и обычно в литературе называется принципом Кюри (см., например, [121]). — *Прим. перев.*

выводы справедливы и в том случае, когда вместо одноосного механического напряжения на кристалл действует электрическое поле.

Рассмотрим интересный пример, иллюстрирующий сформулированный выше принцип. Пусть кристалл класса 23 находится под действием одноосного напряжения, направленного вдоль [110]. На фиг. 78, *а* изображены элементы симметрии ненапряженного кристалла, а из фиг. 78, *б* видно, что единственным элементом симметрии, общим для ненапряженного кристалла и приложенного напряжения, является ось второго порядка, совпадающая с осью x_3. Следовательно, ось x_3 должна быть главной осью индикатрисы; остальные две главные оси



Фиг. 79. Стереограммы элементов симметрии кубического кристалла $m3$.

а — элементы симметрии в отсутствие электрического поля или механического напряжения; *б* — элементы симметрии, общие для ненапряженного кристалла и одноосного сжимающего напряжения, параллельного [110].

индикатрисы лежат в плоскости x_1x_2. причем их направления не связаны с направлением напряжения. Этот результат справедлив также для класса $m3$ (фиг. 79). Однако в кристаллах более симметричных кубических классов $\bar{4}3m$, 432 и $m3m$ направление [110] или является осью второго порядка, или лежит в плоскости симметрии. Следовательно, если кристалл, принадлежащий к одному из этих классов, сжат вдоль [110], то одна из осей индикатрисы должна быть параллельна направлению сжатия.

2) *Уменьшение числа независимых электрооптических коэффициентов.* Мы знаем, что $B_{ij} = B_{ji}$. Поэтому в уравнении (13.14) $\Delta B_{ij} = \Delta B_{ji}$ при любых E_k и σ_{kl}. Отсюда следует, что

$$z_{ijk} = z_{jik}. \tag{13.18}$$

Это соотношение уменьшает число независимых коэффициентов с 27 до 18 и позволяет ввести сокращенные обозначения, аналогичные тем, которые были использованы для пьезоэлектрических тензоров (см. стр. 140). Замена производится следующим способом. Коэффици-

центы B_{ij} записываются только с одним индексом, пробегающим значения от 1 до 6:

$$\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{31} \\ B_{12} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{23} & B_{33} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} B_1 & B_6 & B_5 \\ B_6 & B_2 & B_4 \\ B_5 & B_4 & B_3 \end{bmatrix}. \tag{13.19}$$

Соответственно два первых индекса при z_{ijk} объединяются в один, пробегающий значения от 1 до 6, и мы записываем уравнение электрооптического эффекта в виде

$$\Delta B_i = z_{ij} E_j \quad (i = 1, 2, \ldots, 6;\ j = 1, 2, 3). \tag{13.20}$$

При замене индексов у z_{ijk} *множители* 2 *или* $^1/_2$ *не появляются.*

Напомним, что множители 2 появились при введении сокращенных индексов у пьезоэлектрических модулей d_{ijk}. Чтобы понять причину этого различия, сравним уравнение пьезоэлектрического эффекта

$$\varepsilon_{jk} = d_{ijk} E_i \tag{7.19}$$

с уравнением электрооптического эффекта

$$\Delta B_{ij} = z_{ijk} E_k.$$

Заметим прежде всего, что у d_{ijk} объединяются *два последних* индекса, соответствующие индексам у ε_{jk}, тогда как у z_{ijk} объединяются *два первых* индекса, соответствующие индексам у ΔB_{ij}. Однако это не имеет отношения к вопросу о множителях 2. Множители 2 появляются перед d_{ij} потому, что они используются при определении одноиндексных деформаций. Определение одноиндексных B_{ij} дается без множителей 2, поэтому они и не появляются перед z_{ij}.

Ограничения, налагаемые симметрией кристалла на z_{ij}, совершенно аналогичны ограничениям, налагаемым на пьезоэлектрические модули d_{ij}. Матрицы для d_{ij}, приведенные в табл. 8, могут быть использованы и для z_{ij}, с двумя изменениями.

а) У z_{ij} пробегает значения от 1 до 6 *первый* индекс, а у d_{ij} — *второй*. Поэтому таблицы будут верны для z_{ij}, если считать i номером *столбца*, а j — номером *строки*, что обратно обычному порядку.

б) Поскольку множители 2, как указано выше, отсутствуют, следует считать, что символы, обозначенные двойными кружками, обозначают просто коэффициенты, численно равные, но противоположные по знаку коэффициентам, обозначенным жирными точками, с которыми данные символы соединены линиями; следовательно, символы, обозначенные двойными кружками, должны обозначать то же, что и символы, обозначенные простыми кружками.

3) Уменьшение числа независимых пьезооптических коэффициентов. Так как в уравнении (13.14) $\Delta B_{ij} = \Delta B_{ji}$ для любых E_k и σ_{kl}, то

$$\pi_{ijkl} = \pi_{jikl}. \tag{13.21}$$

ТАБЛИЦА 15

Формы матриц пьезооптических коэффициентов π *и упругооптических коэффициентов* p *

Обозначения

Для π- и p-матриц

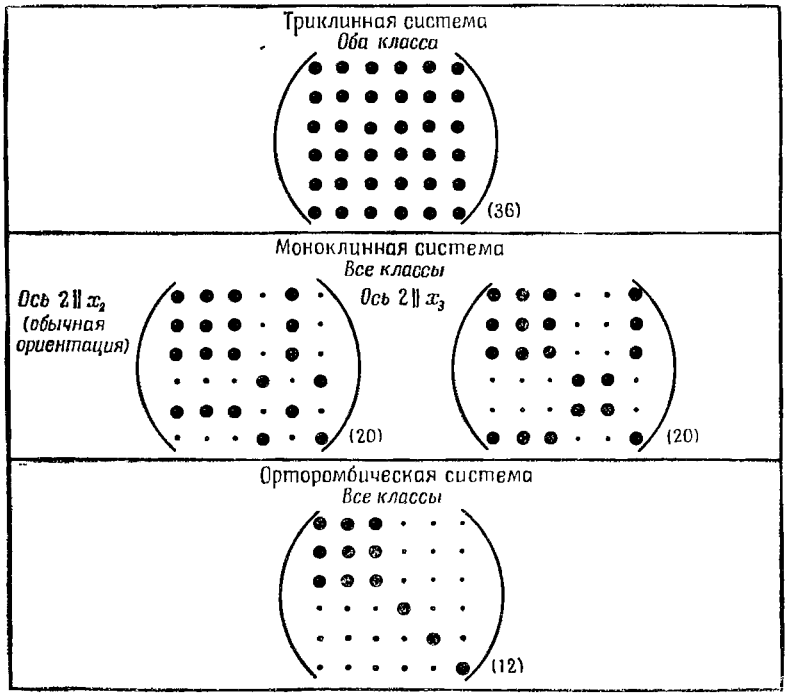
- компонента, равная нулю,
- компонента, отличная от нуля,
- равные компоненты,
- компоненты, численно равные, но противоположные по знаку.

Для π-матриц

- компонента, равная удвоенной компоненте, обозначенной жирной точкой, с которой данный символ соединен линией,
- компонента, равная взятой с обратным знаком удвоенной компоненте, обозначенной жирной точкой, с которой данный символ соединен линией,
- $(\pi_{11} - \pi_{12})$.

Для p-матриц

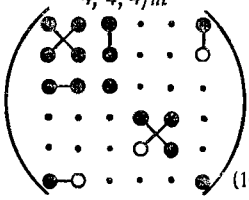
- компонента, равная компоненте, обозначенной жирной точкой, с которой данный символ соединен линией,
- компонента, равная взятой с обратным знаком компоненте, обозначенной жирной точкой, с которой данный символ соединен линией,
- $\frac{1}{2}(p_{11} - p_{12})$.



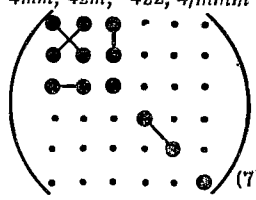
* Впервые эти матрицы определил Поккельс [75], но он допустил ошибки для 1 из 32 классов, которые повторялись всеми последующими авторами до тех пор, пока Багавантам [7, 8] не указал на них.

Тетрагональная система

Классы
4, $\bar{4}$, 4/m

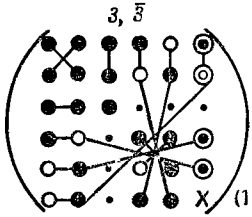


Классы
4mm, $\bar{4}$2m, 422, 4/mmm*

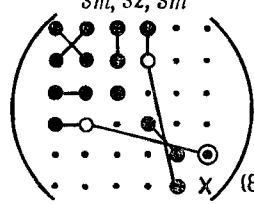


Тригональная система

Классы
3, $\bar{3}$

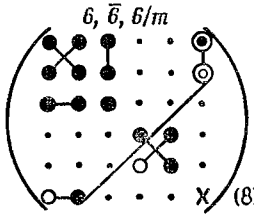


Классы
3m, 32, $\bar{3}$m

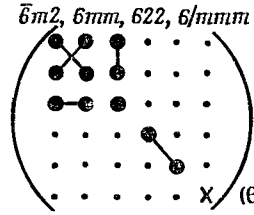


Гексагональная система

Классы
6, $\bar{6}$, 6/m

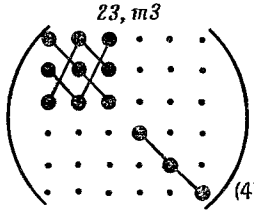


Классы
$\bar{6}$m2, 6mm, 622, 6/mmm

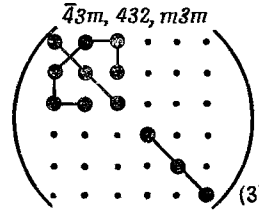


Кубическая система

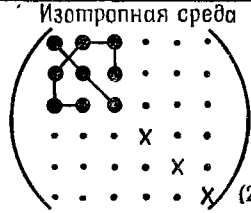
Классы
23, m3



Классы
$\bar{4}$3m, 432, m3m



Изотропная среда



* Такой вид имеет матрица для двух возможных ориентаций класса $\bar{4}2m$ ($2 \parallel x_1$ и $m \perp x_1$), поскольку при добавлении центра симметрии эти две ориентации неразличимы.

Далее, поскольку при отсутствии объемных моментов $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$ (см. стр. 111), мы можем положить

$$\pi_{ijkl} = \pi_{ijlk}. \tag{13.22}$$

Последняя операция аналогична той, которую мы делали для упругих податливостей (см. стр. 162).

Благодаря соотношениям (13.21) и (13.22) число независимых коэффициентов уменьшается от $3^4 = 81$ до 36; поэтому мы можем применять сокращенные обозначения, подобные тем, какие использовались для упругих констант (см. стр. 165). Это делается следующим образом. В уравнении пьезооптического эффекта

$$\Delta B_{ij} = \pi_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3) \tag{13.23}$$

индексы у ΔB_{ij} объединяются в соответствии с (13.19); аналогично заменяются индексы у σ_{kl}. Тогда мы получаем

$$\Delta B_m = \pi_{mn}\sigma_n \quad (m, n = 1, 2, \ldots, 6). \tag{13.24}$$

Коэффициенты π_{mn} связаны с π_{ijkl} согласно следующим правилам:

$\pi_{mn} = \pi_{ijkl}$, когда $n = 1$, 2 или 3,

$\pi_{mn} = 2\pi_{ijkl}$, когда $n = 4$, 5 или 6.

Множители 2 появляются в результате попарного объединения членов с напряжениями сдвига в правой части уравнения (13.23).

Проведенное сокращение числа индексов можно сравнить с соответствующим сокращением числа индексов у упругих податливостей в уравнении

$$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}. \tag{8.1}$$

При замене s_{ijkl} на s_{mn} у некоторых членов появляются множители 4, что обусловлено появлением добавочных множителей 2 в результате замены ε_{ij} на ε_m.

Поскольку энергия упругой деформации однозначно определяется деформациями, упругие константы связаны соотношениями $c_{ij} = c_{ji}$ и $s_{ij} = s_{ji}$, однако в общем случае

$$\pi_{mn} \neq \pi_{nm}. \tag{13.25}$$

Таким образом, число независимых коэффициентов π_{mn} для триклинного кристалла остается равным 36. Число независимых коэффициентов π_{mn} для других классов уменьшается в соответствии с их симметрией. Это уменьшение аналогично уменьшению числа упругих констант, за исключением того, что $\pi_{mn} \neq \pi_{nm}$ и что множители 2 появляются у других членов. Формы матриц (π_{mn}) приведены в табл. 15. Использованные обозначения, аналогичные введенным ранее, указаны в начале таблицы. Как и прежде, используется общепринятая ориентация осей координат относительно элементов симметрии (см. приложение 2), кроме особо оговоренных случаев. Число неза-

висимых компонент для каждого класса указано в скобках возле матрицы.

Если мы хотим описать пьезооптический эффект, пользуясь деформациями, а не напряжениями, и исходим из уравнения

$$\Delta B_{ij} = p_{ijrs}\varepsilon_{rs} \quad (i, j, r, s = 1, 2, 3), \tag{13.26}$$

то переход к матричным обозначениям делается аналогичным путем. Индексы у ΔB_{ij} объединяются согласно (13.19). При замене индексов у ε_{rs} необходимо ввести множители $^1/_2$ перед сдвиговыми деформациями [формула (7.20)]. (Сокращение индексов в уравнении упругости $\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl}$ проводится по точно такой же схеме.) Мы получаем тогда вместо (13.26) уравнение

$$\Delta B_m = p_{mn}\varepsilon_n \quad (m, n = 1, 2, \ldots, 6),$$

причем p_{mn} связаны с p_{ijrs} соотношениями

$$p_{mn} = p_{ijrs} \quad \text{для всех } m \text{ и } n,$$

т. е. *множители* 2 *или* $^1/_2$ *отсутствуют*. В общем случае $p_{mn} \neq p_{nm}$. Легко показать, что

$$p_{mn} = \pi_{mr}c_{rn}, \quad \pi_{mn} = p_{mr}s_{rn}.$$

Формы матрицы (p_{mn}) для различных классов подобны формам матрицы (π_{mn}), за исключением того, что часть множителей 2 стоит у других коэффициентов (см. табл. 15).

6. Фотоупругость кубических кристаллов. Из табл. 15 видно, что пьезооптические свойства кубических кристаллов и изотропных материалов не одинаковы. Кубические классы делятся на две группы. В классах 23 и $m3$, в которых оси второго порядка совпадают с осями куба (его ребрами), для определения пьезооптических свойств необходимы четыре коэффициента. Для второй группы классов, у которых с осями куба совпадают оси 4 или $\bar{4}$, пьезооптические свойства определяются только тремя коэффициентами. Исследуем теперь аналитически некоторые частные случаи упругих воздействий на кубические кристаллы.

1) Одноосное напряжение вдоль оси куба. Рассмотрим кубический кристалл класса 23 или $m3$, на который действует одноосное напряжение растяжения σ, параллельное оси куба. Пусть Ox_1 — направление напряжения и пусть Ox_2, Ox_3 — две другие оси куба. До приложения напряжения индикатриса представляла собой сферу

$$B^0\left(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2\right) = 1, \tag{13.27}$$

а показатель преломления определялся из выражения $B^0 = 1/(n^0)^2$. Под действием напряжения индикатриса изменяется и описывается теперь уравнением

$$B_1x_1^2 + B_2x_2^2 + B_3x_3^2 + 2B_4x_2x_3 + 2B_5x_3x_1 + 2B_6x_1x_2 = 1. \tag{13.28}$$

Матричное уравнение

$$\Delta B_i = \pi_{ij}\sigma_j \tag{13.29}$$

в развернутом виде записывается так:

$$\begin{pmatrix} \Delta B_1 \\ \Delta B_2 \\ \Delta B_3 \\ \Delta B_4 \\ \Delta B_5 \\ \Delta B_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 - B^0 \\ B_2 - B^0 \\ B_3 - B^0 \\ B_4 \\ B_5 \\ B_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{13} & \pi_{11} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{13} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pi_{11}\sigma \\ \pi_{13}\sigma \\ \pi_{12}\sigma \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

(Мы использовали правило умножения матриц, приведенное на стр. 184.)

Так как $B_4 = B_5 = B_6 = 0$, осями индикатрисы являются Ox_1, Ox_2 и Ox_3 (это можно видеть также и из симметрии). Чтобы найти изменения трех главных показателей преломления, запишем $B_1 = 1/n_1^2$. Отсюда $\Delta B_1 = -\left(2/n_1^3\right)\Delta n_1$. С достаточной степенью точности мы можем заменить n_1 на n^0; это дает

$$\Delta n_1 = -\frac{1}{2}(n^0)^3\,\Delta B_1 = -\frac{1}{2}(n^0)^3\,\pi_{11}\sigma. \tag{13.30}$$

Аналогично,

$$\Delta n_2 = -\frac{1}{2}(n^0)^3\,\pi_{13}\sigma \tag{13.31}$$

и

$$\Delta n_3 = -\frac{1}{2}(n^0)^3\,\pi_{12}\sigma. \tag{13.32}$$

Следовательно, кристалл становится двуосным. Как видно из табл. 15, для кристаллов, принадлежащих к трем другим кубическим классам ($\bar{4}3m$, 432, $m3m$), схема коэффициентов имеет такой же вид, за исключением того, что $\pi_{12} = \pi_{13}$. Таким образом, в этом случае $\Delta n_2 = \Delta n_3$, и кристалл оказывается одноосным.

Из уравнений (13.30) — (13.32) ясно видно, что двойное лучепреломление для светового луча, распространяющегося вдоль оси x_2, выражается формулой

$$n_\parallel - n_\perp = \Delta n_1 - \Delta n_3 = -\frac{1}{2}(n^0)^3(\pi_{11} - \pi_{12})\,\sigma, \tag{13.33}$$

а для светового луча, распространяющегося вдоль оси x_3, — формулой

$$n_\parallel - n_\perp = \Delta n_1 - \Delta n_2 = -\frac{1}{2}(n^0)^3(\pi_{11} - \pi_{13})\,\sigma, \tag{13.34}$$

где $n_\parallel$ и $n_\perp$ — показатели преломления соответственно в направлениях, параллельном и перпендикулярном направлению напряжения,

Из проведенных вычислений легко видеть, почему для кристаллов классов 23 и $m3$ коэффициент π_{12} не равен π_{13} (в отличие от того, как первоначально считал Поккельс). Если x_1 является осью четвертого порядка, то двойное лучепреломление в направлениях x_2 и x_3 должно быть одинаково в соответствии с принципом симметрии, сформулированным на стр. 290, поэтому $\pi_{12} = \pi_{13}$. Однако у кристаллов классов 23 и $m3$ ось x_1 является лишь осью второго порядка, и в кристалле, находящемся под действием напряжений, направления x_2 и x_3 не связаны симметрией. В соответствии с этим симметрия кристалла класса 23, подвергнутого действию рассматриваемого напряжения, понижается до симметрии класса 222; аналогично, симметрия кристалла класса $m3$ понижается до mmm. Оба получающихся класса являются орторомбическими и, следовательно, двуосными.

Соотношения между коэффициентами π для кристаллов классов 23 и $m3$ легко получаются методом прямой проверки (см. стр. 146). Ось третьего порядка в положительном октанте действует на оси координат и, следовательно, на индексы по следующей схеме:

$$1 \to 2,\ 2 \to 3,\ 3 \to 1.$$

Таковы преобразования индексов при *четырехиндексных* (тензорных) обозначениях. Следовательно, при таких обозначениях мы получаем:

$$11 \to 22,\ 22 \to 33,\ 33 \to 11,\ 23 \to 31,\ 31 \to 12,\ 12 \to 23.$$

Эти же преобразования при *двухиндексных* обозначениях записываются в виде

$$1 \to 2,\ 2 \to 3,\ 3 \to 1,\ 4 \to 5,\ 5 \to 6,\ 6 \to 4.$$

Поэтому

$$\pi_{11} = \pi_{22} = \pi_{33},\quad \pi_{12} = \pi_{23} = \pi_{31},\quad \pi_{13} = \pi_{21} = \pi_{32},$$
$$\pi_{44} = \pi_{55} = \pi_{66},$$

как показано в табл. 15. Остальные коэффициенты обращаются в нуль, в чем можно убедиться, действуя одной из других осей третьего порядка.

Формулы (13.33) и (13.34) относятся к кубическому кристаллу, находящемуся под действием одноосного растяжения, параллельного оси куба. В табл. 16 приводятся формулы для некоторых других направлений напряжения и наблюдения.

Из формул (13.33) и (13.34) и табл. 16 видно, что, сжимая кубический кристалл вдоль кубической оси и измеряя возникающее при этом двойное лучепреломление в направлении, перпендикулярном направлению напряжения, можно найти значения $(\pi_{11} - \pi_{12})$ и $(\pi_{11} - \pi_{13})$. Такие измерения сделать сравнительно легко. Однако можно показать, что с помощью одних лишь измерений двойного лучепреломления нельзя определить π_{11} и π_{12} или π_{11} и π_{13} по отдельности. В формулы

ТАБЛИЦА 16

Двойное лучепреломление кубических кристаллов под действием одноосного напряжения при различных направлениях наблюдения

Направление одноосного напряжения	Направление наблюдения	$(n_{\parallel} - n_{\perp})$	
		классы 23, $m3$	классы $\bar{4}3m$, 432, $m3m$
[100]	[010]	$-\frac{1}{2}(n^0)^3\sigma(\pi_{11}-\pi_{12})$	$-\frac{1}{2}(n^0)^3\sigma(\pi_{11}-\pi_{12})$
	[001]	$-\frac{1}{2}(n^0)^3\sigma(\pi_{11}-\pi_{13})$	$-\frac{1}{2}(n^0)^3\sigma(\pi_{11}-\pi_{12})$
	[011]	$-\frac{1}{2}(n^0)^3\sigma\left[\pi_{11}-\frac{1}{2}(\pi_{12}+\pi_{13})\right]$	$-\frac{1}{2}(n^0)^3\sigma(\pi_{11}-\pi_{12})$
	[01$\bar{1}$]	$-\frac{1}{2}(n^0)^3\sigma\left[\pi_{11}-\frac{1}{2}(\pi_{12}+\pi_{13})\right]$	$-\frac{1}{2}(n^0)^3\sigma(\pi_{11}-\pi_{12})$
[111]	Все направления, перпендикулярные [111]	$-\frac{1}{2}(n^0)^3\sigma\pi_{44}$	$-\frac{1}{2}(n^0)^3\sigma\pi_{44}$

всегда будут входить именно разности $(\pi_{11}-\pi_{12})$ или $(\pi_{11}-\pi_{13})$. Чтобы получить абсолютные значения π_{11}, π_{12}, π_{13}, необходимо проделать значительно более трудные измерения абсолютного изменения одного из показателей преломления при приложении напряжения. Для этого нужно воспользоваться интерферометрическим методом. Чтобы измерить π_{44}, удобно приложить к кристаллу напряжение сжатия вдоль [111]. Кроме того, π_{44}, конечно, определяет изменение показателя преломления под действием напряжения сдвига в плоскости, перпендикулярной кубической оси.

Измеренные значения π_{ij} и p_{ij} для некоторых кубических кристаллов приведены в табл. 17. Эти значения иногда слегка зависят от длины волны света. К вопросу о знаках следует относится очень внимательно[1]). Рассмотрим, например, кристалл хлорида натрия,

---

[1]) Вводя определение π_{ij}, Поккельс [75] считал напряжение сжатия положительным и поставил знак минус в правой части определяющего уравнения (13.24). В настоящей книге мы считаем положительным напряжение растяжения. Поэтому π_{ij} у Поккельса и у нас одинаковы. В качестве единиц для π_{ij} Поккельс использовал $мм^2/кГ$.

сжатый вдоль кубической оси. Из табл. 16 получаем, что

$$n_{\parallel} - n_{\perp} = -\frac{1}{2}(n^0)^3(\pi_{11} - \pi_{12})\sigma.$$

Из табл. 17 мы видим, что разность $(\pi_{11} - \pi_{12}) < 0$; по условию напряжение σ отрицательно; поэтому разность $(n_{\parallel} - n_{\perp}) = (n_e - n_0)$ отрицательна. Следовательно, при сжатии вдоль кубической оси кристалл хлорида натрия становится одноосным отрицательным кристаллом.

ТАБЛИЦА 17

Фотоупругость кубических кристаллов*

а. Значения пьезооптических коэффициентов для D-линии натрия

Кристалл	Класс	π_{11}	π_{12}	π_{13}	π_{44}	$\pi_{11}-\pi_{12}$	$\pi_{11}-\pi_{13}$	Литература**
Калиевые квасцы	$m3$	3,7	9,1	8,5	—0,65	—5,43	—4,82	[12]
Нитрат бария	$m3$	18,11	40,0	35,2	—1,69	—23,84	—17,13	[10]
Нитрат свинца	$m3$	70,21	89,34	82,05	—1,39	—19,13	—11,84	[10]
Хлорид натрия	$m3m$	0,25	1,46		—0,85	—1,21		[75]
Хлорид калия	$m3m$	—	—		—4,31	1,70		[75]
Флюорит	$m3m$	—0,29	1,16		0,698	—1,45		[75]
Алмаз	$m3m$	—0,43	0,37		—0,27	—0,80		[23, 76]

б. Значения упругооптических коэффициентов для D-линии натрия

Кристалл	Класс	p_{11}	p_{12}	p_{13}	p_{44}	$p_{11}-p_{12}$	$p_{11}-p_{13}$	Литература**
Калиевые квасцы	$m3$	0,27	0,35	0,34	—0,0056	—0,0792	—0,0704	[12]
Нитрат бария	$m3$	2,49	3,40	3,20	—0,0205	—0,992	—0,713	[10]
Нитрат свинца	$m3$	8,50	8,78	8,67	—0,0191	—0,281	—0,174	[10]
Хлорид натрия	$m3m$	0,137	0,178		—0,0108	—0,0408		[75]
Хлорид калия	$m3m$	—	—		—0,0276	0,0595		[75]
Флюорит	$m3m$	0,0558	0,228		0,0236	—0,1722		[75]
Алмаз	$m3m$	—0,125	0,325		—0,11	—0,45		[23, 76]

* Пьезооптические коэффициенты выражены в 10^{-12} $м^2/н = 10^{-11}$ $см^2/дн$, упругооптические коэффициенты безразмерны.

** Дополнительные данные см. в работах [11, 14, 22, 23, 63, 68, 70, 71, 94].

§ 3. Общее рассмотрение эффектов второго порядка

1. Термодинамическое рассмотрение. Мы уже видели, что электрооптический и пьезооптический эффекты являются эффектами второго порядка, так как они возникают за счет зависимости диэлектрической проницаемости от электрического поля и механических напряжений. Обсуждение термодинамики подобных эффектов второго порядка, число которых довольно значительно, можно провести таким же образом, как было уже сделано для эффектов первого порядка в гл. X. Однако полное рассмотрение слишком длинно, чтобы приводить его здесь, поэтому мы наметим лишь общую схему рассуждений. При этом индексы у различных тензоров мы будем опускать. Такие обозначения, естественно, являются нестрогими, но, когда возникнет необходимость, легко перейти к строгим обозначениям.

Так же как в гл. X, будем считать σ, E и T независимыми переменными, определяющими состояние кристалла. Пьезооптический эффект, как мы уже видели, по существу обусловлен изменением диэлектрической проницаемости под действием механических напряжений. Следовательно, пьезооптический эффект пропорционален

$$\frac{\partial \varkappa}{\partial \sigma} = \frac{\partial}{\partial \sigma}\left(\frac{\partial D}{\partial E}\right). \tag{13.35}$$

Так как D является функцией состояния, порядок дифференцирования можно изменить и записать

$$\frac{\partial \varkappa}{\partial \sigma} = \frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{\partial D}{\partial \sigma}\right) = \frac{\partial d}{\partial E}, \tag{13.36}$$

где d — пьезоэлектрический модуль, по определению равный производной $\partial D/\partial \sigma$. Таким образом, коэффициенты, описывающие изменение диэлектрической проницаемости в зависимости от механических напряжений, численно равны коэффициентам, описывающим изменение пьезоэлектрических модулей в зависимости от поля. Следует, однако, отметить, что *это утверждение справедливо только в том случае, когда частота поля в обоих случаях одинакова.*

Коэффициенты $\partial d/\partial E$ можно, используя термодинамическое уравнение (10.35), записать в виде

$$\frac{\partial d}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{\partial D}{\partial \sigma}\right) = \frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial E}\right). \tag{13.37}$$

Таким образом, изменение диэлектрической проницаемости в зависимости от механического напряжения оказывается связанным со второй производной деформации по полю, $\partial^2\varepsilon/\partial E^2$. Эта производная описывает явление *электрострикции* (см. § 3, п. 2). Электрострикция возникает в результате *квадратичной* зависимости ε от E и, следовательно, отличается от обратного пьезоэлектрического эффекта, обусловленного *линейной* зависимостью ε от E. Таким

образом, мы установили связи между фотоупругостью, электрострикцией и коэффициентами $\partial d/\partial E$.

Аналогично, можно найти много иных зависимостей между другими вторыми производными ε, D и S по σ, E и T. Все эти вторые производные описывают эффекты второго порядка. В качестве примера можно привести производные $\partial^2\varepsilon/\partial\sigma^2$ — податливости второго порядка. Можно упомянуть также производные $(\partial^2\varepsilon/\partial\sigma\,\partial T)$, которые являются коэффициентами в выражении, описывающем температурную зависимость податливостей $\partial\varepsilon/\partial\sigma$; эти коэффициенты равны коэффициентам, характеризующим зависимость коэффициентов теплового расширения $\partial\varepsilon/\partial T$ от механических напряжений.

В гл. X было показано, что первые производные (например, $\partial D/\partial E$, $\partial\varepsilon/\partial T$), описывающие эффекты первого порядка (диэлектрическую проницаемость, тепловое расширение и др.), можно представить как *вторые* производные термодинамического потенциала Ф. Мы определяли Ф следующим образом:

$$d\Phi = -\varepsilon\, d\sigma - D\, dE - S\, dT; \tag{10.32}$$

тогда, например,

$$D = -\frac{\partial\Phi}{\partial E},$$

поэтому

$$\varkappa = \frac{\partial D}{\partial E} = -\frac{\partial^2\Phi}{\partial E^2}.$$

Отсюда следует, что производные, подобные $\partial^2 D/\partial E^2$ — величине, определяющей диэлектрическую проницаемость второго порядка (и электрооптический эффект второго порядка), можно представить как *третьи* производные Ф:

$$\frac{\partial^2 D}{\partial E^2} = -\frac{\partial^3\Phi}{\partial E^3}. \tag{13.38}$$

Аналогично, коэффициенты $(\partial^2 D/\partial\sigma\,\partial E)$, которые, как мы показали выше, определяют пьезооптический и электрострикционный эффекты, тоже можно записать как третьи производные Ф:

$$\frac{\partial^2 D}{\partial\sigma\,\partial E} = -\frac{\partial^3\Phi}{\partial\sigma\,\partial E^2}. \tag{13.39}$$

2. Электрострикция и морфические эффекты. В случае линейного пьезоэлектрического эффекта (т. е. эффекта первого порядка), обсуждавшегося в гл. VII, поляризация пропорциональна механическому напряжению (прямой эффект), а деформация — полю (обратный эффект). Когда напряжения и деформация малы, нужно рассматривать только линейные эффекты. При больших напряжениях и деформациях необходимо принимать во внимание и квадратичные эффекты. Поэтому для обратного эффекта можно записать

$$\varepsilon_{jk} = d^0_{ijk}E_i + \gamma_{ijlk}E_iE_l. \tag{13.40}$$

Первый член в правой части выражает линейный пьезоэлектрический эффект. Коэффициент d^0_{ijk} представляет собой значение $d_{ijk} = (\partial\varepsilon_{jk}/\partial E_i)$ при бесконечно малом поле. Второй член описывает деформации, пропорциональные произведениям компонент напряженности поля; это — электрострикционный член, вызывающий появление вторых производных деформации по полю. Если направление поля изменяется на обратное, то все компоненты E_i изменяют знак, поэтому деформации, описываемые линейными членами, также изменяют знак и растяжение заменяется на сжатие и т. д. Наоборот, второй член при изменении направления поля на обратное не изменяет знака. Входящий во второй член тензор γ_{iljk} является тензором четвертого ранга, который, очевидно, симметричен по паре i и l и по паре j и k. У различных кристаллографических классов он имеет такие же отличные от нуля компоненты, как фотоупругие тензоры π_{ijkl} и p_{ijkl}. Не все компоненты последних обращаются в нуль даже для изотропных материалов; отсюда следует, что электрострикция может наблюдаться в любых материалах, включая стекла и жидкости. В этом отношении электрострикционная деформация резко отличается от пьезоэлектрической, которая линейно зависит от поля и, как мы уже видели, отсутствует в центросимметричных кристаллах.

Уравнение (13.40) можно рассматривать и с другой точки зрения. Запишем его в виде

$$\varepsilon_{jk} = (d^0_{ijk} + \gamma_{iljk}E_l)E_i. \tag{13.41}$$

При такой записи тензор третьего ранга $\gamma_{iljk}E_l$ оказывается поправкой к d^0_{ijk}. В общем случае ко всем компонентам d^0_{ijk} следует добавить малую поправку, пропорциональную полю.

Остановимся еще на одном вопросе. При наложении электрического поля симметрия кристалла может понизиться или не понизиться (в соответствии с принципом, сформулированным на стр. 290). В любом случае поправочные члены $\gamma_{iljk}E_l$ образуют тензор, который должен согласовываться с симметрией комбинации: кристалл плюс поле. Если эта симметрия ниже симметрии самого кристалла, то поправочные члены могут привести к появлению конечных значений некоторых компонент d_{ijk}, ранее равных нулю. Иными словами, когда симметрия кристалла под действием поля понижается, могут *возникнуть* новые пьезоэлектрические модули. Эти новые модули пропорциональны полю и, следовательно, определяют деформацию, пропорциональную квадрату поля. Подобный частный тип эффекта второго порядка называется *морфическим эффектом*. В общем случае морфический эффект должен наблюдаться всегда, когда воздействие, понижая симметрию кристалла, вызывает появление новых коэффициентов, пропорциональных этому воздействию.

РЕЗЮМЕ

Двойное лучепреломление. Уравнение *индикатрисы* записывается в виде

$$\frac{x_1^2}{n_1^2}+\frac{x_2^2}{n_2^2}+\frac{x_3^2}{n_3^2}=1, \qquad (13.5)$$

где $n_1=\sqrt{K_1}$, $n_2=\sqrt{K_2}$, $n_3=\sqrt{K_3}$ — *главные показатели преломления*. Индикатриса (13.5) идентична характеристической поверхности для относительной диэлектрической непроницаемости

$$B_1x_1^2+B_2x_2^2+B_3x_3^2=1, \qquad (13.6)$$

где $B_1=1/K_1$, $B_2=1/K_2$, $B_3=1/K_3$ — главные относительные диэлектрические непроницаемости.

Для кубических кристаллов $n_1=n_2=n_3$. Гексагональные, тетрагональные и тригональные кристаллы *одноосны* ($n_1=n_2=n_0$, $n_3=n_e$); они положительны, если $n_e>n_0$, и отрицательны, если $n_e<n_0$. Орторомбические, моноклинные и триклинные кристаллы *двуосны*.

Электрооптический и пьезооптический эффекты. Если к кристаллу приложены электрическое поле и механические напряжения, то коэффициенты индикатрисы $B_{ij}x_ix_j=1$ изменяются на малую величину ΔB_{ij}, пропорциональную полю и напряжениям

$$\Delta B_{ij}=z_{ijk}E_k+\pi_{ijkl}\sigma_{kl}. \qquad (13.14)$$

Здесь z_{ijk} — *электрооптические коэффициенты*, образующие тензор третьего ранга, а π_{ijkl} — *пьезооптические коэффициенты*, образующие тензор четвертого ранга. Уравнение (13.14) можно записать также в виде (выразив напряжения через деформации)

$$\Delta B_{ij}=z_{ijk}E_k+p_{ijrs}\varepsilon_{rs}, \qquad (13.16)$$

где

$$p_{ijrs}=\pi_{ijkl}c_{klrs}, \quad \pi_{ijkl}=p_{ijrs}s_{rskl}; \qquad (13.17)$$

здесь p_{ijrs} — безразмерные *упругооптические коэффициенты*.

Электрооптический эффект при постоянных напряжениях является суммой эффекта при постоянных деформациях (первичный эффект) и побочного эффекта, обусловленного комбинацией пьезоэлектрического и пьезооптического эффектов (вторичный эффект).

Так как $B_{ij}=B_{ji}$, то $z_{ijk}=z_{jik}$. Объединяя индексы у ΔB_{ij} и два первых индекса у z_{ijk} в один, пробегающий значения от 1 до 6, уравнение электрооптического эффекта можно записать в виде

$$\Delta B_m=z_{mn}E_n \quad (m=1, 2, \ldots, 6; \quad n=1, 2, 3). \qquad (13.20)$$

При замене $z_{jkl} \to z_{mn}$ множители 2 и $^1/_2$ не появляются. В общем случае имеются 18 независимых компонент z_{ij}. За счет симметрии кристалла это число уменьшается так же, как в случае пьезоэлектрических модулей. Форма матрицы (z_{ij}) одинакова с формой транспонированной пьезоэлектрической матрицы $(d_{ij})_t$, за исключением того, что некоторые множители 2 будут стоять у других членов.

Так как $B_{ij} = B_{ji}$, то $\pi_{ijkl} = \pi_{jikl}$; так как $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$ в отсутствие объемных моментов, то $\pi_{ijkl} = \pi_{ijlk}$. Поэтому, используя двухиндексные обозначения, уравнение для пьезооптического эффекта можно записать в форме

$$\Delta B_m = \pi_{mn}\sigma_n \quad (m,\ n = 1,\ 2,\ \ldots,\ 6), \tag{13.24}$$

где

$$\pi_{mn} = \pi_{ijkl}, \quad \text{когда} \quad n = 1,\ 2 \quad \text{или} \quad 3,$$
$$\pi_{mn} = 2\pi_{ijkl}, \quad \text{когда} \quad n = 4,\ 5 \quad \text{или} \quad 6.$$

В общем случае

$$\pi_{mn} \neq \pi_{nm}.$$

Если пьезооптический эффект выразить через деформации (записанные в одноиндексных обозначениях), то его уравнение примет вид

$$\Delta B_m = p_{mn}\varepsilon_n \quad (m,\ n = 1,\ 2,\ \ldots,\ 6),$$

причем

$$p_{mn} = \pi_{mr}c_{rn}, \quad \pi_{mn} = p_{mr}s_{rn}.$$

При сокращении числа индексов у p_{ijrs} множители 2 или $^1/_2$ не появляются. В общем случае

$$p_{mn} \neq p_{nm}.$$

Вообще говоря, имеются 36 независимых коэффициентов π_{mn} и p_{mn}. Это число уменьшается за счет симметрии кристалла до трех у наиболее симметричных кубических классов.

Электрооптический и пьезооптический эффекты определяются соответственно производными типа $\partial^2 D/\partial E^2$ и $(\partial^2 D/\partial\sigma\,\partial E)$. Если записать

$$n = n^0 + aE_0 + a'\sigma + bE_0^2 + b'\sigma^2 + b''E_0\sigma + \ldots, \tag{13.12}$$

то член aE_0 выражает электрооптический эффект первого порядка (линейный эффект). В центросимметричных кристаллах линейный электрооптический эффект не может иметь места. Член $a'\sigma$ выражает линейный пьезооптический эффект и член bE_0^2 — электрический эффект второго порядка (*эффект Керра* или квадратичный электрооптический эффект); оба эти эффекта могут возникать в кристаллах любой симметрии.

Выписывая соответствующие производные и используя термодинамические соотношения, приведенные в гл. X, можно найти ряд зависимостей между различными вторыми производными ε, D и S по σ, E и T. Так, например, пьезооптические коэффициенты $(\partial^2 D/\partial E \partial \sigma)$ и коэффициенты электрострикции $(\partial^2 \varepsilon/\partial E^2)$ формально связаны друг с другом. Однако коэффициенты равны друг другу только при условии, что частота поля в обоих случаях одинакова. Такого типа эффекты второго порядка могут быть описаны с помощью третьих производных термодинамических потенциалов.

В уравнении пьезоэлектрического эффекта

$$\varepsilon_{jk} = d^0_{ijk} E_i + \gamma_{ijlk} E_l E_l \qquad (13.40)$$

второй член в правой части выражает электрострикцию; в нем γ_{ijk} — тензор четвертого ранга, аналогичный π_{ijkl} и p_{ijkl}.

ЗАДАЧИ

1. Доказать, что в кубических кристаллах, принадлежащих к классам $\bar{4}3m$, 432 и $m3m$, изменение показателя преломления под действием гидростатического давления определяется формулой $\rho\,(dn/d\rho) = \frac{1}{2} n^3 p_0$, где $p_0 = (p_{11} + 2p_{12})/3$, а ρ — плотность.

Глава XIV

ВРАЩЕНИЕ ПЛОСКОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИИ

§ 1. Введение

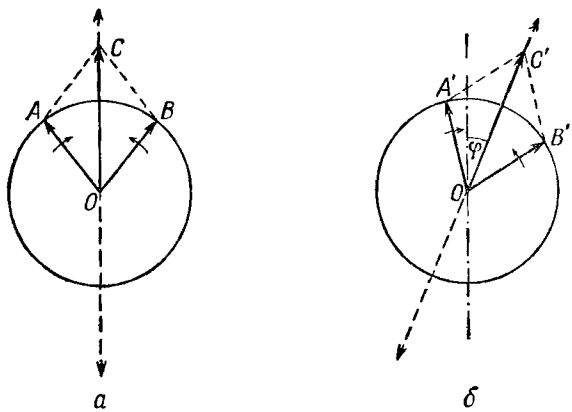
От явления двойного лучепреломления, рассматривавшегося в предыдущей главе, следует отличать явление *вращения плоскости поляризации*, или *оптической активности*. Оно состоит в том, что при прохождении плоско-поляризованного монохроматического света через определенные изотропные материалы плоскость поляризации поворачивается, причем угол поворота, как было установлено, пропорционален толщине материала. Это же явление наблюдается в некоторых кубических кристаллах, а также во многих одноосных и двуосных кристаллах при прохождении света вдоль оптической оси — направления, в котором обычное двойное лучепреломление отсутствует (яркий пример — α-кварц).

Явление вращения плоскости поляризации объясняется следующим образом. Во всех случаях, когда плоско-поляризованная волна с произвольным направлением плоскости поляризации вступает в некоторую среду, она разлагается на две циркулярно-поляризованные волны — одну с правым, другую с левым направлением вращения [1]). На фиг. 80, *а* показано расположение векторов в точке вступления волны в среду, как оно представлялось бы наблюдателю, смотрящему навстречу волне. Векторы OA и OB, изображающие векторы $\boldsymbol{D}$ двух циркулярно-поляризованных колебаний, вращаются в противоположных направлениях с одинаковой угловой скоростью. Вектор OA, вращающийся по часовой стрелке, представляет собой правую компоненту, вектор OB, вращающийся против часовой стрелки, — левую компоненту. Эти две компоненты в совокупности формально эквивалентны вектору OC, сохраняющему свое направление и предста-

---

[1]) У циркулярно-поляризованной волны с правым вращением вектор индукции $\boldsymbol{D}$ в данной точке вращается против часовой стрелки, если смотреть в направлении распространения волны. Следовательно, для наблюдателя, смотрящего навстречу волне, вектор $\boldsymbol{D}$ вращается по часовой стрелке. *В фиксированный момент времени* концы векторов $\boldsymbol{D}$ для точек заданной волновой нормали образуют правовинтовую линию. Изменение $\boldsymbol{D}$ при прохождении волны можно наглядно представить себе, если считать, что эта винтовая линия равномерно движется вдоль своей оси, не изменяясь и не поворачиваясь.

вляющему собой произвольное плоско-поляризованное колебание. Сама рассматриваемая среда является оптически активной (левовращающей либо правовращающей), поэтому две циркулярно-поляризованные волны распространяются в ней с несколько различными скоростями. В результате, если считать, что при вступлении в среду обе волны имели одинаковую фазу, то при выходе из среды они приобретут некоторую разность фаз. Картина, наблюдаемая в точке выхода, показана на фиг. 80, *б*. Векторы индукции OA' и OB' по-прежнему вращаются в противоположных направлениях с равной



Фиг. 80. Вращение плоскости поляризации при прохождении света через кристалл в направлении, в котором обычное двойное лучепреломление отсутствует.

а — расположение векторов в точке вступления волны в среду; *б* — расположение векторов в точке выхода волны из среды.

угловой скоростью, но теперь они проходят через вертикальное положение не одновременно. Их результирующей теперь является вектор OC', который колеблется в плоскости, составляющей угол φ с вертикалью. Нетрудно видеть, что, когда вектор OA' совпадает с вертикалью, вектор OB' еще отклонен от нее на угол 2φ. Угол 2φ есть разность фаз. Следовательно, *угол поворота плоскости поляризации равен половине разности фаз между двумя циркулярно-поляризованными компонентами*. В случае, изображенном на фиг. 80, компонента с правым вращением имеет бо́льшую (фазовую) скорость, поэтому она выходит из среды, опережая левую компоненту по фазе [1]).

[1]) Чтобы помочь читателю разобраться в этом вопросе, приведем следующее дополнительное объяснение. Согласно предыдущему примечанию, мы можем представить каждую из двух волн как жесткую винтовую линию, перемещающуюся в среде путем чистой трансляции. При этом шаг (длина волны) одной винтовой линии слегка отличен от шага другой, отличны и скорости перемещения; наоборот, число витков, проходящих через данную

Плоскость поляризации оказывается повернутой *по часовой стрелке* с точки зрения наблюдателя, смотрящего навстречу лучу. Такое вращение плоскости поляризации мы, в соответствии с общепринятой терминологией, назовем *правым* и определим его как *положительное* (при условии, что выбрана правая система координат)[1]. Можно запомнить, что знак вращения одинаков со знаком той циркулярно-поляризованной компоненты, которая имеет бо́льшую скорость, т. е. правое вращение соответствует тому случаю, когда компонента с правым направлением вращения имеет в среде бо́льшую скорость.

Выразим теперь угол поворота через показатели преломления n_r и n_l двух циркулярно-поляризованных компонент (индексы r и l относятся соответственно к правой и левой компонентам). Число оборотов вектора индукции правой компоненты, укладывающихся между точками входа и выхода (число витков винтовой линии), равно d/λ_r, где d — длина пути и λ_r — длина световой волны в данной среде. Для левой компоненты число таких оборотов равно d/λ_l. Разность числа оборотов есть разность фаз. Следовательно, разность фаз, выраженная в радианах, равна

$$2\pi d\left(\frac{1}{\lambda_l}-\frac{1}{\lambda_r}\right)=\frac{2\pi d}{\lambda_0}(n_l-n_r);$$

здесь λ_0 — длина волны *в вакууме*. Таким образом, угол поворота плоскости поляризации определяется формулой

$$\varphi=\frac{\pi d}{\lambda_0}(n_l-n_r). \tag{14.1}$$

Угол поворота плоскости поляризации на единицу длины пути волны в данной среде $\rho=\varphi/d$, называемый *удельным вращением*, определяется формулой

$$\rho=\frac{\pi}{\lambda_0}(n_l-n_r). \tag{14.2}$$

Разность (n_l-n_r) очень мала по сравнению с единицей; для большинства оптически активных кристаллов (n_l-n_r) — величина порядка 10^{-4} или еще меньше. При обычном же двойном лучепре-

точку среды за единицу времени (частота), для обеих линий одинаково. Фиксированная точка на линии соответствует определенной фазе. В тот момент, когда OA и OB на фиг. 80, *а* займут вертикальное положение, отметим соответствующие точки на обеих винтовых линиях. Эти две точки будут перемещаться вместе с винтовыми линиями с различной скоростью, причем точка, находящаяся на правой линии, достигнет плоскости выхода быстрее второй. В этот момент OA' на фиг. 80, *б* занимает вертикальное положение; OB' примет это положение в некоторый более поздний момент, когда плоскости выхода достигнет точка, находящаяся на левой линии. Следовательно, в плоскости выхода OA' примет вертикальное положение раньше, чем OB', как и показано на фиг. 80, *б*.

[1] Правым кварцем называется такой кристалл кварца, который обладает правым вращением вдоль оптической оси.

ломлении разность показателей преломления имеет величину порядка от 10^{-3} до 10^{-1}. Однако в формуле (14.1) длина волны λ_0 очень мала по сравнению с макроскопической величиной d; это означает, что, несмотря на малость $(n_l - n_r)$, угол вращения φ может иметь значительную величину. В качестве численного примера рассмотрим случай, когда монохроматический пучок света с $\lambda_0 = 5893$ Å (желтая линия натрия) проходит вдоль оптической оси правого α-кварца. При этом $n_l - n_r = 7{,}10 \cdot 10^{-5}$. Следовательно, пластинка толщиной 1 *мм*, вырезанная нормально к оптической оси, поворачивает плоскость поляризации на угол

$$\varphi = \frac{\pi \cdot 10^{-1} \cdot 7{,}10 \cdot 10^{-5}}{5893 \cdot 10^{-8}} = 0{,}379 \text{ рад} = 21{,}7°.$$

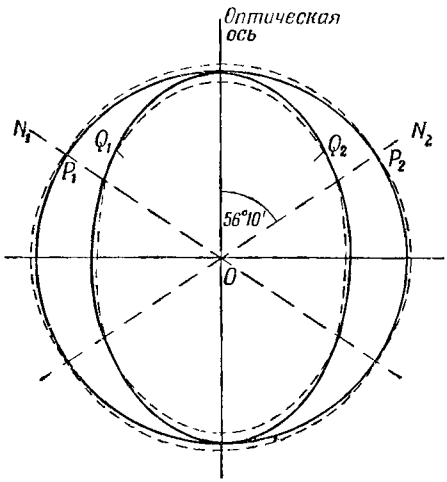
В согласии с данным выше объяснением вращения плоскости поляризации найдено, что если циркулярно-поляризованная волна входит в некоторую среду, то, выходя из нее, она остается циркулярно-поляризованной. Итак, необходимо отметить существенное свойство оптически активных изотропных сред, кубических кристаллов и (в случае прохождения света вдоль оптической оси) одноосных и двуосных кристаллов: *две циркулярно-поляризованные волны, имеющие противоположное направление вращения вектора* $\boldsymbol{D}$ *и распространяющиеся с различной скоростью, проходят через такую среду, не изменяясь по форме, т. е. не изменяя состояния поляризации, тогда как состояние поляризации плоскополяризованной волны при этом изменится.*

§ 2. Вращение плоскости поляризации и двойное лучепреломление

Рассмотрение, проведенное выше, применимо лишь к изотропным материалам и кубическим кристаллам, а для остальных кристаллов — лишь при прохождении света вдоль оптической оси. Эту оговорку необходимо сделать потому, что только в этих случаях вращение плоскости поляризации не осложняется наличием обычного двойного лучепреломления. Теперь мы должны поставить более общий вопрос. Пусть в двоякопреломляющем кристалле наблюдается вращение плоскости поляризации при прохождении света вдоль оптической оси; какие новые эффекты появятся, если в таком кристалле свет будет распространяться в других направлениях? В этом случае вращение плоскости поляризации налагается на обычное двойное лучепреломление и может рассматриваться как небольшое возмущение последнего.

Рассмотрим, например, волновые поверхности α-кварца, изображенные (без соблюдения масштаба) на фиг. 81. Как уже указывалось, α-кварц является положительным одноосным кристаллом и, следовательно, в отсутствие вращения плоскости поляризации его волновые

поверхности должны представлять собой сферу и эллипсоид вращения, как показано на фиг. 81 сплошными линиями. Эти поверхности касаются друг друга в точках, лежащих на оптической оси, поскольку скорости двух волн в этом направлении одинаковы. Два главных показателя преломления кварца имеют значения $n_e = 1{,}553$ и $n_0 = 1{,}544$. Следовательно, отношение радиусов волновых поверхностей, перпендикулярных оптической оси, равно $1{,}553/1{,}544 = 1{,}006$. Наличие вращения плоскости поляризации приводит к небольшому искажению формы этих волновых поверхностей, как показано штриховыми линиями на фиг. 81. Эти поверхности теперь не касаются друг друга. Расстояние между ними вдоль оптической оси соответствует разности скоростей двух циркулярно-поляризованных лучей, обсуждавшейся в § 1. Это расстояние очень мало и составляет около $5 \cdot 10^{-5}$ длины радиуса; на фиг. 81 оно показано в сильно преувеличенном виде.



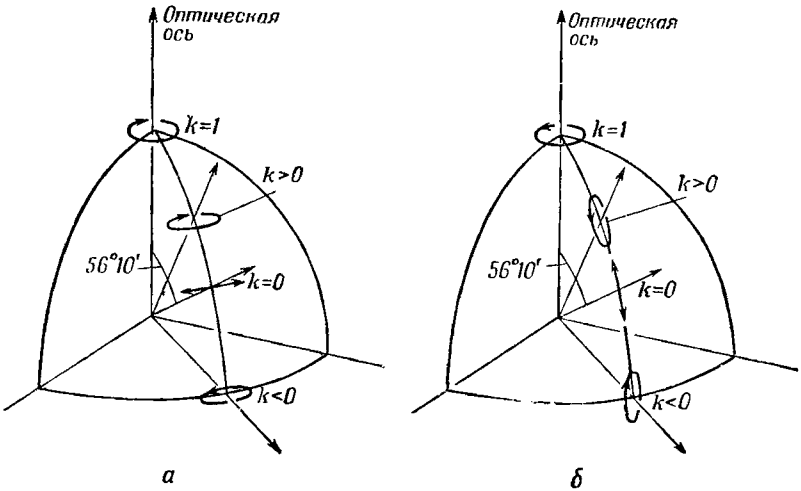
Фиг. 81. Волновые поверхности α-кварца (не в масштабе) и их искажение за счет вращения плоскости поляризации.

Относительная разность между радиусами двух неискаженных поверхностей (сплошные кривые), направленных под прямым углом к оптической оси, равна $6 \cdot 10^{-3}$. Радиальное искажение каждой поверхности за счет вращения плоскости поляризации (выраженное в долях средней длины радиусов) равно $\pm 2{,}4 \cdot 10^{-5}$ в направлении оптической оси, но во всех направлениях, не очень близких к оптической оси, имеет значительно меньшую величину. В направлении, составляющем прямой угол с оптической осью, радиальное искажение равно $\pm 2{,}7 \cdot 10^{-8}$.

ON_1 и ON_2 — направления волновых нормалей, для которых $k = 0$. В точках P_1P_2, Q_1Q_2 неискаженная и искаженная поверхности касаются друг друга; эти точки определяют направления лучей, для которых искажение волновых поверхностей отсутствует. Точки P_1 и P_2 лежат в местах пересечения волновой поверхности для обыкновенной волны с ON_1 и ON_2; плоскости, касательные к волновой поверхности для необыкновенной волны в точках Q_1 и Q_2, перпендикулярны ON_1 и ON_2.

Пока мы не рассматривали вращения плоскости поляризации, мы могли считать, что две волновые поверхности одноосного кристалла описывают распространение из точечного источника двух отдельных *плоско-поляризованных* волн, плоскости поляризации которых составляют прямой угол. Теперь, после видоизменения волновых поверхностей с учетом вращения плоскости поляризации, мы получаем, что вдоль оптической оси распространяются две не плоско-, а циркулярно-поляризованные волны. Для произвольного направления в кристалле будет иметь место следующая картина. Как и прежде, с любой заданной волновой нормалью связаны *две* определенные волны, проходящие через кристалл без изменения своей формы.

Но теперь *эти две волны в общем случае оказываются эллиптически-поляризованными*. Два эллипса, которые определяют поляризацию этих двух волн, имеют одинаковую форму, но соответствуют противоположным направлениям вращения. Их большие оси составляют прямой угол друг с другом и совпадают с главными направлениями колебаний, которые существовали бы для данной волновой нормали,



Фиг. 82. Изменение эллиптичности k в зависимости от направления волновой нормали в правом кварце для обыкновенной (*а*) и необыкновенной (*б*) волн.

Волновые нормали обозначены радиальными стрелками. Эллипсы, описываемые концом электрического вектора, спроектированы на поверхность сферы. Для двух направлений, для которых k не равно нулю или единице, эллиптичность сильно преувеличена.

если бы кристалл не был оптически активным. При распространении в направлении оптической оси эти волны, как мы уже видели, оказываются циркулярно-поляризованными. В остальных случаях эллиптичность k (отношение малой оси эллипса к большой) меняется с направлением.

В α-кварце k в соответствии с симметрией зависит только от угла между волновой нормалью и оптической осью. Изменение эллиптичности для этого кристалла схематически показано на фиг. 82. Вдоль оптической оси $k=1$, но при отклонении от нее быстро падает до малой величины, а в направлении, составляющем угол 56°10′ с оптической осью, становится равным нулю (Живесси и Мюнстер [89]; см. также [21, 69]). Когда волновая нормаль перпендикулярна оптической оси, эллиптичность k снова становится конечной, хотя и малой; при этом знак вращения плоскости поляризации для обоих эллипсов изменяется на обратный ($k=-0{,}00203$).

Для оптически активных двуосных кристаллов наблюдается аналогичная картина. Можно считать, что вращение плоскости поляризации вызывает небольшое искажение формы волновой поверхности. Так же как в случае одноосных кристаллов, каждой волновой нормали соответствуют две определенные эллиптически-поляризованные волны, связанные друг с другом описанным выше способом. Вдоль оптических осей распространяются две циркулярно-поляризованные волны.

Чтобы сделать описание явления вращения плоскости поляризации более полным, мы должны теперь рассмотреть зависимость степени искажения волновой поверхности от направления. Одновременно мы должны найти зависимость эллиптичности двух неизменяющихся волн от направления. При этом следует иметь в виду, что направление распространения волны (т. е. направление луча) не совпадает с направлением волновой нормали. Расстояние между двумя изображенными на фиг. 81 волновыми поверхностями в направлении любого радиуса характеризует разность скоростей двух волн, распространяющихся в одном направлении. Для наших целей удобнее определить показатели преломления двух волн с общей волновой нормалью. Возможные значения показателя преломления n для заданного направления волновой нормали являются положительными корнями уравнения

$$(n^2 - n'^2)(n^2 - n''^2) = G^2. \tag{14.3}$$

Здесь n' и n'' — два показателя преломления, которые кристалл имел бы в случае отсутствия у него оптической активности; G — параметр, малый по сравнению с единицей и изменяющийся с направлением; он характеризует величину вращения плоскости поляризации (или *гирацию*).

Вдоль оптической оси, как мы знаем, $n' = n'' = \bar{n}$. Для этого случая уравнение (14.3) упрощается

$$n^2 - \bar{n}^2 = \pm G;$$

так как значение G мало, то

$$n = \bar{n} \pm \frac{G}{2\bar{n}}. \tag{14.4}$$

Разность между двумя показателями преломления равна $G/\bar{n}$, поэтому, согласно формуле (14.2), удельное вращение выражается в виде

$$\rho = \frac{\pi G}{\lambda_0 \bar{n}}. \tag{14.5}$$

Мы не даем здесь доказательства уравнения (14.3). Это уравнение получено чисто теоретически и экспериментально еще не достаточно проверено. Вывод этого уравнения основан на рассмотрении поведения соответствующей атомной модели кристалла в электро-

магнитном поле световой волны. Подробности читатель может найти в статьях Живесси [88][1]) и Кондона [28], а также в книге Борна [19]; необходимо, однако, иметь в виду, что этот вывод содержит ряд неясностей, которые привели к ошибкам в ряде опубликованных работ. Можно рекомендовать также обзорную статью Хоека [53].

Как мы уже сказали, G изменяется с изменением направления волновой нормали. В упомянутой теории G представляет квадратичную функцию направляющих косинусов l_1, l_2, l_3 волновой нормали по отношению к некоторой произвольной системе координат; таким образом, мы можем записать

$$G = g_{11}l_1^2 + g_{22}l_2^2 + g_{33}l_3^2 + 2g_{23}l_2l_3 + 2g_{31}l_3l_1 + 2g_{12}l_1l_2, \quad (14.6)$$

или

$$G = g_{ij}l_il_j \qquad (g_{ij} = g_{ji}), \quad (14.7)$$

где g_{ij} — коэффициенты, описывающие оптическую активность кристалла. Коэффициенты g_{ij} образуют тензор, называемый *гирационным тензором*; он будет рассмотрен ниже.

§ 3. Принцип суперпозиции

Рассмотрим теперь, что происходит, когда на плоско-параллельную пластинку оптически активного кристалла нормально к ней падает плоско-поляризованная волна. Эта волна расщепляется на две эллиптически-поляризованные компоненты, для которых нормаль к пластинке является волновой нормалью. Если n_1 и n_2 — показатели преломления для этих двух волн, то разность фаз между ними, возникающая после прохождения единичного расстояния в кристалле, выражается формулой

$$\Delta = \frac{2\pi}{\lambda_0}(n_1 - n_2).$$

Показатели преломления n_1 и n_2 находятся из уравнения (14.3). Это уравнение является квадратным относительно n^2 и имеет корни n_1^2 и n_2^2. Мы можем записать равенство

$$(n_1 - n_2)^2 = n_1^2 + n_2^2 - 2\sqrt{n_1^2 n_2^2}.$$

Теперь, используя выражения для суммы и произведения корней уравнения (14.3), получаем

$$(n_1 - n_2)^2 = n'^2 + n''^2 - 2\sqrt{n'^2 n''^2 - G^2}.$$

---

[1]) Живесси [88] считал ρ *положительным* для *левовращающего* кристалла (в правой системе координат) в противоположность обычному определению, которого придерживаемся и мы. Далее мы принимаем, что знаки G и ρ одинаковы.

Так как $G \ll n'n''$, то с достаточным приближением имеем

$$\Delta^2 = \frac{4\pi^2}{\lambda_0^2}\left[(n'-n'')^2 + \frac{G^2}{n'n''}\right]. \qquad (14.7a)$$

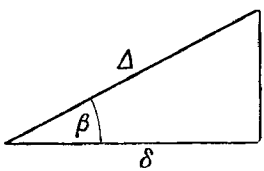
Вводя средний показатель преломления $\bar{n} = \sqrt{n'n''}$, уравнение (14.7а), можно переписать в виде

$$\Delta^2 = \delta^2 + (2\rho)^2, \qquad (14.8)$$

где

$$\delta = \frac{2\pi(n'-n'')}{\lambda_0}, \quad \rho = \frac{\pi G}{\lambda_0 \bar{n}}. \qquad (14.9)$$

Уравнение (14.8) выражает зависимость Δ (разности фаз двух эллиптически-поляризованных компонент, сопряженных с рассматриваемой волновой нормалью) от δ (разности фаз в отсутствие вращения плоскости поляризации) и 2ρ (разности фаз, определяемой удельным вращением ρ, которая наблюдалась бы в отсутствие двойного лучепреломления). Сразу же видно, что вращение плоскости поляризации всегда увеличивает и никогда не уменьшает двойное лучепреломление. (В качестве примера можно указать на фиг. 81, на которой видно, что за счет вращения плоскости поляризации волновые поверхности расходятся). Чтобы пояснить уравнение (14.8), рассмотрим прямоугольный треугольник, приведенный на фиг. 83. Угол β в этом треугольнике связан с эллиптичностью (см. стр. 313) соотношением



Фиг. 83. Иллюстрация принципа суперпозиции для вращения плоскости поляризации и обычного двойного лучепреломления.

$$k = \operatorname{tg}\left(\frac{1}{2}\beta\right). \qquad (14.10)$$

Это соотношение доказывается в общей теории, которую мы здесь не излагаем. Из рассмотрения треугольника ясно, что

$$\operatorname{tg}\beta = \frac{2\rho}{\delta}, \qquad (14.11)$$

следовательно, учитывая (14.9), получаем

$$\operatorname{tg}\beta = \frac{G}{\bar{n}(n'-n'')}. \qquad (14.12)$$

Таким образом, формулы (14.10) и (14.12) полностью определяют эллиптичность k для любой волновой нормали через значения n', n'' и G для этой нормали.

Мы уже видели, что искажение волновых поверхностей, обусловленное оптической активностью, определяется величинами n', n'' и G

[см. (14.3)]. Таким образом, наше рассмотрение явления вращения плоскости поляризации формально является полным.

Уравнение (14.8) позволяет сформулировать важный *принцип суперпозиции* для вращения плоскости поляризации и обычного двойного лучепреломления. Мы только приведем его, предоставляя доказательство читателю. Любая волна, падающая нормально на кристаллическую пластинку, разлагается на две эллиптически-поляризованные компоненты. Отношение малой оси эллипса к большой обозначают через k. Проходя через пластинку, эти компоненты приобретают некоторую разность фаз (обозначаемую для единицы толщины пластинки через Δ) и по выходе из кристалла вновь объединяются в волну, поляризация которой, конечно, отлична от поляризации падающей волны. Можно доказать, что при прохождении света через оптически активный двоякопреломляющий кристалл состояние поляризации вышедшей волны будет таким же, какое наблюдалось бы в том случае, если бы сначала имело место только двойное лучепреломление, а затем — только поворот плоскости поляризации. Соотношение этих двух эффектов определяется треугольником, изображенным на фиг. 83. Более точно это можно сформулировать следующим образом. Волна ведет себя так, как если бы она проходила через стопу тонких пластинок, часть из которых является только двоякопреломляющими, а часть — только оптически активными. Для единичного пути полная величина чистого двойного лучепреломления эквивалентна разности фаз δ, а полная величина вращения плоскости поляризации — вращению ρ. Легко видеть, что δ и ρ связаны с Δ и k соотношениями

$$2\rho = \Delta \sin\beta, \quad \delta = \Delta\cos\beta, \quad \text{где} \quad \operatorname{tg}\left(\frac{1}{2}\beta\right) = k.$$

§ 4. Величина эффекта

Мы уже видели, что в случае прохождения света вдоль оптической оси разность показателей преломления двух циркулярно-поляризованных компонент может быть порядка 10^{-4}. Таким образом, в соответствии с формулой (14.4) $G/\bar{n}$ будет также величиной порядка 10^{-4}. Предполагая, что $G/\bar{n}$ имеет для других направлений тот же порядок величины, из формулы (14.12) получаем, что $\operatorname{tg}\beta$ должен быть очень мал, если обычное двупреломление ($n' - n''$) не очень мало, т. е. если мы не берем направление, очень близкое к оптической оси. Например, двойное лучепреломление в направлении, составляющем большой угол с оптической осью, может быть равно 10^{-2}. Тогда $\operatorname{tg}\beta = 10^{-4}/10^{-2} = 10^{-2}$. Отсюда $k = \operatorname{tg}(1/2\,\beta) = 1/200$. Следовательно, эллиптичность двух неизменяющихся волн будет очень быстро уменьшаться от значения, равного единице (в направлении оптической оси). По этой причине трудно измерить вращение

плоскости поляризации в любом направлении, сколько-нибудь значительно отклоняющемся от оптической оси: две неизменяющиеся волны будут очень мало отличаться от плоско-поляризованных волн.

Далее, из уравнения (14.7а) можно видеть, что для направлений, далеких от оптической оси, дополнительное двойное лучепреломление, обусловленное вращением плоскости поляризации, имеет величину порядка $G^2/[\bar{n}^2(n'-n'')]$. Для приведенных выше данных получаем $10^{-8}/10^{-2}=10^{-6}$. Таким образом, эффект вращения плоскости поляризации при отклонении направления наблюдения от оптической оси не только перекрывается обычным двойным лучепреломлением, но и значительно уменьшается по абсолютной величине (от 10^{-4} до 10^{-6} для рассматриваемого примера). В подписи к фиг. 81 приведены численные значения для α-кварца; они могут служить добавочной иллюстрацией этого положения.

§ 5. Тензорные свойства $[g_{ij}]$

Обсудим теперь вопрос о влиянии кристаллографической симметрии на форму гирационного тензора $[g_{ij}]$, введенного уравнением (14.6). Для этого выясним сначала тензорные свойства $[g_{ij}]$, т. е. найдем, как преобразуются коэффициенты g_{ij} при изменении осей координат. Этот вопрос в свою очередь связан со свойствами G и ρ.

Начнем с рассмотрения оптической активности кубических кристаллов, у которых удельное вращение одинаково во всех направлениях. Удельное вращение может быть правым или левым, поэтому необходимо установить правило знаков, сохраняющее силу для правой и для левой систем координат. В § 1 настоящей главы мы уже ввели правило, согласно которому правое вращение считается положительным в правой системе координат. Следующее определение является общим для правой и для левой систем координат. Если направление вращения плоскости поляризации и направление вращения от оси x_1 к оси x_2 вокруг оси x_3 одинаковы, т. е. если и вращение, и система координат являются правыми или левыми, то удельное вращение ρ по определению считается положительным; в противном случае ρ считают отрицательным. Таким образом, приписывание вращению того или иного знака зависит от выбора системы координат. Отсюда следует, что при переходе от правой системы координат к левой (и наоборот) знак удельного вращения должен изменяться. Физическая величина, которая ведет себя таким образом, называется *псевдоскаляром*. Закон преобразования псевдоскаляра можно записать в виде

$$\rho' = \pm \rho,$$

где знак плюс относится к преобразованиям, которые оставляют правую систему правой (и левую — левой), а знак минус относится к преобразованиям, которые правую систему превращают в левую (и наоборот).

Переходя теперь к анизотропным кристаллам, мы видим, что величина G, введенная уравнением (14.3), является псевдоскаляром, так как ее значение для волны, проходящей вдоль оптической оси, пропорционально удельному вращению ρ для этого направления.

Теперь рассмотрим преобразование уравнения

$$G = g_{ij} l_i l_j. \tag{14.7}$$

Мы знаем, что l_i и l_j при переходе от осей x_i к новым осям x'_i преобразуются как (полярные) векторы, а именно:

$$l_i = a_{ki} l'_k, \quad l_j = a_{mj} l'_m,$$

и что G преобразуется как псевдоскаляр, т. е.

$$G = \pm G',$$

причем знак зависит от того, переходит правая система в левую (или наоборот) или нет. Следовательно,

$$\pm G' = g_{ij} a_{ki} l'_k a_{mj} l'_m,$$

или

$$G' = g'_{km} l'_k l'_m,$$

где

$$g'_{km} = \pm a_{ki} a_{mj} g_{ij}. \tag{14.13}$$

Таким образом, если мы хотим, чтобы уравнение (14.7) сохраняло свою форму при любом выборе системы координат, коэффициенты g_{ij} должны преобразовываться согласно закону (14.13). Легко

ТАБЛИЦА 18

Законы преобразования полярных и аксиальных тензоров

Величина	Закон преобразования	Пример
Скаляр	$\varphi' = \varphi$	Температура
Псевдоскаляр	$\varphi' = \pm \varphi$	Удельное вращение
Полярный вектор	$p'_i = a_{ij} p_j$	Градиент температуры
Аксиальный вектор	$r'_i = \pm a_{ij} r_j$	Векторное произведение любых двух полярных векторов
Полярный тензор второго ранга	$T'_{ij} = a_{ik} a_{jl} T_{kl}$	Тензор диэлектрической проницаемости
Аксиальный тензор второго ранга	$R'_{ij} = \pm a_{ik} a_{jl} T_{kl}$	Гирационный тензор

видеть, что уравнение (14.13) идентично закону преобразования тензора второго ранга, за исключением знаков $\pm$. Физические величины, которые преобразуются согласно уравнению (14.13), называются *аксиальными тензорами второго ранга*. Обычные тензоры второго ранга, с которыми мы встречались до сих пор, можно называть *полярными тензорами второго ранга*, когда необходимо подчеркнуть различие. Различие между полярными и аксиальными тензорами второго ранга аналогично различию между полярными и аксиальными векторами (см. стр. 58). В табл. 18 дана сводка законов преобразования полярных и аксиальных тензоров нулевого, первого и второго рангов.

§ 6. Влияние симметрии кристалла на g_{ij}

Используем теперь результаты, полученные в предыдущем параграфе, для рассмотрения влияния симметрии кристалла на компоненты $[g_{ij}]$. Принципиально метод рассмотрения состоит в следующем. Преобразуем $[g_{ij}]$ одним из элементов симметрии кристалла, не забывая поставить знак минус, если при преобразовании система координат переходит из правой в левую (или наоборот). При этом новые компоненты должны быть идентичны старым. Обычно удобнее всего производить преобразование, пользуясь методом прямой проверки (см. стр. 146). Рассмотрим, например, кристалл, обладающий центром симметрии. Преобразование осей координат под действием центра симметрии можно записать в виде

$$1 \to -1, \quad 2 \to -2, \quad 3 \to -3;$$

таким образом, правая система переходит в левую (или наоборот). Поэтому

$$g'_{ij} = -g_{ij}.$$

Но $g'_{ij} = g_{ij}$, поэтому $g_{ij} = 0$. Следовательно, *центросимметричный кристалл не может вращать плоскость поляризации.*

В качестве другого примера рассмотрим кристалл класса m. Если ось x_2 направить перпендикулярно m, то преобразование осей координат записывается в виде

$$1 \to 1, \quad 2 \to -2, \quad 3 \to 3;$$

здесь опять правая система координат переходит в левую (или наоборот). Следовательно, компоненты преобразуются следующим образом:

$$g_{11} \to -g_{11}, \quad g_{12} \to g_{12}, \quad g_{31} \to -g_{31},$$
$$g_{22} \to -g_{22}, \quad g_{23} \to g_{23},$$
$$g_{33} \to -g_{33},$$

и тензор $[g_{ij}]$ принимает форму

$$\begin{bmatrix} 0 & g_{12} & 0 \\ g_{12} & 0 & g_{23} \\ 0 & g_{23} & 0 \end{bmatrix}. \qquad (14.14)$$

Поступая подобным образом со всеми нецентросимметричными классами, мы получаем таблицы отличных от нуля компонент $[g_{ij}]$, приведенные в табл. 19. При этом оси координат выбираются в соответствии с правилами, приведенными в приложении 2. Так как все таблицы симметричны относительно главной диагонали, левые части таблиц опущены. Число независимых компонент указано в скобках около каждой таблицы.

При рассмотрении таблиц, приведенных в табл. 19, следует обратить внимание на некоторые интересные детали. Кристаллы классов m, $mm2$, $\bar{4}$ и $\bar{4}2m$ теоретически могут обнаруживать оптическую активность, хотя эти классы и не энантиоморфны[1]). Кристаллы классов $\bar{4}$ и $\bar{4}2m$ одноосны; можно показать, что вращение плоскости поляризации вдоль оптической оси у этих кристаллов должно отсутствовать. К тому же заключению мы приходим, замечая, что для обоих этих классов $g_{33}=0$. Следовательно, оптическая активность у кристаллов классов $\bar{4}$ и $\bar{4}2m$ возможна только в направлениях, вдоль которых имеется также и двойное лучепреломление; поэтому обнаружение такого эффекта должно быть связано с определенными экспериментальными трудностями. До сих пор в литературе не было сообщений об обнаружении оптической активности у кристаллов этих классов. В противоположность кристаллам классов $\bar{4}$ и $\bar{4}2m$ кристаллы, принадлежащие к классу m, являются двуосными. Здесь имеются две возможности: 1) плоскость симметрии содержит обе оптические оси или 2) плоскость симметрии делит пополам угол между ними. В первом случае вращение плоскости поляризации вдоль оптических осей невозможно в силу условий симметрии; в других направлениях оптическая активность возможна. Во втором случае симметрия такова, что вдоль оптических осей может происходить вращение плоскости поляризации; причем оно должно быть одинаково по величине и противоположно по знаку. Известен один пример кристалла первого типа; кристаллов второго типа не найдено [88].[2])

В кристаллах класса 2 также возможны два случая: ось второго порядка может лежать или не лежать в плоскости оптических осей. В первом случае вращение плоскости поляризации вдоль обеих осей должно быть одинаково, во втором — вращение плоскости поляриза-

[1]) Класс называется *энантиоморфным*, если кристаллы, принадлежащие к нему, могут существовать в двух различных формах, зеркально-симметричных одна относительно другой.

[2]) Пример кристаллов 2-го типа — $LiH_3(SeO_3)_2$ [125]. — *Прим. перев.*

ТАБЛИЦА 19

Вид гирационного тензора $[g_{ij}]$

Обозначения

- компонента, равная нулю,
- компонента, отличная от нуля,
- равные компоненты,
- компоненты, равные по величине, но противоположные по знаку.

Все тензоры симметричны относительно главной диагонали.

Триклинная система

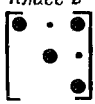
Класс 1

(6)

Моноклинная система

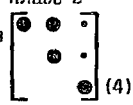
Класс 2

$2 \parallel x_2$ *(обычная ориентация)*


(4)

Класс 2

$2 \parallel x_3$


(4)

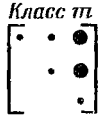
Класс m

$m \perp x_2$ *(обычная ориентация)*

(2)

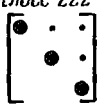
Класс m

$m \perp x_3$


(2)

Орторомбическая система

Класс 222


(3)

Класс mm2

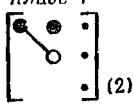
(1)

Тетрагональная система

Классы 4, 422

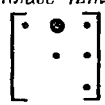
(2)

Класс $\bar{4}$


(2)

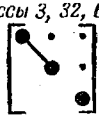
Класс $\bar{4}2m$

$2 \parallel x_1$


(1)

Тригональная и гексагональная системы

Классы 3, 32, 6, 622


(2)

Кубическая система

Классы 432, 23

(1)

Изотропная среда без центра симметрии

(1)

В следующих нецентросимметричных классах все компоненты $[g_{ij}]$ равны нулю: $4mm$, $\bar{4}3m$, $3m$, $6mm$, 6, $6m2$.

ции вдоль каждой из оптических осей может быть различным. Обнаружены кристаллы обоих типов [96].

У кристаллов класса 222 одна из осей второго порядка всегда лежит в плоскости оптических осей; поэтому вращение плоскости поляризации вдоль оптических осей одинаково. Найдено несколько примеров таких кристаллов [96].

Для α-кварца (класс 32) — единственного полностью исследованного оптически активного и двоякопреломляющего кристалла, изложенная теория вполне подтверждается. В результате измерений g_{ij} для $\lambda_0 = 5100$Å (Живесси и Мюнстер [89]) были получены следующие значения [1]):

$$g_{11} = g_{22} = \mp 5{,}82 \cdot 10^{-5}, \quad g_{33} = \pm 12{,}96 \cdot 10^{-5}.$$

Для правой системы координат верхний знак относится к правому кварцу, а нижний — к левому.

РЕЗЮМЕ

Вращение плоскости поляризации в изотропной среде и кубических кристаллах, а также в остальных кристаллах при распространении света вдоль оптической оси. В этих случаях имеются две волны, проходящие через среду без изменения состояния поляризации. Эти волны циркулярно поляризованы в противоположных направлениях. Они распространяются с разными скоростями, соответствующими показателям преломления n_r и n_l. Падающая плоско-поляризованная волна расщепляется на две циркулярно-поляризованные компоненты и выходит из среды в виде плоско-поляризованной волны, плоскость поляризации которой повернута на угол φ. Разность фаз двух циркулярно-поляризованных компонент равна 2φ. Удельное вращение определяется формулой

$$\rho = \frac{\varphi}{d} = \frac{\pi}{\lambda_0}(n_l - n_r), \tag{14.2}$$

где d — длина пути волны в среде и λ_0 — длина волны *в вакууме*. Вращение *по часовой стрелке* с точки зрения наблюдателя, смотрящего навстречу лучу, принимается за *правое* вращение. Знак ρ зависит от того, берем ли мы правую или левую систему координат. Если как вращение, так и система координат являются правыми или левыми, то ρ имеет положительный знак; если вращение правое (левое), а система координат левая (правая), то ρ имеет отрицательный знак.

Вращение плоскости поляризации в одноосных и двуосных кристаллах в направлениях, наклонных к оптической оси. В кристалле, обладающем как оптической активностью, так и двойным

[1]) Мы изменили знаки, потому что названные авторы считают положительным левовращающий кристалл в отличие от нашего выбора (ср. примечание на стр. 315).

лучепреломлением, для произвольной волновой нормали имеются две волны, которые проходят через кристалл без изменения состояния поляризации. Эти волны в общем случае эллиптически поляризованы, причем форма эллипсов, определяющих состояние поляризации, для них одинакова, но направления вращения противоположны. Большие оси эллипсов взаимно перпендикулярны и совпадают с главными направлениями колебаний, которые существовали бы для данной волновой нормали, если бы кристалл не был оптически активным. Показатели преломления для этих волн являются положительными корнями уравнения

$$(n^2 - n'^2)(n^2 - n''^2) = G^2, \tag{14.3}$$

где n', n'' — показатели преломления в отсутствие оптической активности, G — *гирация*, величина, которая определяет оптическую активность в данном направлении. Гирация G является функцией направления; она записывается в виде

$$G = g_{ij} l_i l_j \qquad (g_{ij} = g_{ji}), \tag{14.7}$$

где g_{ij} — компоненты *гирационного тензора*.

При прохождении света через плоско-параллельную пластинку единичной толщины выполняются уравнения

$$\Delta^2 = \delta^2 + (2\rho)^2, \tag{14.8}$$

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda_0}(n' - n''), \quad \rho = \frac{\pi G}{\lambda_0 \bar{n}}, \quad \bar{n} = \sqrt{n' n''}.$$

Эти уравнения выражают Δ (разность фаз между двумя эллиптически-поляризованными компонентами) через δ (разность фаз в отсутствие оптической активности) и 2ρ (разность фаз, которая задавалась бы удельным вращением ρ в отсутствие обычного двойного лучепреломления).

Эллиптичность k, т. е. отношение малой оси к большой для эллипсов, определяющих состояние поляризации тех двух волн с данной волновой нормалью, которые не изменяют своей поляризации, выражается формулой

$$k = \operatorname{tg} \frac{1}{2}\beta, \tag{14.10}$$

где

$$\operatorname{tg} \beta = \frac{G}{\bar{n}(n' - n'')}. \tag{14.12}$$

Уравнение (14.8) позволяет сформулировать *принцип суперпозиции* для вращения плоскости поляризации и двойного лучепреломления, изложенный на стр. 317.

Величины ρ и G являются *псевдоскалярами*; они преобразуются по закону

$$\rho' = \pm \rho, \quad G' = \pm G;$$

знак зависит от того, переходит ли правая (левая) система координат в левую (правую) или нет. Тензор $[g_{ij}]$ есть *аксиальный тензор второго ранга*, преобразующийся по следующему закону (см. табл. 18):

$$g'_{ij} = \pm a_{ik} a_{jl} g_{kl}.$$

Оптическая активность не может существовать у центросимметричных кристаллов. Она может быть обнаружена у кристаллов, принадлежащих к 15 из 21 нецентросимметричного класса.

ЗАДАЧИ

1. Какие ограничения на вращение плоскости поляризации вдоль оптической оси налагает симметрия в случае класса $mm2$?

2. Как расположены главные оси $[g_{ij}]$ относительно плоскости симметрии в кристалле класса m? Какова форма тензора $[g_{ij}]$, приведенного к главным осям?

3. Проверить численные данные, приведенные в подписи к фиг. 81, используя другие численные значения для α-кварца, указанные в настоящей главе.

ПРИЛОЖЕНИЯ

1. СВОДКА ВЕКТОРНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ И ФОРМУЛ

В настоящей книге векторы набраны курсивным полужирным шрифтом, например $\boldsymbol{p}$. Компоненты $\boldsymbol{p}$ в системе координат Ox_1, Ox_2, Ox_3 обозначаются через p_1, p_2, p_3. Мы записываем

$$\boldsymbol{p} = [p_1,\ p_2,\ p_3];$$

часто вектор $\boldsymbol{p}$ обозначается через p_l или $[p_l]$.

Абсолютная величина, или *длина*, вектора $\boldsymbol{p}$ обозначается через p:

$$p^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 = p_i p_i.$$

Единичный вектор — это вектор единичной длины.

Скалярное произведение векторов $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$ обозначается через $\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q}$ и определяется формулой

$$\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q} = p_i q_i = pq \cos \theta,$$

где θ — угол между $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$.

Векторное произведение $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$ обозначается через $\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{q}$ и определяется формулой

$$\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{q} = (pq \sin \theta)\, \boldsymbol{l},$$

где $\boldsymbol{l}$ — единичный вектор, перпендикулярный $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{q}$ так, что $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{q}$ и $\boldsymbol{l}$ образуют правую систему. Компоненты $\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{q}$ в правой системе координат записываются следующим образом:

$$[p_2 q_3 - p_3 q_2,\ p_3 q_1 - p_1 q_3,\ p_1 q_2 - p_2 q_1].$$

Градиент скаляра φ, являющегося функцией координат точки, есть вектор, обозначаемый через $\operatorname{grad} \varphi$, и определяется формулой

$$\operatorname{grad} \varphi = \left[\frac{\partial \varphi}{\partial x_1},\ \frac{\partial \varphi}{\partial x_2},\ \frac{\partial \varphi}{\partial x_3}\right].$$

Дивергенция вектора $\boldsymbol{p}$, являющегося функцией координат точки, есть скаляр, обозначаемый через $\operatorname{div} \boldsymbol{p}$, и определяется формулой

$$\operatorname{div} \boldsymbol{p} = \frac{\partial p_1}{\partial x_1} + \frac{\partial p_2}{\partial x_2} + \frac{\partial p_3}{\partial x_3} = \frac{\partial p_l}{\partial x_l}.$$

Ротор вектора $\boldsymbol{p}$, являющегося функцией координат точки, есть вектор, обозначаемый через $\operatorname{rot} \boldsymbol{p}$. Компоненты его в правой системе координат записываются в виде

$$\left[\frac{\partial p_3}{\partial x_2} - \frac{\partial p_2}{\partial x_3},\ \frac{\partial p_1}{\partial x_3} - \frac{\partial p_3}{\partial x_1},\ \frac{\partial p_2}{\partial x_1} - \frac{\partial p_1}{\partial x_2}\right].$$

2. СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ И ПРАВИЛА ВЫБОРА ОСЕЙ КООРДИНАТ

В данном приложении кратко разбираются различные понятия и символы, употребляемые в учении о симметрии кристаллов, и описываются правила выбора осей координат, используемые в настоящей книге. В обозначениях и терминологии мы придерживаемся Интернациональных таблиц [55].

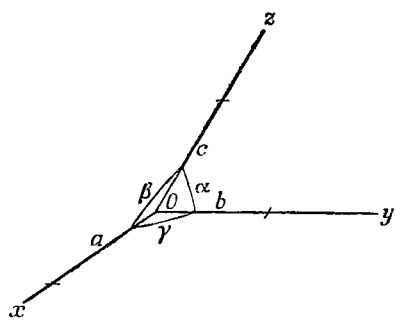
В настоящей книге в основном используется макроскопический подход к вопросу о кристаллографической симметрии, однако здесь удобнее начать с рассмотрения микроскопической, атомной симметрии.

Решетка и элементарная ячейка. *Решетка* есть бесконечная трехмерная периодическая система одинаково расположенных точек; точки считаются одинаково расположенными, если по отношению к каждой из них решетка одинакова и имеет одну и ту же ориентацию. *Идеальным кристаллом* по определению называется тело, расположение атомов в котором образует решетку; это означает, что а) относительно любой точки решетки расположение атомов одинаково, б) расположение атомов относительно любой точки, не являющейся точкой решетки, отличается от расположения атомов относительно точек решетки. Если, наоборот, задан идеальный кристалл, то решетку можно построить, взяв произвольную точку в качестве начала координат и затем найдя все одинаково расположенные точки в смысле их атомного окружения. Форма и ориентация (но, конечно, не положение) найденной таким способом решетки не зависят от того, какая точка выбрана в качестве начала координат. Определенный таким образом идеальный кристалл является бесконечно протяженным; реальный кристалл не только ограничен, но и отличается от идеального различными случайными дефектами.

Можно считать, что решетка образована точками пересечения трех систем параллельных и равноотстоящих друг от друга плоскостей. Эти плоскости делят кристалл на идентичные элементарные параллелепипеды, называемые *примитивными элементарными ячейками*. Таким образом, примитивная элементарная ячейка есть параллелепипед, содержащий точки решетки только в своих вершинах. В данной решетке определение примитивной элементарной ячейки не является однозначным, ибо указанные системы плоскостей могут быть выбраны бесконечным числом способов, и каждому выбору соответствует своя примитивная элементарная ячейка. Часто бывает удобнее выбрать

бо́льшую элементарную ячейку, которая содержит точки решетки не только в вершинах, но и в центрах граней или в центре объема, а иногда и в других местах. Такие ячейки называются *многократно примитивными элементарными ячейками*. Как примитивная, так и многократно примитивная элементарные ячейки определяются длинами и направлениями трех непараллельных ребер, которые обозначаются векторами $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$.

Плоскости решетки, кристаллические грани и направления. Возьмем некоторую точку решетки в качестве начала координат и проведем оси Ox, Oy, Oz, параллельные соответственно $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$ (фиг. 84). Можно показать, что плоскость, которая отсекает на осях отрезки a/h, b/k, c/l, где h, k, l — целые числа, не имеющие общих множителей, проходит через точки решетки и является одной из плоскостей системы параллельных и равноотстоящих друг от друга плоскостей, проходящих через все точки решетки. Такая система *плоскостей решетки* обозначается символом (hkl). Числа h, k, l называются (*миллеровскими*) *индексами* этой системы плоскостей.



Фиг. 84. Определение осей Ox, Oy, Oz, ребер элементарной ячейки (параметров ячейки) a, b, c и осевых углов α, β, γ.

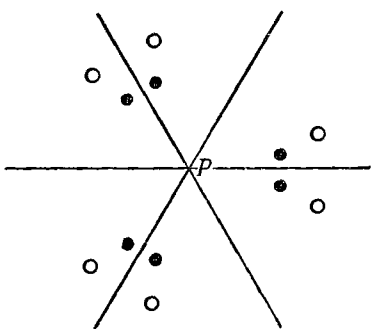
Если кристалл ограничен плоскими гранями, то эти грани параллельны плоскостям решетки. Поэтому символ (hkl) имеет и второй смысл, обозначая *грань*, параллельную плоскостям (hkl). Таких граней существует две, по одной с каждой стороны кристалла. Грань, расположенная по ту же сторону от начала координат, что и плоскость, отсекающая на осях отрезки a/h, b/k, c/l, обозначается через (hkl); противоположная грань обозначается через $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$; черточки над индексами соответствуют знаку минус. Согласно *закону рациональных индексов*, все плоскости, представляющие собой возможные грани кристалла, должны отсекать на осях такие отрезки, длины которых, будучи выражены через некоторые масштабные отрезки вдоль осей (пропорциональные a, b и c), относятся как рациональные числа (рациональным числом называется число, которое можно записать в виде p/q, где p и q — целые числа). Этот закон был первоначально сформулирован на основе наблюдений над гранями кристаллов, а в настоящее время является просто следствием решетчатой структуры кристаллов.

Вектор, проведенный из начала координат в любую точку решетки, находящуюся в вершине элементарной ячейки, может быть записан

в виде $Ua + Vb + Wc$, где U, V, W — целые числа. Определенное таким образом направление обозначается символом $[UVW]$. Так как для определения направления необходимо знать только отношение $U : V : W$, то обычно выбирают такие три целых числа, которые не имеют общих множителей. В кристаллах кубической системы (определяемой ниже) направление $[UVW]$ перпендикулярно плоскостям решетки (UVW), но для других кристаллов это обычно не справедливо. Во всех случаях направление $[UVW]$, будучи параллельным ряду точек решетки, параллельно также семейству или *зоне* граней; $[UVW]$ является направлением *оси зоны*. Согласно легко доказываемому *закону зон* (называемому также *законом Вейсса*), грань (hkl) входит в зону граней с осью $[UVW]$, если

$$hU + kV + lW = 0.$$

Элементы симметрии. Большинство кристаллов наряду с переносами (трансляциями), задаваемыми кристаллической решеткой, обладает определенной симметрией. Для описания симметрии лучше всего разложить ее на *элементы симметрии*. Для пояснения рассмотрим фиг. 85, на которой изображены две системы атомов, представленных черными и белыми кружками. Если эту систему атомов повернуть на 120° (или на $^1/_3$ полного оборота) вокруг оси, проходящей через точку P и перпендикулярной плоскости чертежа, то картина, очевидно, не изменится. Последующие повороты на 120° также не будут приводить к изменениям. Это свойство данной системы точек можно описать, сказав, что она обладает *поворотной осью третьего порядка*, или *поворотной тройной осью*, проходящей через точку P перпендикулярно плоскости чертежа. Три сплошные линии на фиг. 85 обозначают *зеркальные плоскости*, или *плоскости симметрии*, перпендикулярные плоскости чертежа. Части чертежа по обе стороны от плоскости симметрии связаны друг с другом как предмет и его зеркальное изображение. Ниже приводится перечень элементов симметрии, на которые можно разложить симметрию любой системы, и операции, связанные с каждым элементом.



Фиг. 85. Схема, поясняющая определение элементов симметрии.

1) Центр симметрии. Если поместить начало координат в центре симметрии, то действие центра симметрии переводит точку (x, y, z) в $(-x, -y, -z)$. Эта операция называется *инверсией*.

2) *Зеркальная плоскость.* Этой плоскости отвечает операция, которая переводит каждую точку в ее зеркальное изображение относительно этой плоскости.

3) *Плоскость скольжения.* Этой плоскости отвечает операция, которая переводит каждую точку в ее зеркальное изображение в этой плоскости и затем переносит его параллельно этой плоскости.

4) *Поворотная ось n-го порядка.* Такой оси отвечает операция поворота на угол $2\pi/n$ вокруг этой оси, где n — положительное целое число.

5) *Винтовая ось n-го порядка.* Такой оси отвечает операция поворота на угол $2\pi/n$ вокруг этой оси, сопровождаемого трансляцией вдоль этой оси.

6) *Инверсионная ось n-го порядка.* Такой оси отвечает операция поворота на угол $2\pi/n$ вокруг этой оси, сопровождаемого инверсией в заданной точке этой оси.

Не все названные операции симметрии независимы друг от друга. Так, инверсионная ось первого порядка совпадает с центром симметрии; инверсионная ось второго порядка эквивалентна плоскости симметрии, перпендикулярной этой оси; инверсионная ось третьего порядка эквивалентна поворотной оси третьего порядка плюс центр симметрии.

Вследствие решетчатого строения кристаллов у них могут существовать не все элементы симметрии из приведенного перечня. Можно доказать, что в кристаллах возможны поворотные и винтовые оси только первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков (исторически заключение о невозможности осей с $n = 5$ и $n > 6$ было выведено из закона рациональных индексов). Решетчатое строение кристаллов налагает также определенные ограничения на трансляции, связанные с винтовыми осями и плоскостями скольжения.

Пространственные группы. Закономерное расположение элементов симметрии в решетке называется *пространственной группой.* Операция, производимая любым элементом группы, должна оставлять неизменным расположение элементов симметрии. При последовательном рассмотрении всех возможностей оказывается, что имеется только 230 различных пространственных групп.

Точечные группы и кристаллографические классы. При изучении физических свойств кристаллов нас интересуют не относительные *положения* элементов симметрии, а только их *ориентация.* Возникает вопрос: какие возможны комбинации элементов симметрии, отличающиеся лишь их выбором и взаимной ориентацией, вне зависимости от относительного расположения этих элементов симметрии, а также от трансляций, связанных с плоскостями скольжения и винтовыми осями? Ответ на этот вопрос определяет виды симметрии, которыми обладают макроскопические физические свойства кристалла и его идеальная форма роста.

Возможны следующие макроскопические элементы симметрии кристаллов:

а) центр симметрии,

б) зеркальная плоскость,

в) поворотные оси первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков,

г) инверсионные оси первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядков.

В случае комбинации этих элементов мы можем считать, что все они проходят через одну точку; возможные комбинации макроскопических элементов симметрии называются *точечными группами* [1]).

Можно показать, проверяя все 230 пространственных групп, что имеются только 32 точечные группы. Кристаллы подразделяются на 32 *кристаллографических класса* соответственно точечным группам симметрии.

Перечисление 32 точечных групп и кристаллографических классов. Элементы симметрии 32 точечных групп показаны в табл. 21 (стр. 336 — 40) с помощью стереографических проекций. Здесь можно дать следующее определение стереографической проекции, широко используемой в кристаллографии: 1) предполагается, что особая точка точечной группы находится в центре изображающей сферы; 2) ориентации элементов симметрии определяются их пересечениями с поверхностью изображающей сферы; 3) каждая диаграмма, приведенная в табл. 21, представляет собой проекцию одной полусферы изображающей сферы на диаметральную плоскость. Эта проекция получена из точки, находящейся на сфере по другую сторону от диаметральной плоскости и наиболее удаленной от нее (такой проекцией была бы, например, проекция северной полусферы Земли из южного полюса на экваториальную плоскость). Символы, использованные для обозначения элементов симметрии на стереограмме (стереографической проекции), поясняются во втором столбце табл. 20.

В табл. 21 каждый класс задан помещенным над стереограммой символом, содержащим обозначения порождающих элементов симметрии (эти обозначения пояснены в третьем столбце табл. 20). Этот символ не обязательно включает все элементы симметрии данного класса, но из наличия элементов симметрии, включенных в символ, обязательно следует присутствие всех остальных элементов (по существу символ включает большее число элементов, чем строго необходимо для определения точечной группы). Так, например, символ $4/mmm$ означает, что имеются поворотная ось четвертого порядка, перпен-

[1]) Возможные элементы симметрии геометрических фигур совпадают с макроскопическими элементами симметрии кристаллов. Однако, поскольку геометрические фигуры не имеют решетчатого строения, для них значения n для поворотных и инверсионных осей не ограничены. Все элементы симметрии таких фигур обязательно проходят через одну точку.

ТАБЛИЦА 20

Символы элементов симметрии 32 точечных групп

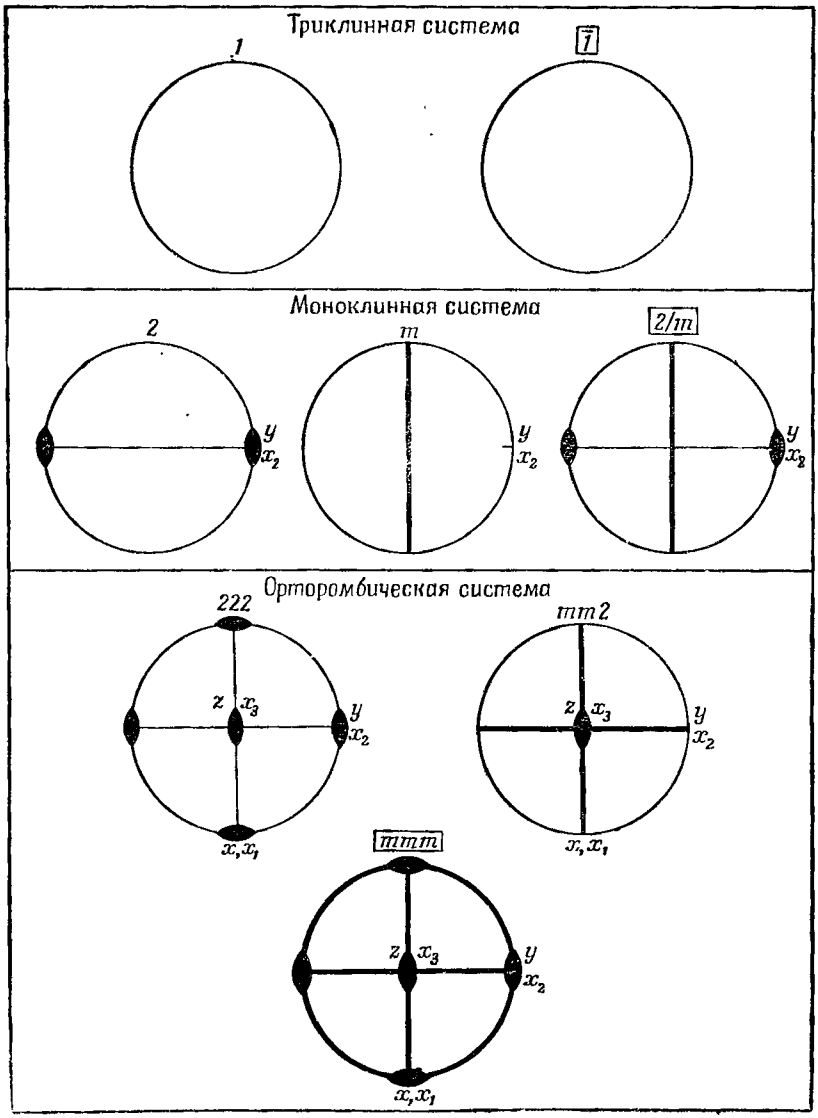
Элемент симметрии	Символ на стереограмме	Интернациональный символ
Центр симметрии	Символа нет	$\bar{1}$
Зеркальная плоскость	Сплошная прямая или окружность	m
Поворотные оси		
Ось первого порядка	Символа нет	1
Ось второго порядка		2
Ось третьего порядка		3
Ось четвертого порядка		4
Ось шестого порядка		6
Инверсионные оси		
Ось первого порядка ≡ центр симметрии	Символа нет	$\bar{1}$
Ось второго порядка ≡ зеркальная плоскость, перпендикулярная оси	Тот же, что для зеркальной плоскости	$\bar{2}\ (\equiv m)$
Ось третьего порядка ≡ поворотная ось третьего порядка плюс центр симметрии		$\bar{3}$
Ось четвертого порядка (включает поворотную ось второго порядка)		$\bar{4}$
Ось шестого порядка ≡ поворотная ось третьего порядка плюс перпендикулярная к ней плоскость		$\bar{6}\ (\equiv 3/m)$

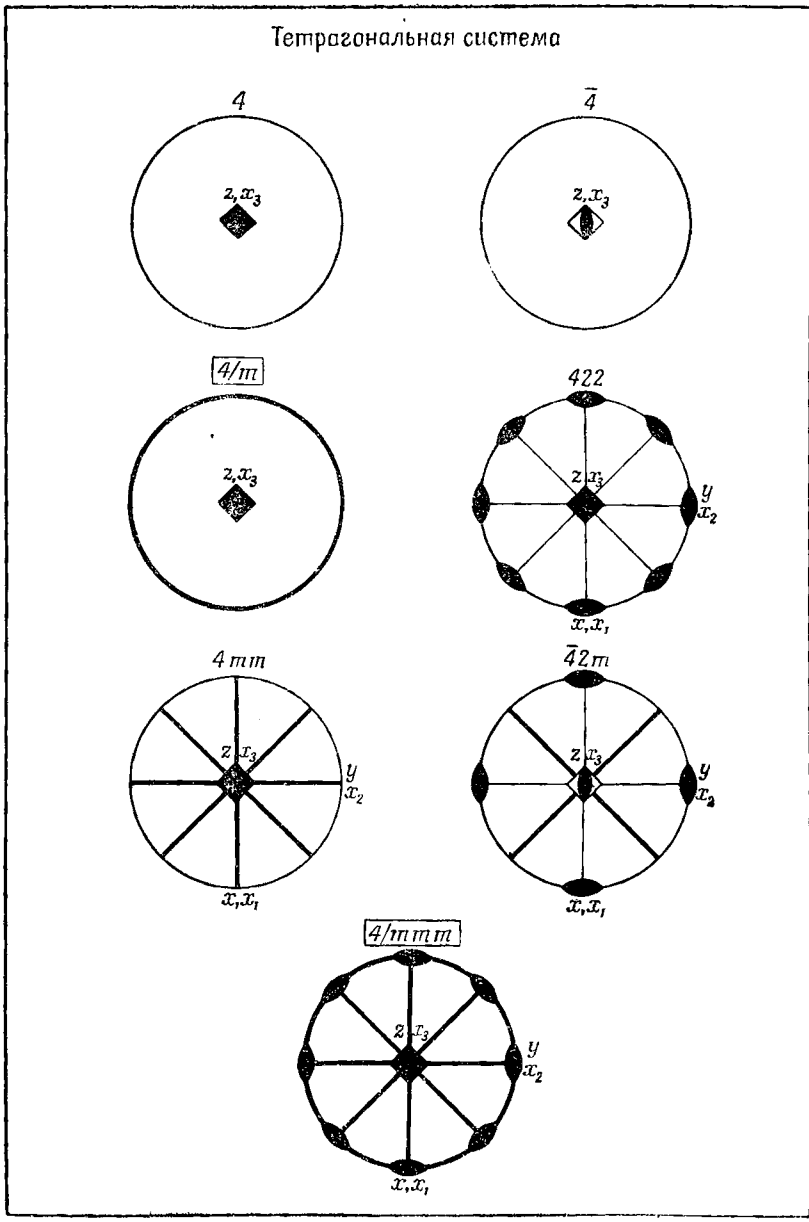
дикулярная зеркальной плоскости ($4/m$), далее, зеркальная плоскость, содержащая эту ось ($4/mm$), и, наконец, зеркальная плоскость, также содержащая эту ось и лежащая под углом 45° к последней плоскости ($4/mmm$). Обращаясь к табл. 21, мы видим, что у данной точечной группы имеются не только эти элементы симметрии; однако нетрудно показать, что из наличия этих элементов с необходимостью вытекает существование остальных зеркальных плоскостей и осей

ТАБЛИЦА 21

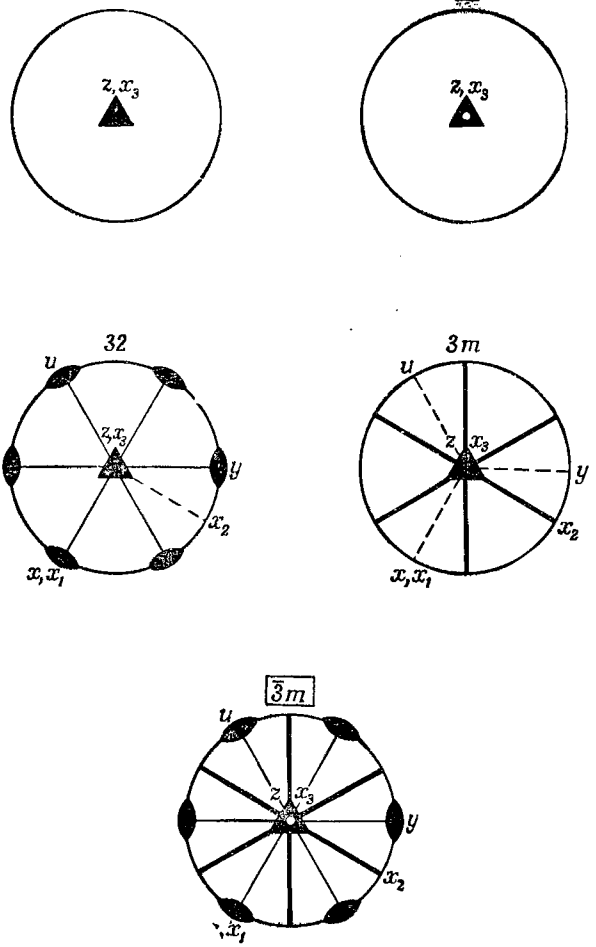
Элементы симметрии и правила выбора осей в 32 кристаллографических классах

Символы центросимметричных кристаллов заключены в рамку

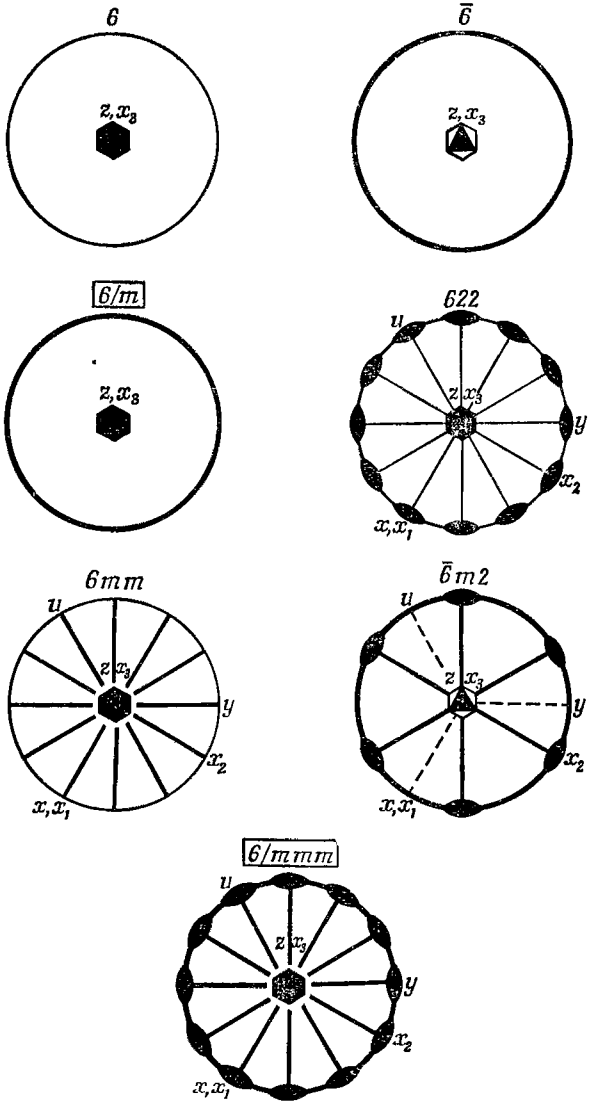



Тетрагональная система
4
z, x3
4̄
z, x3
4/m
z, x3
422
z, x3
y
x2
x, x1
4mm
z, x3
y
x2
x, x1
4̄2m
z, x3
y
x2
x, x1
4/mmm
z, x3
y
x2
x, x1

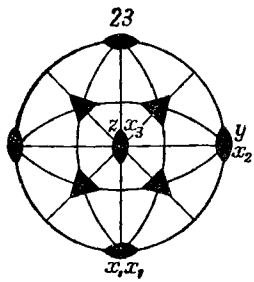
Тригональная система

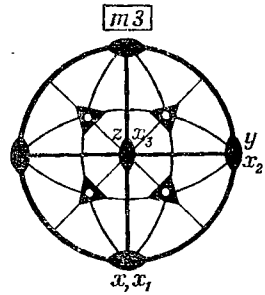


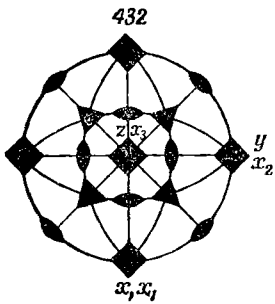
Гексагональная система

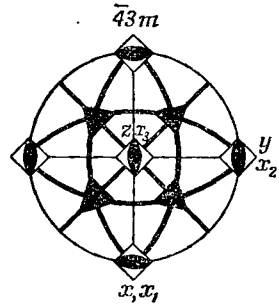


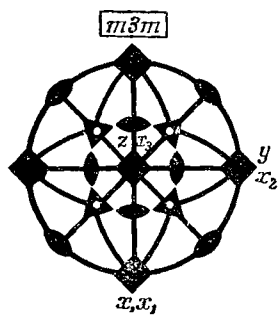
Кубическая система











второго порядка, показанных на стереограмме. Общие правила для построения символов точечных групп здесь обсуждаться не будут, так как для понимания последующего изложения они не нужны. Стереограммы и символы, приведенные в табл. 21, содержат все необходимые сведения, причем символы классов, имеющих центр симметрии (центросимметричных классов) заключены в рамки.

Описанные символы основаны на символах, предложенных Могеном и Германном. В ряде книг и статей еще используются старые обозначения Шенфлиса, не применяющиеся в данной книге; для справок они приведены во втором столбце табл. 23.

Символы $\{hkl\}$ и $\langle UVW\rangle$. Символ $\{hkl\}$ обозначает все грани кристалла или системы плоскостей решетки, которые получаются из грани или плоскости (hkl) размножением ее с помощью элементов симметрии данной точечной группы. Полученная таким способом совокупность граней образует *форму*; эти грани называют „гранями формы $\{hkl\}$".

Аналогично, символ $\langle UVW\rangle$ обозначает все направления, которые можно получить из $[UVW]$ размножением с помощью элементов симметрии данной группы.

Кристаллографические системы. Все кристаллографические классы, число которых равно 32, обычно объединяют в семь кристаллографических систем, как указано в табл. 21. Класс включается в данную кристаллографическую систему в том случае, если его симметрия обладает определенными характерными свойствами. Названия систем и требования, которым должна удовлетворять симметрия кристалла, входящего в данную систему, приводятся ниже.

1) Триклинная система. Имеются только оси первого порядка (поворотные или инверсионные).

2) Моноклинная система. Имеется одна ось второго порядка (поворотная или инверсионная).

3) Орторомбическая система. Имеются три взаимно перпендикулярные оси второго порядка (поворотные или инверсионные), но нет осей более высокого порядка.

4) Тетрагональная система. Имеется одна ось четвертого порядка (поворотная или инверсионная).

5) Кубическая система. Имеются четыре оси третьего порядка, расположенные параллельно объемным диагоналям куба.

6) Тригональная система. Имеется одна ось третьего порядка (поворотная или инверсионная).

7) Гексагональная система. Имеется одна ось шестого порядка (поворотная или инверсионная).

Выбор осей Ox, Oy, Oz. Описанное выше объединение классов в системы применяется потому, что при этом для всех классов одной системы можно выбрать одну и ту же систему осей Ox, Oy, Oz.

Более того, когда выбор осей сделан (в соответствии с определенными правилами, указанными ниже), оказывается, что можно взять такую элементарную ячейку, отношение $a:b:c$ в которой характеризует данную систему. При этом часто бывает необходимо выбрать многократно примитивную ячейку; имея в виду это обстоятельство, мы ,и оставим за собой право применять непримитивную ячейку. Ниже приводятся правила, определяющие ориентацию осей Ox, Oy, Oz относительно характерных элементов симметрии каждой системы; кроме того, приводятся соотношения, существующие между a, b и c и между углами α, β и γ, показанными на фиг. 84.

1) *Триклинная система.* $a\neq b\neq c$; $\alpha\neq\beta\neq\gamma$.

2) *Моноклинная система.* Ось Oy параллельна оси второго порядка;

$$a\neq b\neq c,\quad \alpha=\gamma=90^\circ\neq\beta.$$

3) *Орторомбическая система.* Ox, Oy, Oz параллельны осям второго порядка;

$$a\neq b\neq c,\quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ.$$

4) *Тетрагональная система.* Ось Oz параллельна оси четвертого порядка;

$$a=b\neq c,\quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ.$$

5) *Кубическая система.* Ox, Oy, Oz параллельны ребрам куба, объемные диагонали которого являются осями третьего порядка;

$$a=b=c,\quad \alpha=\beta=\gamma=90^\circ.$$

6) *Тригональная система.* Ось Oz параллельна оси третьего порядка;

$$a=b\neq c,\quad \alpha=\beta=90^\circ,\quad \gamma=120^\circ.$$

7) *Гексагональная система.* Ось Oz параллельна оси шестого порядка;

$$a=b\neq c,\quad \alpha=\beta=90^\circ,\quad \gamma=120^\circ.$$

Иногда считают, что тригональная и гексагональная системы, имеющие аналогичные системы осей, образуют одну систему. Для некоторых систем (например, для тетрагональной) приведенные правила не определяют направления всех осей, поэтому для более симметричных классов этих систем вводятся дополнительные правила. Направления Ox, Oy, Oz указаны на стереограммах табл. 21 во всех тех случаях, когда правила полностью определяют их положение относительно элементов симметрии.

Оси в установке Миллера — Бравэ и в ромбоэдрической установке[1]). На основании указанных выше соотношений у тригональной и гексагональной систем нельзя установить, что у них имеются

[1]) Материал, изложенный в этом разделе, не является необходимым для понимания основного текста книги и приводится нами для полноты.

оси третьего порядка и тем более оси шестого порядка, характерные для этих систем. По этой причине к указанным осям часто добавляют четвертую ось, обозначаемую через Ou, направляя ее в плоскости Ox, Oy под углом 120° к осям Ox и Oy и задавая масштаб вдоль этой оси равным a. В этом случае оси называются *осями Бравэ — Миллера*. Символ грани или системы плоскостей решетки при этом записывается так же, как прежде, за исключением того, что теперь он содержит четыре индекса, т. е. в общем случае $(hkil)$, где индекс i относится к оси Ou. Индексы h, k, l не независимы друг от друга; можно показать, что они связаны соотношением $h+k+l=0$. Преимущество использования четырех осей состоит в том, что кристаллические грани одной и той же формы, скажем $\{hkil\}$, обозначаются совокупностями индексов, которые, если не считать знаков, получаются одна из другой простой перестановкой индексов; таким образом, это правило становится общим для всех систем.

Вопрос об обозначении направлений в тригональной и гексагональной системах не возникает в основном тексте данной книги; однако в связи с тем, что этот вопрос обычно совершенно не рассматривается в учебниках, мы считаем полезным сделать следующие замечания [1]). Выбор той или иной символики зависит от ее применения. Для многих целей лучше всего использовать только три оси Ox, Oy, Oz и записывать направление вектора $U\boldsymbol{a}+V\boldsymbol{b}+W\boldsymbol{c}$ в виде $[UV^*W]$, или $[UVW]$. Тогда с тремя числами U, V, W можно обращаться совершенно так же, как с тремя числами символа направления $[UVW]$ в любой другой кристаллографической системе. В частности, для них справедлив закон зон Вейсса, когда они используются в сочетании с индексами граней h, k, l. Недостатком такой символики является то, что направления, связанные друг с другом операциями симметрии точечной группы, не всегда обозначаются такими совокупностями индексов, которые получаются одна из другой простой перестановкой индексов (с точностью до знаков).

Это затруднение устраняется при использовании других обозначений — с четырьмя индексами. Такие обозначения необходимо строго отличать от трехиндексных, описанных выше (т. е. от $[UVW]$ или $[UV^*W]$). Направление, так же как и грань, обозначается в этом случае системой четырех чисел $[U'V'T'W']$, причем сумма первых трех из них равна нулю, т. е. $U'+V'+T'=0$. Направление $[U'V'T'W']$ обозначает направление вектора

$$U'\boldsymbol{a}+V'\boldsymbol{b}+T'\boldsymbol{t}+W'\boldsymbol{c},$$

где $\boldsymbol{t}$ — вектор, имеющий длину a и направленный вдоль оси Ou. (Можно показать, что определенные таким путем четыре индекса являются нормальными проекциями указанного вектора на четыре

[1]) Этот вопрос обсуждается в статье Доннея [33]; там же приведены ссылки на литературу.

оси; длина этих проекций равна соответственно $^3/_2a$, $^3/_2a$, $^3/_2a$ и c.) В четырехиндексном обозначении ось Ox имеет символ $[\bar{2}\,\bar{1}\,10]$, в то время как в трехиндексном обозначении — символ $[10^*0]$, или $[100]$; таким образом, символы одного и того же направления в двух обозначениях выглядят совершенно различно. В четырехиндексных обозначениях закон Вейсса формулируется следующим образом: грань $(hkil)$ принадлежит к зоне с осью $[U'V'T'W']$, если

$$hU' + kV' + iT' + lW' = 0.$$

В некоторых кристаллах тригональной системы возможен выбор примитивной ромбоэдрической элементарной ячейки; соответствующие оси Ox, Oy, Oz, называемые *ромбоэдрическими*, или *миллеровскими, осями*, одинаково наклонены к оси третьего порядка, причем

$$a = b = c \quad \text{и} \quad \alpha = \beta = \gamma.$$

Ромбоэдрическую ячейку можно также выбрать (хотя это обычно дает меньше преимуществ) в других кристаллах тригональной системы и в кристаллах гексагональной системы, но в этих случаях такая элементарная ячейка не будет примитивной.

Выбор осей Ox_1, Ox_2, Ox_3. Для записи тензоров и матриц, представляющих физические свойства кристаллов, используется иная система осей, а именно Ox_1, Ox_2, Ox_3. Эти оси всегда взаимно перпендикулярны. Расположение осей Ox_1, Ox_2, Ox_3 относительно Ox, Oy, Oz в различных кристаллографических системах определяется соображениями удобства; в настоящей книге мы следуем правилам, рекомендованным IRE [86]. Эти правила можно резюмировать следующим образом.

Моноклинная система. $Ox_2 \parallel Oy$.

Тетрагональная, тригональная и гексагональная системы.

$$Ox_3 \parallel Oz, \quad Ox_1 \parallel Ox.$$

Орторомбическая и кубическая системы.

$$Ox_1 \parallel Ox, \quad Ox_2 \parallel Oy, \quad Ox_3 \parallel Oz.$$

Принято выбирать оси Ox_i так, чтобы они образовывали правую систему как для левых, так и для правых кристаллов энантиоморфных классов [1]). Оси Ox_1, Ox_2, Ox_3 указаны на стереограммах табл. 21 во всех случаях, когда приведенные правила полностью определяют

[1]) См. примечание на стр. 321.

их положение относительно элементов симметрии. Так формулируются условия, необходимые для того, чтобы определить для всех 32 классов формы матриц, представляющих свойства кристаллов. Однако, чтобы можно было однозначно определять численные значения физических констант (например, пьезоэлектрических коэффициентов) для какого-либо данного кристалла, необходимо ввести дополнительные правила относительно ориентации и взаимного расположения осей Ox_1, Ox_2, Ox_3. Здесь возможен широкий выбор, однако, вероятно, станет общепринятой система, предложенная IRE [86].

Отклонения от правил. Для некоторых матриц свойств кристаллов иногда используется иной выбор осей Ox_1, Ox_2, Ox_3. Наиболее важный из них — выбор осей для моноклинной системы, при котором $Ox_3 \| Oy$. Такой выбор применяется рядом авторов.

Оптически изотропные, одноосные и двуосные кристаллы. Иногда кристаллографические системы объединяют в три группы по их оптическим свойствам. Как показано в гл. XIII, § 1, п. 1 и 2, оптические свойства прозрачных кристаллов можно описать с помощью эллипсоида, называемого индикатрисой. В случае триклинных, моноклинных и орторомбических кристаллов все три оси индикатрисы имеют различную длину. Следовательно, индикатриса в этом случае имеет два круговых центральных сечения (см. фиг. 71); нормали к этим двум сечениям называются *оптическими осями первого рода*. В соответствии с этим три указанные кристаллографические системы называют *двуосными*. Для тригональных, тетрагональных и гексагональных кристаллов индикатриса является эллипсоидом вращения и имеет только одно круговое центральное сечение. Нормаль к этому единственному сечению, совпадающая с осью вращения, называется *оптической осью*. Поэтому три указанные системы называют *одноосными*. Для кубической системы индикатриса имеет форму сферы, вследствие чего эта система называется *оптически изотропной*. Хотя такая группировка систем основана лишь на оптических свойствах, она применима и к другим свойствам, ибо целый ряд иных свойств кристаллов можно описывать с помощью эллипсоида или в общем случае с помощью поверхности второго порядка; к таким свойствам относятся все свойства, выражаемые симметричными тензорами второго ранга (см. гл. I, § 4 и 5).

Двуосные системы:	*Одноосные системы*:	*Оптически изотропная система*:
триклинная	тетрагональная	кубическая
моноклинная	тригональная	
орторомбическая	гексагональная	

ЛИТЕРАТУРА ПО КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Хорошим введением в учение о симметрии кристаллов является книга Филлипса [74] [1]).

Справочной книгой по вопросам теории кристаллографической симметрии служат „Интернациональные таблицы для рентгеновской кристаллографии", т. 1, опубликованные в 1952 г. Международным союзом кристаллографов [55].

Полный и сжатый вывод всех точечных и пространственных групп (математически несколько сложный) содержится в работе Ф. Зейтца „Матрично-алгебраическое развитие кристаллографических групп" [Zs. f. Krist., 88, 433 (1934) (точечные группы); 90, 289 (1935) (решетки); 91, 336 (1935) (пространственные группы); 94, 100 (1936) (пространственные группы).] [2])

---

[1]) См. также учебники [114, 123]. — *Прим. перев.*

[2]) Простой и наглядный вывод решеток Бравэ и всех пространственных групп дан Н. В. Беловым [97—100]. — *Прим. перев.*

3. СВОДКА СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ

В табл. 22а и 22б все векторы и тензоры в группах II—VI полярны, кроме векторов $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{B}$ и $\boldsymbol{I}$; эти последние аксиальны. Какой из векторов $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{H}$ (и связанных с ними векторов) является аксиальным, а какой полярным, отчасти зависит от нашего выбора (см. примечание на стр. 75). Во втором столбце табл. 22а указаны свойства или коэффициенты. Здесь использованы следующие обозначения.

Свойства, названия которых в табл. 22а заключены в квадратные скобки, являются обратными по отношению к свойствам, указанным непосредственно над ними. (Хотя все свойства имеют свойства, обратные по отношению к ним, в табл. 22а включены только те обратные свойства, которые упомянуты в основном тексте.)

Свойства, уравнения которых объединены фигурной скобкой, термодинамически связаны.

Цифры, набранные полужирным шрифтом, относятся к приложению 4.

В третьем столбце табл. 22а и 22б приведены уравнения, определяющие свойства, указанные во втором столбце. Простая пропорциональность между переменными, указанная здесь, справедлива только для достаточно малых значений этих переменных. Для больших значений принимается дифференциальное определение; например, для диэлектрической проницаемости

$$\varkappa_{ij} = \frac{\partial D_i}{\partial E_j}.$$

По этой причине уравнения, приведенные в таблицах, в ряде случаев отличаются от уравнений, данных в основном тексте.

Разделение тензорных свойств на группы I—VII до некоторой степени произвольно. Например, удельное электрическое сопротивление, включенное в группу III, связывает тензор второго ранга (произведение компонент плотности тока) со скаляром (скоростью выделения джоулева тепла) уравнением

$$\dot{q} = \rho_{ik} j_i j_k.$$

Это уравнение можно принять за определение ρ_{ik}, и тогда его следует отнести к группе IV. Таким образом, неопределенность связана с произвольностью выбора определяющего уравнения. Если же определяющее уравнение избрано, то тем самым определена и группа в нашей схеме. Наоборот, ранг тензора не является произвольным.

ТАБЛИЦА 22а

Тензоры, описывающие свойства кристаллов, упомянутые в данной книге

Номер уравнения и страница	Свойство или коэффициенты	Определяющее уравнение	Общие соотношения между компонентами
	I. Скаляр, связывающий два скаляра		
(10.1), 205	Теплоемкость C	$\Delta S = (C/T)\,\Delta T$	—
	II. Тензор первого ранга, связывающий скаляр и вектор		
(4.21), 100	Пироэлектрический эффект 1	$\Delta P_i = p_i \Delta T$	—
(10.37), 219	Электрокалорический эффект 1	$\Delta S = p_i \Delta E_i$	
(10.46), 222	Теплота поляризации 1	$\Delta S = t_i \Delta P_i$	
(10.46), 222	Поле, обусловленное изменением температуры 1	$E_i = -t_i \Delta T$	—
100	Поляризация при гидростатическом сжатии 1	$P_i = -d_{ijj} p$	—
	III. Тензор второго ранга, связывающий два вектора		
(4.6), 90	Диэлектрическая проницаемость 2	$D_i = \varkappa_{ij} E_j$	Симметричный тензор
(9.20а), 190	[Диэлектрическая непроницаемость] 2	$E_i = \beta_{ij} D_j$	То же
(4.5), 90	Диэлектрическая восприимчивость 2	$P_i = \varkappa_0 \chi_{ij} E_j$	» »

Продолжение табл. 22а

Номер уравнения и страница	Свойство или коэффициенты	Определяющее уравнение	Общие соотношения между компонентами
(3.7), 75	Магнитная проницаемость 2	$B_i = \mu_{ij} H_j$	Симметричный тензор
(3.5), 74	Магнитная восприимчивость 2	$I_i = \mu_0 \psi_{ij} H_j$	То же
(11.17), 245	Удельная электропроводность 2	$j_i = \sigma_{ik} E_k$	» »
(11.18), 245	[Удельное электрическое сопротивление] 2	$E_i = \rho_{ik} j_k$	» »
(11.3), 235	Теплопроводность 2	$h_i = -k_{ij} (\partial T/\partial x_j)$	» »
(11.8), 236	[Тепловое сопротивление] 2	$\partial T/\partial x_i = -r_{ij} h_j$	» »
(12.36), 268	Термоэлектричество 3	$\partial \bar{\mu}/\partial x_i = -\Sigma_{ik} (\partial T/\partial x_k)$	» »
(12.43), 269		($j^e = 0$) или „поток энтропии“ $= j_i^e \Sigma_{ik}$	Несимметричный тензор
IV. Тензор второго ранга, связывающий скаляр и тензор второго ранга			
(6.13), 130	Тепловое расширение 2	$\varepsilon_{ij} = \alpha_{ij} \Delta T$	Симметричный тензор
(10.19), 215	Пьезокалорический эффект 2	$\Delta S = \alpha_{ij} \sigma_{ij}$	
(10.24), 216	Термическое напряжение 2	$\sigma_{ij} = -f_{ij} \Delta T$	То же
(10.24), 216	Теплота деформации 2	$\Delta S = f_{ij} \varepsilon_{ij}$	
(8.24), 177	Деформация при гидростатическом сжатии 2	$\varepsilon_{ij} = -s_{ijkk} p$	Симметричный тензор ($s_{ijkk} = s_{jikk}$)
(12.46), 270	Коэффициенты Пельтье 3	$\Pi_{ik} = (T/e) \Sigma_{ik}$	Несимметричный тензор

Номер уравнения и страница	Свойство или коэффициенты	Определяющее уравнение	Общие соотношения между компонентами
	V. Тензор третьего ранга, связывающий вектор и тензор второго ранга		
(7.3), 138	Прямой пьезоэлектрический эффект 4	$P_i = d_{ijk}\sigma_{jk}$	$d_{ijk} = d_{ikj}$
(7.19), 143	Обратный пьезоэлектрический эффект 4	$\varepsilon_{jk} = d_{ijk}E_i$	
(10.47), 222	Прямой пьезоэлектрический эффект 4	$P_i = e_{ijk}\varepsilon_{jk}$	$e_{ijk} = e_{ikj}$
(10.47), 222	Обратный пьезоэлектрический эффект 4	$\sigma_{jk} = -e_{ijk}E_i$	
(13.14), 289	Электрооптический эффект 5	$\Delta B_{ij} = z_{ijk}E_k$	$z_{ijk} = z_{jik}$
	VI. Тензор четвертого ранга, связывающий два тензора второго ранга		
(8.1), 162	Упругие податливости 6	$\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}$	$s_{ijkl} = s_{jikl} = s_{ijlk} = s_{klij}$
(8.2), 162	[Упругие жесткости] 6	$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl}$	$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}$
(13.16), 289	Упругооптические коэффициенты 7	$\Delta B_{ij} = p_{ijkl}\varepsilon_{kl}$	$p_{ijkl} = p_{jikl} = p_{ijlk}$
(13.14), 289	Пьезооптические коэффициенты 7	$\Delta B_{ij} = \pi_{ijkl}\sigma_{kl}$	$\pi_{ijkl} = \pi_{jikl} = \pi_{ijlk}$
(13.40), 303	Электрострикция 7	$\varepsilon_{jk} = \gamma_{ijk}E_iE_i$	$\gamma_{ijk} = \gamma_{ijk} = \gamma_{ijk}$
	VII. Аксиальный тензор второго ранга, задающий изменение псевдоскаляра с направлением		
(14.7), 315	Оптическая активность (гирационный тензор) 8	$G = g_{ij}l_il_j$	Симметричный тензор

ТАБЛИЦА 22б

Тензоры, упомянутые в данной книге и не выражающие свойства кристаллов

Полярный тензор, связывающий два полярных вектора

Номер уравнения и страница	Тензор	Определяющее уравнение	Общие соотношения между компонентами
(5.7), 113	Напряжение	$p_i = \sigma_{ij} l_j$	Симметричный тензор *
(6.9), 125	Деформация вместе с поворотом	$u_i - (u_0)_i = e_{ij} l_j$	$[e_{ij}]$ не симметричен
(6.10), 125	Деформация + + поворот	$u_i - (u_0)_i = \varepsilon_{ij} x_j + + \omega_{ij} x_j$	$[\varepsilon_{ij}]$ симметричен, $[\omega_{ij}]$ не симметричен

* См. стр. 111.

Некоторые тензоры, рассматриваемые в кристаллофизике и не включенные в табл. 22а и 22б. Перечислим ряд свойств, описываемых тензорами, но не вошедших в табл. 22а и 22б.

Коэффициенты самодиффузии [17].

Пиромагнитный и пьезомагнитный эффекты [93]. (Существование пьезомагнитного эффекта твердо не установлено [1]).

Магнитострикция.

Упругие коэффициенты второго порядка (стр. 303) [16, 40, 42, 49].

Пьезооптические коэффициенты второго порядка.

Электрооптические коэффициенты второго порядка (эффект Керра) (стр. 288).

Зависимость электропроводности от давления [29].

Зависимость коэффициентов теплового расширения от температуры.

Тензоры, выражающие другие эффекты второго и более высокого порядков (стр. 301—303).

Некоторые анизотропные свойства кристаллов, непосредственно не выражаемые тензорами. Ниже перечислен ряд свойств кристаллов, которые непосредственно не выражаются тензорами. Однако это не означает, что то или иное свойство, указанное ниже, не может быть, в конечном счете, выражено через тензоры (например, показатель преломления связан с тензорной диэлектрической постоянной); имеется в виду лишь то, что само по себе оно не является тензором.

[1]) Недавно пьезомагнитный эффект был теоретически предсказан И. Е. Дзялошинским и Б. А. Тавгером и экспериментально обнаружен А. С. Боровик-Романовым [101]. — *Прим. перев.*

Напряжение отрыва по плоскостям спайности.
Диэлектрическая прочность.
Предел текучести при пластическом деформировании, механическое упрочнение и напряжение разрыва пластичных кристаллов.
Показатель преломления (стр. 279—81).
Поверхностные свойства, включающие:

трение,
поверхностную твердость,
поверхностную энергию,
отражение поляризованного света,
скорость роста и растворения кристалла,
физико-химические свойства: скорость потускнения, фигуры травления и т. д.

Общий обзор анизотропии металлов можно найти в статье Боаса и Маккензи [17].

4. ЧИСЛО НЕЗАВИСИМЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДЛЯ КАЖДОГО ИЗ 32 КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ КЛАССОВ

В табл. 23 для каждого из 32 кристаллографических классов указано число независимых коэффициентов, необходимых для полного определения любого свойства кристалла. Свойства кристаллов разделены на группы, обозначенные **1**, **2** и т. д. Конкретное свойство, принадлежащее к любой из групп, можно найти, обратившись ко второму столбцу табл. 22а, где каждое свойство обозначено числом, указывающим номер группы, к которой это свойство относится. Полную форму матрицы любого свойства для любого класса можно найти на странице, номер которой указан в скобках в заголовке каждого столбца.

ТАБЛИЦА 23

Символ класса		Число независимых коэффициентов						
интернациональный	по Шенфлису	**1** (стр. 101)	**2** (стр. 38)	**3** (стр. 271)	**4 и 5** (стр. 152, 292)	**6** (стр. 172)	**7** (стр. 294)	**8** (стр. 322)
1	C_1	3	6	9	18	21	36	6
$\bar{1}$	$C_i\,(S_2)$	0	6	9	0	21	36	0
2	C_2	1	4	5	8	13	20	4
m	$C_s\,(C_{1h})$	2	4	5	10	13	20	2
$2/m$	C_{2h}	0	4	5	0	13	20	0
222	$D_2\,(V)$	0	3	3	3	9	12	3
$mm2$	C_{2v}	1	3	3	5	9	12	1
mmm	$D_{2h}\,(V_h)$	0	3	3	0	9	12	0
$\bar{4}$	C_4	1	2	3	4	7	10	2
$\bar{4}$	S_4	0	2	3	4	7	10	2
$4/m$	C_{4h}	0	2	3	0	7	10	0
422	D_4	0	2	2	1	6	7	2
$4mm$	C_{4v}	1	2	2	3	6	7	0
$\bar{4}2m$	$D_{2d}\,(V_d)$	0	2	2	2	6	7	1
$4/mmm$	D_{4h}	0	2	2	0	6	7	0

Продолжение табл. 23

Символ класса		Число независимых коэффициентов						
интернациональный	по Шенфлису	1 (стр. 101)	2 (стр. 38)	3 (стр. 271)	4 и 5 (стр. 152, 292)	6 (стр. 172)	7 (стр. 294)	8 (стр. 322)
3	C_3	1	2	3	6	7	12	2
$\bar{3}$	$C_{3i}\,(S_6)$	0	2	3	0	7	12	0
32	D_3	0	2	2	2	6	8	2
$3m$	C_{3v}	1	2	2	4	6	8	0
$\bar{3}m$	D_{3d}	0	2	2	0	6	8	0
6	C_6	1	2	3	4	5	8	2
$\bar{6}$	C_{3h}	0	2	3	2	5	8	0
$6/m$	C_{6h}	0	2	3	0	5	8	0
622	D_6	0	2	2	1	5	6	2
$6mm$	C_{6v}	1	2	2	3	5	6	0
$\bar{6}m2$	D_{3h}	0	2	2	1	5	6	0
$6/mmm$	D_{6h}	0	2	2	0	5	6	0
23	T	0	1	1	1	3	4	1
$m3$	T_h	0	1	1	0	3	4	0
432	O	0	1	1	0	3	3	1
$\bar{4}3m$	T_d	0	1	1	1	3	3	0
$m3m$	O_h	0	1	1	0	3	3	0
Изотропная среда без центра симметрии		0	1	1	0	2	2	1
Изотропная среда с центром симметрии		0	1	1	0	2	2	0
Число классов, обладающих соответствующим свойством		10	32	32	20	32	32	15

Число и перечень независимых коэффициентов для других возможных тензорных свойств, включая еще не открытые, можно найти в литературе, указанной на стр. 150, а также в статьях Багавантама и Сурьянарайаны [13], Фуми [40—44] и Фиеши и Фуми [39]. Частный случай тензора шестого ранга обсуждается Мэзоном [65].

5. МАТРИЦЫ РАВНОВЕСНЫХ СВОЙСТВ ДЛЯ 32 КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ КЛАССОВ

В табл. 24 показано, как влияет кристаллографическая симметрия каждого из 32 классов на форму матриц, входящих в уравнения (10.44) и (10.45). Для удобства мы повторно приводим здесь эти уравнения:

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_1 &= s_{11}^{E,T}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{13}\sigma_3 + s_{14}\sigma_4 + s_{15}\sigma_5 + \\
&\quad + s_{16}\sigma_6 + d_{11}^{T}E_1 + d_{21}E_2 + d_{31}E_3 + \alpha_1^{E}\Delta T, \\
\varepsilon_2 &= s_{12}\sigma_1 + s_{22}\sigma_2 + s_{23}\sigma_3 + s_{24}\sigma_4 + s_{25}\sigma_5 + \\
&\quad + s_{26}\sigma_6 + d_{12}E_1 + d_{22}E_2 + d_{32}E_3 + \alpha_2\Delta T, \\
\varepsilon_3 &= s_{13}\sigma_1 + s_{23}\sigma_2 + s_{33}\sigma_3 + s_{31}\sigma_4 + s_{35}\sigma_5 + \\
&\quad + s_{36}\sigma_6 + d_{13}E_1 + d_{23}E_2 + d_{33}E_3 + \alpha_3\Delta T, \\
\varepsilon_4 &= s_{14}\sigma_1 + s_{24}\sigma_2 + s_{34}\sigma_3 + s_{44}\sigma_4 + s_{45}\sigma_5 + \\
&\quad + s_{46}\sigma_6 + d_{14}E_1 + E_{24}E_2 + d_{34}E_3 + \alpha_4\Delta T, \\
\varepsilon_5 &= s_{15}\sigma_1 + s_{25}\sigma_2 + s_{35}\sigma_3 + s_{45}\sigma_4 + s_{55}\sigma_5 + \\
&\quad + s_{56}\sigma_6 + d_{15}E_1 + d_{25}E_2 + d_{35}E_3 + \alpha_5\Delta T, \qquad (10.44) \\
\varepsilon_6 &= s_{16}\sigma_1 + s_{26}\sigma_2 + s_{36}\sigma_3 + s_{46}\sigma_4 + s_{56}\sigma_5 + \\
&\quad + s_{66}\sigma_6 + d_{16}E_1 + d_{26}E_2 + d_{36}E_3 + \alpha_6\Delta T, \\
D_1 &= d_{11}^{T}\sigma_1 + d_{12}\sigma_2 + d_{13}\sigma_3 + d_{14}\sigma_4 + d_{15}\sigma_5 + \\
&\quad + d_{16}\sigma_6 + \varkappa_{11}^{\sigma,T}E_1 + \varkappa_{12}E_2 + \varkappa_{13}E_3 + p_1^{\sigma}\Delta T, \\
D_2 &= d_{21}\sigma_1 + d_{22}\sigma_2 + d_{23}\sigma_3 + d_{24}\sigma_4 + d_{25}\sigma_5 + \\
&\quad + d_{26}\sigma_6 + \varkappa_{12}E_1 + \varkappa_{22}E_2 + \varkappa_{23}E_3 + p_2\Delta T, \\
D_3 &= d_{31}\sigma_1 + d_{32}\sigma_2 + d_{33}\sigma_3 + d_{34}\sigma_4 + d_{35}\sigma_5 + \\
&\quad + d_{36}\sigma_6 + \varkappa_{13}E_1 + \varkappa_{23}E_2 + \varkappa_{33}E_3 + p_3\Delta T, \\
\Delta S &= \alpha_1^{E}\sigma_1 + \alpha_2\sigma_2 + \alpha_3\sigma_3 + \alpha_4\sigma_4 + \alpha_5\sigma_5 + \alpha_6\sigma_6 + \\
&\quad + p_1^{\sigma}E_1 + p_2E_2 + p_3E_3 + \frac{C^{\sigma,E}}{T}\Delta T,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\varepsilon} &= \mathbf{s}^{E,T}\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{d}_t^{T}\mathbf{E} + \boldsymbol{\alpha}^{E}\Delta T, \\
\mathbf{D} &= \mathbf{d}^{T}\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\varkappa}^{\sigma,T}\mathbf{E} + \mathbf{p}^{\sigma}\Delta T, \qquad (10.45) \\
\Delta S &= \boldsymbol{\alpha}_t^{E}\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{p}_t^{\sigma}\mathbf{E} + \frac{C^{\sigma,E}}{T}\Delta T.
\end{aligned}
$$

ТАБЛИЦА 24

Матрицы равновесных свойств для 32 кристаллографических классов

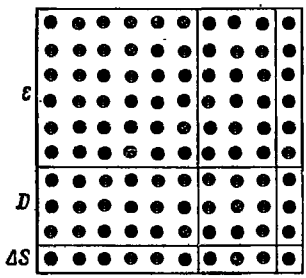
Обозначения

- компонента, равная нулю,
- компонента, отличная от нуля,
- равные компоненты,
- компоненты, численно равные, но противоположные по знаку,
- компонента, равная удвоенному значению компоненты, обозначенной жирной точкой, с которой данный символ соединен линией,
- компонента, равная взятому с обратным знаком удвоенному значению компоненты, обозначенной жирной точкой, с которой данный символ соединен линией,
- $\times$ $2(s_{11} - s_{12})$.

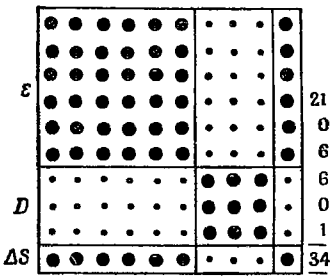
Каждая полная (10×10)-матрица симметрична относительно главной диагонали.

Триклинная система

Класс 1

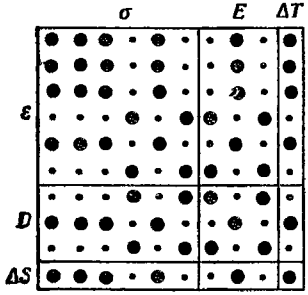


Класс $\bar{1}$

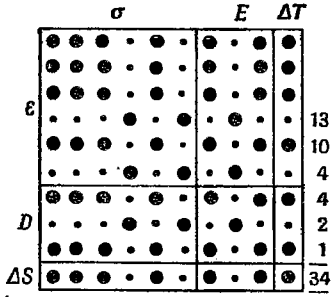


Моноклинная система

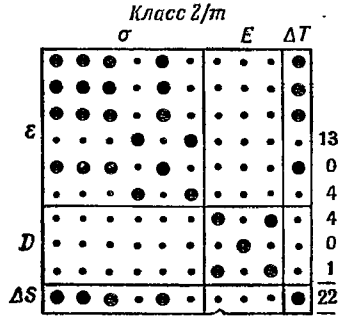
Класс 2



Класс m

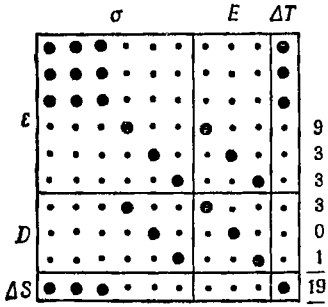


Класс 2/m

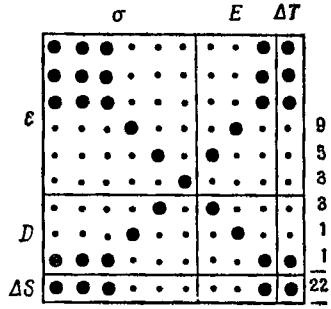


Орторомбическая система

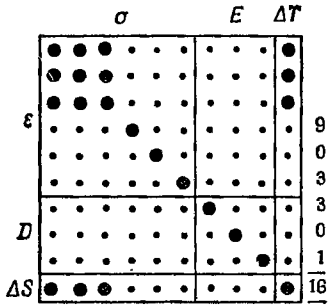
Класс 222



Класс mm2

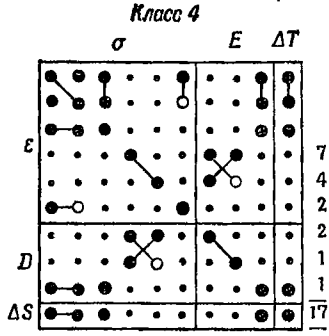


Класс mmm

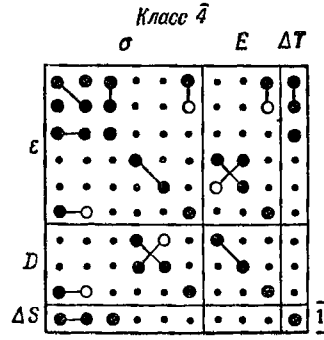


Тетрагональная система

Класс 4

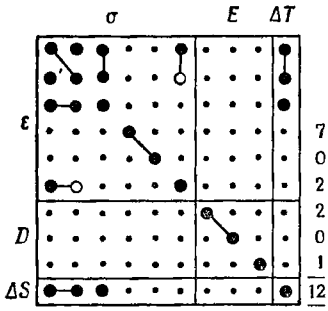


Класс $\bar{4}$

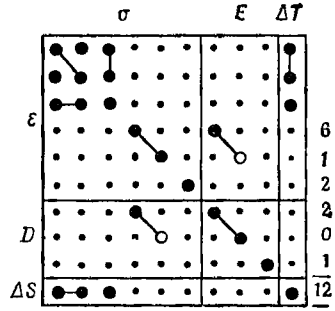


Тетрагональная система (*продолжение*)

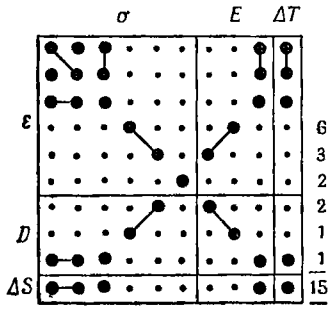
Класс 4/m



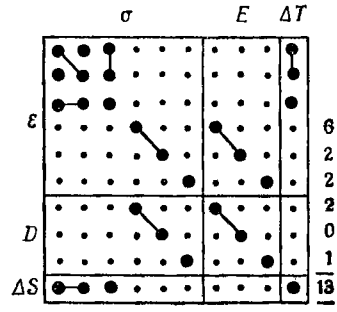
Класс 422



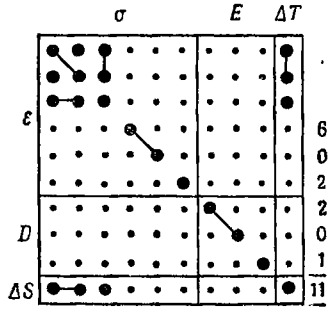
Класс 4mm



Класс $\bar{4}2m$

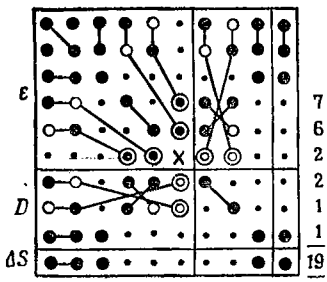


Класс 4/mmm

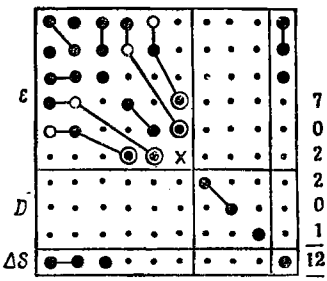


Тригональная система

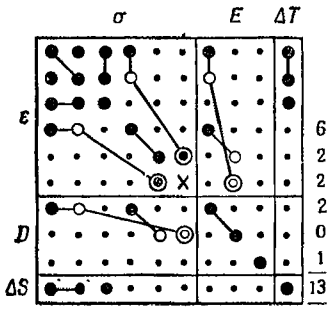
Класс 3



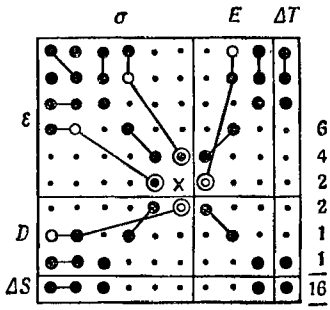
Класс $\bar{3}$



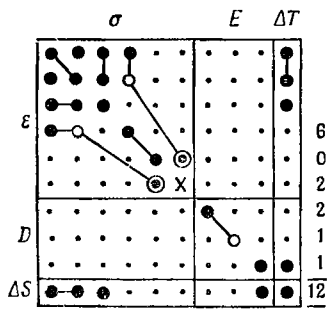
Класс 32



Класс 3m

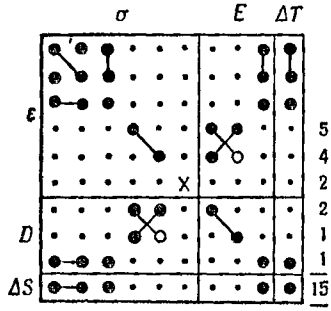


Класс $\bar{3}m$

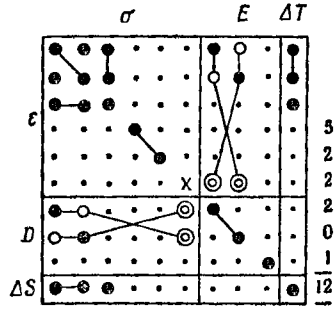


Гексагональная система

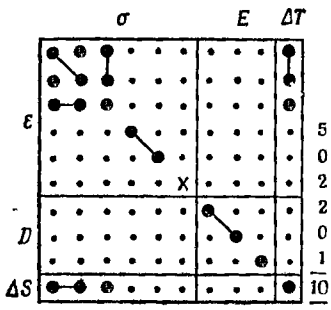
Класс 6



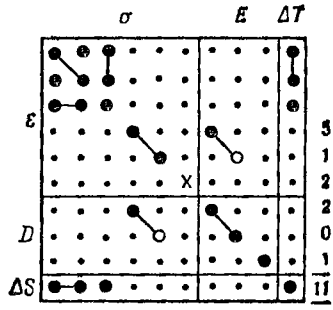
Класс $\bar{6}$



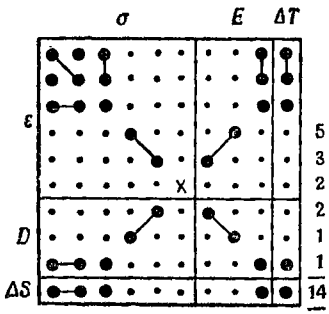
Классы 6/m и 6/mmm



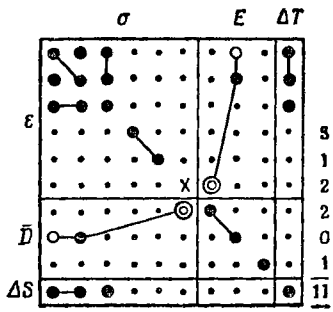
Класс 622



Класс 6mm



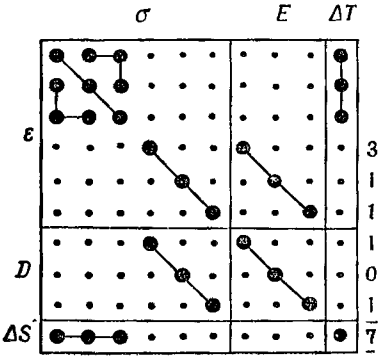
Класс $\bar{6}m2$



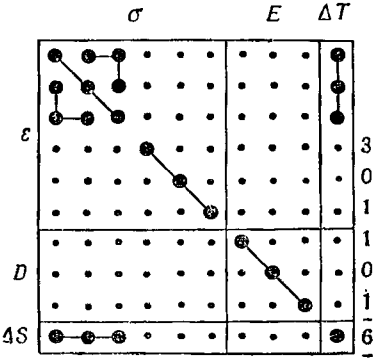
Продолжение табл. 24

Кубическая система

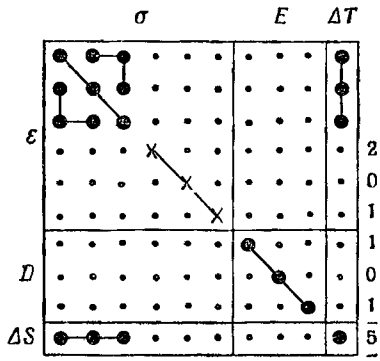
Классы 23 и $\bar{4}3m$



Классы $m3$, 432 и $m3m$



Изотропная среда



В табл. 24 объединены матрицы, приведенные в тексте на стр. 38, 101, 152, 172. Все коэффициенты в правых частях этих уравнений представлены в виде одной матрицы $[(6+3+1)\times(6+3+1)]=[10\times 10]$ следующим образом:

	σ	E	ΔT
ε	**s**	**d**t	α
D	**d**	$\varkappa$	**p**
ΔS	αt	**p**t	C/T

s — упругие податливости,
d — пьезоэлектрические модули,
α — коэффициенты теплового расширения,
$\varkappa$ — диэлектрические проницаемости,
p — пироэлектрические коэффициенты,
C — теплоемкость,
T — абсолютная температура.

Сбоку каждой матрицы указано число независимых коэффициентов для каждого свойства в следующем порядке: **s**, **d**, α, $\varkappa$, **p**, C/T, а внизу — полное число коэффициентов. Расположение осей координат x_1, x_2, x_3 относительно элементов симметрии соответствует правилам, приведенным в приложении 2. Все (10×10)-матрицы симметричны относительно главной диагонали. Все другие равенства и соотношения между элементами матриц, определяемые точечной симметрией, указаны символами, объясненными в начале таблицы (эти символы совпадают с использованными в основном тексте).

6. МАГНИТНАЯ И ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ

В дополнение к рассмотрению, проведенному в гл. III, § 2, в гл. IV, § 4, и в гл. X, § 3, сделаем еще следующие замечания относительно магнитной и электрической энергии.

Пусть изменение статического электромагнитного поля вызывается перемещением зарядов и изменением токов. Пользуясь уравнениями Максвелла, можно показать, что произведенная при этом работа выражается в виде

$$dW = \int_V (\boldsymbol{E}\, d\boldsymbol{D} + \boldsymbol{H}\, d\boldsymbol{B})\, d\tau, \qquad (\text{П } 6.1)$$

где $d\tau$ — элемент объема, а интегрирование производится по всему пространству V.

В случае изотермического обратимого процесса затраченная работа равна возрастанию $d\Psi'$ свободной энергии Ψ':

$$dW = d\Psi'.$$

Если рассматриваемая термодинамическая система представляет собой поляризованное или намагниченное тело плюс заряды и токи, создающие соответствующие поля, то для изотермического обратимого изменения состояния этой системы выражение (П 6.1) можно приравнять $d\Psi'$. При этом Ψ' зависит не только от условий, в которых находится тело, но и от величины и расположения внешних зарядов и токов. Следовательно, удобно разделить Ψ' на две части, одна из которых (обозначим ее через Ψ) зависит только от состояния тела и может быть названа *свободной энергией тела*. В случае упругой энергии тела (см. гл. VIII, § 3) трудности в определении свободной энергии тела не возникают, ибо вся энергия локализована (или, во всяком случае, ее можно считать локализованной) в самом теле. Однако в рассматриваемом нами случае разделение энергии на часть, которой обладает тело, и на оставшуюся часть несколько произвольно, поскольку магнитные и электрические силы являются дальнодействующими. Так, можно дать следующее определение:

$$\Psi = \Psi' - \frac{1}{2} \int_{V-V_1} (\varkappa_0 E^2 + \mu_0 H^2)\, d\tau.$$

(интегрирование производится по пространству вне тела). Тогда, так как вне тела $\boldsymbol{D} = \varkappa_0 \boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{B} = \mu_0 \boldsymbol{H}$, для любого обратимого изменения поля

$$d\Psi = \int_{V_1} (\boldsymbol{E}\, d\boldsymbol{D} + \boldsymbol{H}\, d\boldsymbol{B})\, d\tau \qquad (\text{П } 6.2)$$

(V_1 — объем, занимаемый телом).

При ином определении

$$\Psi = \Psi' - \frac{1}{2} \int_V (\varkappa_0 E^2 + \mu_0 H^2)\, d\tau.$$

Тогда для любого обратимого изменения поля

$$d\Psi = \int_{V_1} (\boldsymbol{E}\, d\boldsymbol{P} + \boldsymbol{H}\, d\boldsymbol{I})\, d\tau. \qquad (\text{П } 6.3)$$

Следовательно, в выражении для $d\Psi$ или dU (см. стр. 218) с равным правом можно использовать $E_l\, dP_l$ или $E_l\, dD_l$. Какое бы определение ни было принято, мы приходим к одинаковым термодинамическим выводам, ибо выражения (П 6.2) и (П 6.3) для $d\Psi$ отличаются друг от друга на полный дифференциал

$$\frac{1}{2}\, d \int_{V_1} (\varkappa_0 E^2 + \mu_0 H^2)\, dt.$$

Следует отметить, что если при изменении поля размеры и форма кристалла изменяются (это будет иметь место, когда кристалл является пьезоэлектриком), то некоторые точки пространства, находящиеся первоначально внутри кристалла, после изменения окажутся вне кристалла (и наоборот). В таких точках изменение $\boldsymbol{P}$ и $\boldsymbol{I}$, а следовательно, и $\boldsymbol{D}$ и $\boldsymbol{B}$ уже не будет непрерывным. Поэтому, строго говоря, величина $\boldsymbol{E}\,d\boldsymbol{D}$ представляет собой возрастание свободной энергии на единицу объема кристалла лишь в том случае, когда размеры и форма кристалла сохраняются неизменными. Однако легко показать, что если считать $\boldsymbol{E}\,d\boldsymbol{D}$ точным выражением и при наличии деформаций, то появляющиеся при этом погрешности в термодинамических соотношениях будут лишь малыми поправочными членами.

Более полное обсуждение рассматривавшихся здесь вопросов можно найти в книге Беккера и Дёринга [5] и в статьях Гуггенгейма [46] и Кёнига [60].

7. РАЗЛИЧИЕ МЕЖДУ ИЗОТЕРМИЧЕСКИМИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ПРОНИЦАЕМОСТЯМИ ЗАЖАТОГО И СВОБОДНОГО КРИСТАЛЛОВ

Чтобы проиллюстрировать вычисления, приводящие к соотношениям (10.49) — (10.55), дадим здесь вывод уравнения (10.51). Последнее выражает разность диэлектрических проницаемостей зажатого и свободного кристаллов и, таким образом, описывает ту часть диэлектрической проницаемости, которая обусловлена пьезоэлектрическим эффектом. Уравнение (10.51) имеет вид

$$\varkappa_{ij}^{\varepsilon} - \varkappa_{ij}^{\sigma} = -d_{ikl}d_{jmn}c_{klmn}^{E} \quad (T = \text{const}).$$

Пусть температура T постоянна. Тогда из уравнений (10.27) и (10.28) получаем

$$d\varepsilon_{mn} = \left(\frac{\partial \varepsilon_{mn}}{\partial \sigma_{pq}}\right)_E d\sigma_{pq} + \left(\frac{\partial \varepsilon_{mn}}{\partial E_j}\right)_\sigma dE_j, \tag{П 7.1}$$

$$dD_i = \left(\frac{\partial D_i}{\partial \sigma_{kl}}\right)_E d\sigma_{kl} + \left(\frac{\partial D_i}{\partial E_j}\right)_\sigma dE_j. \tag{П 7.2}$$

Полагая в уравнении (П 7.1) $d\varepsilon_{mn} = 0$ и умножая его на $(\partial\sigma_{kl}/\partial\varepsilon_{mn})_E$, находим

$$0 = \left(\frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial \varepsilon_{mn}}\right)_E \left(\frac{\partial \varepsilon_{mn}}{\partial \sigma_{pq}}\right)_E d\sigma_{pq} + \left(\frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial \varepsilon_{mn}}\right)_E \left(\frac{\partial \varepsilon_{mn}}{\partial E_j}\right)_\sigma dE_j. \tag{П 7.3}$$

Но, согласно соотношению (9.21), первый член в правой части этого уравнения равен

$$\delta_{kp}\delta_{lq}\, d\sigma_{pq} = d\sigma_{kl}.$$

Поэтому, подставив полученное из уравнения (П 7.3) значение $d\sigma_{kl}$ в уравнение (П 7.2) и разделив его на dE_j, мы имеем

$$\left(\frac{\partial D_i}{\partial E_j}\right)_\varepsilon - \left(\frac{\partial D_i}{\partial E_j}\right)_\sigma = -\left(\frac{\partial D_i}{\partial \sigma_{kl}}\right)_E \left(\frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial \varepsilon_{mn}}\right)_E \left(\frac{\partial \varepsilon_{mn}}{\partial E_j}\right)_\sigma.$$

Это уравнение эквивалентно уравнению (10.51).

8. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО СВОЙСТВ ИНДИКАТРИСЫ С ПОМОЩЬЮ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА [1])

В системе MKS уравнения Максвелла записываются в виде

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \boldsymbol{H} &= \boldsymbol{j} + \dot{\boldsymbol{D}}, \\ \operatorname{rot} \boldsymbol{E} &= -\dot{\boldsymbol{B}}; \end{aligned} \tag{П 8.1}$$

здесь точка означает дифференцирование по времени. Прозрачные кристаллы обладают низкой проводимостью и не являются ферромагнетиками. Поэтому их магнитная проницаемость очень мало отличается от проницаемости вакуума, и мы можем положить

$$\boldsymbol{j} = 0, \quad \boldsymbol{B} = \mu_0 \boldsymbol{H}. \tag{П 8.2}$$

Тогда уравнения (П 8.1) упрощаются и принимают вид

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{H} = \dot{\boldsymbol{D}} \tag{П 8.3}$$

и

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{E} = -\mu_0 \dot{\boldsymbol{H}}. \tag{П 8.4}$$

Мы хотим исследовать свойства плоско-поляризованных электромагнитных волн, проходящих через кристалл. Поэтому будем искать решение уравнений (П 8.3) и (П 8.4) в виде

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \exp\left[i\omega\left(t - \frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right]^{2)}, \tag{П 8.5}$$

где $\boldsymbol{E}_0$ — постоянный вектор, ω и v — константы, $\boldsymbol{l}$ — единичный вектор, $\boldsymbol{r}$ — радиус-вектор точки $[x_1, x_2, x_3]$. Это решение представляет собой плоскую волну, поскольку в данный момент времени t вектор $\boldsymbol{E}$ имеет постоянную величину на всей поверхности $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l} = \text{const}$, представляющей собой плоскость, нормальную к $\boldsymbol{l}$. Очевидно, что v есть скорость распространения волнового фронта вдоль волновой нормали $\boldsymbol{l}$ и что $\boldsymbol{E}_0$ — амплитуда, а $\omega/2\pi$ — частота волны.

Подставляя это выражение для $\boldsymbol{E}$ в (П 8.4), получаем

$$-\mu_0 \dot{\boldsymbol{H}} = \operatorname{rot}\left\{\boldsymbol{E}_0 \exp\left[i\omega\left(t - \frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right]\right\}. \tag{П 8.6}$$

---

[1]) См. стр. 279 — 81.

[2]) Это выражение содержит комплексные величины, хотя входящие в него физические величины действительны. Для описания физического состояния можно взять либо действительную, либо мнимую часть этого выражения (см., например, книгу Джуса [59]).

Известно, что ротор произведения скаляра (например, φ) на вектор (например, $\boldsymbol{A}$) можно разложить следующим образом:

$$\operatorname{rot}\varphi\boldsymbol{A}=\varphi\operatorname{rot}\boldsymbol{A}+(\operatorname{grad}\varphi)\times\boldsymbol{A}.$$

Используя это соотношение и вспоминая, что $\boldsymbol{E}_0$ не зависит от координаты, так что $\operatorname{rot}\boldsymbol{E}_0=0$, мы получаем из уравнения (П 8.6)

$$\mu_0\dot{\boldsymbol{H}}=\boldsymbol{E}_0\times\operatorname{grad}\exp\left[i\omega\left(t-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right]. \qquad (\text{П } 8.7)$$

Далее, $\operatorname{grad}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l})=\boldsymbol{l}$, что можно видеть, выписывая его компоненты; поэтому уравнение (П 8.7) можно переписать в виде

$$\mu_0\dot{\boldsymbol{H}}=$$

$$=\boldsymbol{E}_0\left\{-\frac{i\omega}{v}\exp\left[i\omega\left(t-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right]\operatorname{grad}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l})\right\}$$

или

$$\mu_0\dot{\boldsymbol{H}}=\frac{i\omega}{v}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{E}_0)\exp\left[i\omega\left(t-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right].$$

Интегрируя по t, получаем

$$\mu_0\boldsymbol{H}=\frac{1}{v}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{E}_0)\exp\left[i\omega\left(t-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right]=$$

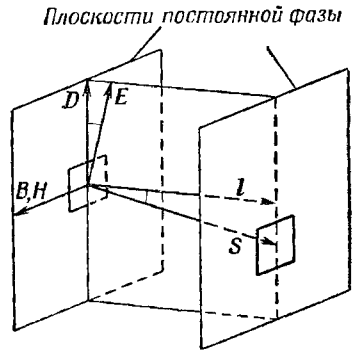
$$=\frac{1}{v}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{E}). \qquad (\text{П } 8.8)$$

Отсюда можно записать

$$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}_0\exp\left[i\omega\left(t-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right], \qquad (\text{П } 8.9)$$

где

$$\mu_0\boldsymbol{H}_0=\frac{1}{v}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{E}_0). \qquad (\text{П } 8.10)$$



Фиг. 86. Соотношение между векторами $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{l}$ и $\boldsymbol{S}$ в плоско-поляризованной световой волне, проходящей через двоякопреломляющий кристалл.

$\boldsymbol{l}$ — волновая нормаль; $\boldsymbol{S}$ — направление луча.

Выражение (П 8.9) показывает, что $\boldsymbol{H}$ представляет собой плоскую волну, совпадающую по фазе с волной $\boldsymbol{E}$. Выражение (П 8.8) содержит важный результат; а именно из него следует, что вектор $\boldsymbol{H}$ перпендикулярен плоскости, в которой лежат $\boldsymbol{l}$ и $\boldsymbol{E}$. Это иллюстрируется фиг. 86.

Мы пока не знаем, каков угол между $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{l}$, но у нас не использовано уравнение (П 8.3). Подставляя выражение (П 8.9) в уравнение (П 8.3) так же, как мы подставляли (П 8.5) в (П 8.4), получаем

$$\dot{\boldsymbol{D}}=\operatorname{rot}\left\{\boldsymbol{H}_0\exp\left[i\omega\left(t-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right]\right\}=$$

$$=-\boldsymbol{H}_0\times\operatorname{grad}\exp\left[i\omega\left(t-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right]=$$

$$=-\frac{i\omega}{v}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{H}_0)\exp\left[i\omega\left(t-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right].$$

Интегрирование по t дает

$$\boldsymbol{D} = -\frac{1}{v}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{H}_0)\exp\left[i\omega\left(t-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}}{v}\right)\right], \qquad (\text{П}8.11)$$

откуда, учитывая выражение (П8.9), имеем

$$\boldsymbol{D} = -\frac{1}{v}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{H}). \qquad (\text{П}8.12)$$

Следовательно, мы должны направить $\boldsymbol{D}$ на фиг. 86 перпендикулярно $\boldsymbol{l}$ и $\boldsymbol{H}$. *Таким образом, мы получили, что волны* $\boldsymbol{D}$ *и* $\boldsymbol{H}$ *являются чисто поперечными.* Векторы $\boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{l}$ лежат в одной плоскости, так как все они перпендикулярны $\boldsymbol{H}$.

Подставляя выражение для $\boldsymbol{H}$ из (П8.8) в (П8.12), получаем

$$\boldsymbol{D} = -\frac{1}{\mu_0 v^2}[\boldsymbol{l}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{E})]. \qquad (\text{П}8.13)$$

Используем теперь правило развертывания тройного векторного произведения, согласно которому

$$\boldsymbol{l}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{E}) = \boldsymbol{l}(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{E}) - \boldsymbol{E}(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{l}) = \boldsymbol{l}(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{E}) - \boldsymbol{E}.$$

Следовательно, уравнение (П8.13) эквивалентно уравнению

$$\mu_0 v^2\boldsymbol{D} - \boldsymbol{E} + \boldsymbol{l}(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{E}) = 0. \qquad (\text{П}8.14)$$

Итак, задавшись уравнениями Максвелла (П8.1) и условиями (П8.2), мы для случая плоских волн получили уравнение (П8.14). Оно не зависит от связи между $\boldsymbol{D}$ и $\boldsymbol{E}$, определяемой свойствами среды. Теперь положим, что $\boldsymbol{D}$ и $\boldsymbol{E}$ связаны между собой тензором диэлектрической проницаемости. Если перейти к главным осям тензора диэлектрической проницаемости (при этом $E_1 = D_1/\varkappa_1$ и т. д.), то (П8.14) записывается в индексной форме в виде уравнения

$$\mu_0 v^2 D_1 - \frac{D_1}{\varkappa_1} + l_1(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{E}) = 0$$

и двух аналогичных уравнений. Следовательно,

$$D_1 = \frac{l_1(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{E})}{\dfrac{1}{\varkappa_1} - \mu_0 v^2}; \qquad (\text{П}8.15)$$

аналогичные уравнения получаются для D_2 и D_3.

Так как векторы $\boldsymbol{D}$ и $\boldsymbol{l}$ взаимноперпендикулярны, скалярное произведение $\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{l}$ равно нулю. Выразим это произведение через компоненты $\boldsymbol{D}$, заданные в виде (П8.15) и двух аналогичных уравнений. Разделив эти выражения на скалярное произведение $(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{E})$, которое в общем случае не равно нулю, мы получаем

$$\frac{l_1^2}{\dfrac{1}{\varkappa_1} - \mu_0 v^2} + \frac{l_2^2}{\dfrac{1}{\varkappa_2} - \mu_0 v^2} + \frac{l_3^2}{\dfrac{1}{\varkappa_3} - \mu_0 v^2} = 0. \qquad (\text{П}8.16)$$

Это уравнение определяет волновую скорость v через направляющие косинусы l_1, l_2, l_3 волновой нормали. Заметим, что (П 8.16) является квадратным уравнением относительно v^2. Следовательно, в общем случае для каждой системы l_1, l_2, l_3 имеются два значения v^2. Если мы будем рассматривать только положительные значения v, то получаем, что для каждого направления l имеются две волны с разными скоростями. Положив $[l_1, l_2, l_3] = [1, 0, 0]$, находим две скорости в направлении оси x_1:

$$v = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varkappa_2}} \quad \text{и} \quad v = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varkappa_3}}.$$

Определим теперь *три главные скорости* следующим образом:

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varkappa_1}}, \quad v_2 = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varkappa_2}}, \quad v_3 = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varkappa_3}}.$$

Уравнение (П 8.16) можно переписать в более простой форме:

$$\frac{l_1^2}{v_1^2 - v^2} + \frac{l_2^2}{v_2^2 - v^2} + \frac{l_3^2}{v_3^2 - v^2} = 0. \qquad (\text{П } 8.17)$$

Так как $c = 1/\sqrt{\mu_0 \varkappa_0}$, то три главные скорости можно выразить в виде

$$v_1 = \frac{c}{\sqrt{K_1}}, \quad v_2 = \frac{c}{\sqrt{K_2}}, \quad v_3 = \frac{c}{\sqrt{K_3}},$$

или

$$v_1 = \frac{c}{n_1}, \quad v_2 = \frac{c}{n_2}, \quad v_3 = \frac{c}{n_3},$$

где n_1, n_2, n_3 — три главных показателя преломления (см. стр. 280 — 281).

Доказательство построения индикатрисы. Докажем теперь, что две волновые скорости, связанные с данной волновой нормалью, задаются построением индикатрисы, описанным на стр. 280.

Пусть $v^2 = v'^2$ и $v^2 = v''^2$ — два корня уравнения (П 8.17). Тогда, если это уравнение записать в виде $f(v^2) = 0$, имеем

$$f(v'^2) = 0 \quad \text{и} \quad f(v''^2) = 0. \qquad (\text{П } 8.18)$$

Из уравнения (П 8.15) следует, что направляющие косинусы D пропорциональны

$$\frac{l_1}{v_1^2 - v^2}, \quad \frac{l_2}{v_2^2 - v^2}, \quad \frac{l_3}{v_3^2 - v^2}. \qquad (\text{П } 8.19)$$

Подставляя v'^2 и v''^2 вместо v^2 в (П 8.19), получаем направляющие косинусы двух направлений D, связанных с волновой нормалью $[l_1, l_2, l_3]$. Обозначим эти системы направляющих косинусов через

(a', b', c') и (a'', b'', c'') соответственно. Чтобы доказать, что эти два направления взаимно перпендикулярны, заметим, что

$$a'a''+b'b''+c'c''=\frac{l_1^2}{(v_1^2-v'^2)(v_1^2-v''^2)}+\frac{l_2^2}{(v_2^2-v'^2)(v_2^2-v''^2)}+$$
$$+\frac{l_3^2}{(v_3^2-v'^2)(v_3^2-v''^2)}=\frac{f(v'^2)-f(v''^2)}{v'^2-v''^2}=0$$

в соответствии с (П 8.18).

Теперь перейдем к новым осям, заданным таблицей

	x_1	x_2	x_3
x_1'	a'	b'	c'
x_2'	a''	b''	c''
x_3'	l_1	l_2	l_3.

Тогда x_3' есть направление волновой нормали, а x_1' и x_2' — два направления $\boldsymbol{D}$. Докажем теперь, что x_1' и x_2' — главные оси центрального сечения индикатрисы, перпендикулярного x_3', и что длины полуосей этого эллипса равны показателям преломления c/v' и c/v''.

Уравнение индикатрисы (см. стр. 281) записывается в виде

$$B_1x_1^2+B_2x_2^2+B_3x_3^2=1,$$

причем $B_1=(v_1/c)^2$ и т. д. После перехода к новым осям это уравнение принимает вид

$$B'_{ij}x'_ix'_j=1, \qquad (\text{П } 8.20)$$

где

$$B'_{ij}=a_{ik}a_{jl}B_{kl}. \qquad (\text{П } 8.21)$$

Эллиптическое сечение, нормальное к x_3', находим, полагая $x_3'=0$. Тогда

$$B'_{11}x'^2+2B'_{12}x'_1x'_2+B'_{22}x'^2_2=1. \qquad (\text{П } 8.22)$$

Из уравнения (П 8.21) имеем

$$B'_{12}=a_{1k}a_{2l}B_{kl}=a_{11}a_{21}B_{11}+a_{12}a_{22}B_{22}+a_{13}a_{23}B_{33}=$$
$$=a'a''B_1+b'b''B_2+c'c''B_3. \qquad (\text{П } 8.23)$$

Используя выражения для направляющих косинусов, заданные в виде (П 8.19), и считая B_1 пропорциональным v_1^2 и т. д., мы получаем, что правая часть уравнения (П 8.23) пропорциональна

$$\frac{l_1^2v_1^2}{(v_1^2-v'^2)(v_1^2-v''^2)}+\frac{l_2^2v_2^2}{(v_2^2-v'^2)(v_2^2-v''^2)}+\frac{l_3^2v_3^2}{(v_3^2-v'^2)(v_3^2-v''^2)}.$$

Нетрудно убедиться, что это выражение идентично выражению

$$\frac{v'^2 f(v'^2) - v''^2 f(v''^2)}{v'^2 - v''^2},$$

которое равно нулю согласно (П 8.18). Следовательно, $B'_{12} = 0$. Отсюда следует, что x'_1 и x'_2 — главные оси эллиптического сечения.

Мы должны теперь показать, что длины полуосей этого сечения равны показателям преломления. Длина полуоси, параллельной x'_1, равна $1/\sqrt{B'_{11}}$, а мы хотим показать, что она равна c/v'. Иными словами, мы должны доказать, что $c^2 B'_{11} = v'^2$.

Мы имеем

$$B'_{11} = a_{1k} a_{1l} B_{kl} = a_{11}^2 B_{11} + a_{12}^2 B_{22} + a_{13}^2 B_{33} = a'^2 B_1 + b'^2 B_2 + c'^2 B_3,$$

или

$$c^2 B'_{11} = \frac{\dfrac{l_1^2 v_1^2}{(v_1^2 - v'^2)^2} + \dfrac{l_2^2 v_2^2}{(v_2^2 - v'^2)^2} + \dfrac{l_3^2 v_3^2}{(v_3^2 - v'^2)^2}}{\dfrac{l_1^2}{(v_1^2 - v'^2)^2} + \dfrac{l_2^2}{(v_2^2 - v'^2)^2} + \dfrac{l_3^2}{(v_3^2 - v'^2)^2}}.$$

Положив в этом выражении $c^2 B'_{11} = v'^2$, после перемножения и приведения подобных членов получим

$$\frac{l_1^2}{(v_1^2 - v'^2)^2}(v_1^2 - v'^2) + \frac{l_2^2}{(v_2^2 - v'^2)^2}(v_2^2 - v'^2) + \frac{l_3^2}{(v_3^2 - v'^2)^2}(v_3^2 - v'^2) = 0.$$

Из (П 8.17) следует, что это уравнение выполняется. Таким образом,

$$c^2 B'_{11} = v'^2,$$

аналогично,

$$c^2 B'_{22} = v''^2,$$

что и требовалось доказать.

Направление луча для волны есть направление, в котором распространяется ограниченный участок волнового фронта (см. стр. 284). Оно является направлением потока энергии и поэтому задается *вектором Пойнтинга* [1])

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}. \qquad (\text{П } 8.24)$$

Следовательно, вектор $\boldsymbol{S}$ перпендикулярен $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{H}$, как показано на фиг. 86. Отметим, что углы между $\boldsymbol{D}$ и $\boldsymbol{E}$, а также между $\boldsymbol{S}$ и $\boldsymbol{l}$ одинаковы.

[1]) См., например, [1]. (См. также [117]. — *Прим. перев.*)

ОТВЕТЫ НА ЗАДАЧИ И ПОЯСНЕНИЯ

Глава I

1. Нет, потому что они преобразуются не как компоненты вектора.

2. Принцип Неймана применяется к *симметрии* физического свойства. Симметрия рентгенограммы подчиняется принципу Неймана и зависит от точечной группы объекта. Пространственная группа определяется не из симметрии рентгенограммы, а по характерным погасаниям рефлексов.

3а.

$$\begin{bmatrix} 25\cdot 10^7 & 0 & 0 \\ 0 & 4\cdot 10^7 & 0 \\ 0 & 0 & 16\cdot 10^7 \end{bmatrix} ом^{-1}\cdot м^{-1};$$

x_i' должны быть главными осями.

3д. Используя уравнение (1.32) и значения направляющих косинусов по отношению к осям x_i', получаем $\sigma = 7\cdot 10^7\ ом^{-1}\cdot м^{-1}$. (С другой стороны, замечая симметрию между Ox_2 и OP, получаем $\sigma = \sigma_{22}$.)

3ж. $\sqrt{76}\cdot 10^7\ а/м^2$; направляющие косинусы $[0, -1/\sqrt{76}, 5\sqrt{3/76}]$, т. е. вектор j лежит в плоскости x_2x_3 под углом 6° 36′ к оси Ox_3 и 83° 24′ к оси $-Ox_2$.

3и. Они должны быть параллельны.

Глава II

1. Используя закон преобразования вектора, уравнение (2.6) и свойство δ_{jk}, получаем

$$p_i p_i = a_{ji}p_j'a_{ki}p_k' = \delta_{jk}p_j'p_k' = p_k'p_k'.$$

2. Обращаясь к фиг. 14, *б*, имеем

$$\begin{vmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{12} & S_{22} \end{vmatrix} = S_{11}S_{22} - S_{12}^2 = OC^2 - r^2,$$

где r — радиус окружности. Эта величина есть квадрат длины касательной к окружности, проведенной из точки O, и, следовательно, является инвариантом.

4. а) $\begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 \\ 0 & 20 & 0 \\ 0 & 0 & 43 \end{bmatrix}$ (Поворачиваем на 19° вокруг x_3 от x_2 к x_1.)

б) $\begin{bmatrix} -9 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 10 \end{bmatrix}$ (Поворачиваем на 30° вокруг x_3 от x_1 к x_2.)

в) $\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{bmatrix}$ (Поворачиваем на 45° вокруг x_3 от x_2 к x_1.)

г) $\begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ (Поворачиваем на 26° 34′ вокруг x_2 от x_3 к x_1.)

5. Необходимо повернуть на угол 53° 38′ или —82° 16′ вокруг x_3 от x_1 к x_2.

Глава III

1. Произведенная работа равна:

1) $\frac{1}{2}\mu_{11}H_1^2 + \frac{1}{2}\mu_{22}H_2^2 + \mu_{12}H_1H_2$,

2) $\frac{1}{2}\mu_{22}H_2^2 + \frac{1}{2}\mu_{11}H_1^2 + \mu_{21}H_2H_1$.

2. $\psi = 1{,}3 \cdot 10^{-5}$ (в рационализированной системе единиц).

3. В направлении поля $\psi = -25{,}6 \cdot 10^{-6}$; $\theta = 53{,}7°$.

4. Сила равна $1{,}47 \cdot 10^{-5}$ *н* (= 1,47 *дн*).

Направляющие косинусы силы: (0,29; 0,81; —0,52). Необходимо иметь в виду, что для статического магнитного поля в свободном пространстве $\operatorname{div} \boldsymbol{H} = 0$ и $\operatorname{rot} \boldsymbol{H} = 0$.

Механический момент равен $3{,}1 \cdot 10^{-8}$ *м · н* и действует вправо (если система координат правая) вокруг оси (— 0,573; 0,817; 0,082) (Этот момент примерно равен моменту, создаваемому грузом массой 3 *мг*, действующим на плечо длиной 1 *мм*.)

Глава V

1. $\sigma_{ij} = \sigma\delta_{ij} + \sigma^*_{ij}$, где $\sigma^*_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\sigma_{kk}$ и $\sigma = \frac{1}{3}\sigma_{kk}$; $\sigma\delta_{ij}$ — гидростатическое давление. Компоненты σ^*_{ij} обладают тем свойством, что сумма компонент, стоящих на главной диагонали (σ^*_{ii}), равна нулю. Преобразуем σ^*_{ij} так, чтобы члены, стоящие на главной диагонали, исчезали. Делается это следующим образом. Пусть σ^*_{11} и σ^*_{22} имеют противоположные знаки. Поворачиваем систему координат вокруг Ox_3 до тех пор, пока не окажется, что $\sigma^*_{11} = 0$ (построение окружности Мора). Затем поворачиваем систему координат вокруг новой оси Ox_1 до тех пор, пока не окажется, что $\sigma^*_{22} = 0$. При этом компонента σ^*_{11} остается равной нулю, а следовательно, компонента σ^*_{33} должна быть также равна нулю. Гидростатическое давление $\sigma\delta_{ij}$ не изменяется при преобразовании осей. Таким образом, требуемое свойство доказано.

Глава VI

1. Направления главных деформаций получаются поворотом осей на угол 22,5° вокруг Ox_2 от $+Ox_3$ к $+Ox_1$. Значения главных деформаций

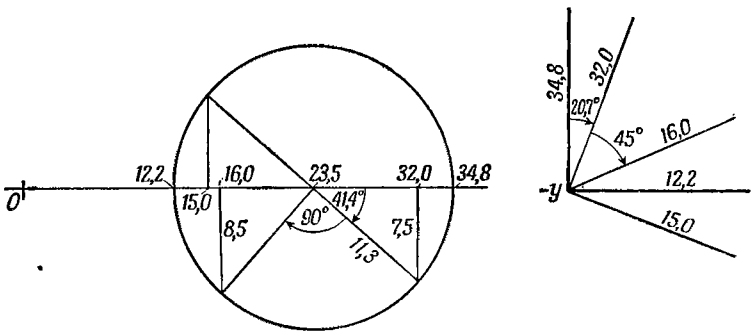
$$(9{,}24;\ 6;\ 0{,}76) \cdot 10^{-6}.$$

Далее, ω_{ij} представляет собой поворот на $\sqrt{5}\cdot 10^{-6}$ *рад* вправо (если система координат правая) вокруг направления $(0, 2/\sqrt{5}, 1/\sqrt{5})$.

2. $2\Delta T\sqrt{\alpha_{31}^2+\alpha_{23}^2}$.

3. Указание: разложить радиус-вектор и перемещение его конца на компоненты вдоль главных осей.

4. Главные оси расположены параллельно и перпендикулярно Oz ($\pm 2°$); $\alpha_1 = 29{,}0\cdot 10^{-6}$ *град*$^{-1}$ ($\perp Oz$); $\alpha_3 = 7{,}5\cdot 10^{-6}$ *град*$^{-1}$ ($\| Oz$).



Фиг. 87. Пояснение к решению задачи 5 гл. VI.

Цифры указывают значение $\alpha\cdot 10^6$ *град*$^{-1}$. Слева представлено построение окружности Мора; справа даны значения теплового расширения для различных направлений; главные направления теплового расширения выделены жирными линиями.
При построении чертежей использованы правила, описанные на стр. 63.

5. $41{,}0\cdot 10^{-6}$; $34{,}8\cdot 10^{-6}$; $12{,}2\cdot 10^{-6}$ *град*$^{-1}$; 90°; 20,7°; 69,3° (фиг. 87).

6. $\alpha_1 = 9{,}9\cdot 10^{-6}$; $\alpha_2 = 17{,}3\cdot 10^{-6}$; $\alpha_3 = 34{,}7\cdot 10^{-6}$ *град*$^{-1}$.

Глава VIII

1. См. табл. 9.

2. Рассмотрим единичный куб. Из формы матрицы податливостей видно, что сдвиговые напряжения, приложенные к граням {100}, не вызывают изменения объема. Нормальные напряжения, действующие на грани {100}, записываются в виде l_1^2T, l_2^2T, l_3^2T, где (l_1, l_2, l_3) — направляющие косинусы направления растяжения. Изменение объема, вызываемое этими компонентами, выражается в виде

$$\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3 = (s_{11}+2s_{12})\left(l_1^2T+l_2^2T+l_3^2T\right) = (s_{11}+2s_{12})T.$$

Глава IX

1.
$$AB = \begin{Vmatrix} a_1b_1+c_1b_2 \\ a_2b_1+c_2b_2 \\ a_3b_1+c_3b_2 \end{Vmatrix}.$$

2. $\begin{Vmatrix} 5 & 19 \\ -9 & 25 \\ -5 & 37 \end{Vmatrix}$. $\begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 & 3 \\ 5 & 0 & -10 & 0 \end{pmatrix}$.

3. (11) и $\begin{pmatrix} 8 & 12 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$.

Глава XI

1. Если α — угол между осью стержня и осью третьего порядка (x_3), то $\operatorname{tg}\alpha = \sqrt{r_3/r_1}$; $\alpha = 37{,}2°$; $\sin\theta_{\text{макс.}} = (r_1 - r_3)/(r_1 + r_3)$; $\theta_{\text{макс.}} = 15{,}7°$ (благодаря использованию построения окружности Мора устраняется необходимость в дифференцировании).

Глава XIII

1. Согласно принципу, сформулированному на стр. 291, эллипсоид деформаций в кубических кристаллах при гидростатическом сжатии должен быть сферой. Мы имеем

$$\Delta B_1 = \Delta B_2 = \Delta B_3 = (p_{11} + 2p_{12})\,\varepsilon, \quad \Delta B_4 = \Delta B_5 = \Delta B_6 = 0.$$

Следовательно,

$$\Delta n = -\frac{n^3}{2}(p_{11} + 2p_{12})\frac{\Delta v}{3v} = \frac{n^3}{2}\,\frac{p_{11} + 2p_{12}}{3}\,\frac{\Delta\rho}{\rho}.$$

Глава XIV

1. Вращение равно нулю, если оптические оси лежат в плоскости, перпендикулярной x или y. Вращения равны и противоположны по направлению, если оптические оси лежат в плоскости, перпендикулярной z.

2. Одна ось лежит в плоскости симметрии, две другие — под углом 45° к плоскости симметрии. Приведенный к главным осям тензор записывается в виде

$$\begin{bmatrix} +\sqrt{g_{12}^2 + g_{23}^2} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{g_{12}^2 + g_{23}^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

причем за третью главную ось берется ось, лежащая в плоскости симметрии

ЛИТЕРАТУРА

I. Краткий перечень работ по кристаллофизике

Voigt W., Die fundamentalen physikalischen Eigenschaften der Krystalle, Leipzig, 1898.

Voigt W., Lehrbuch der Kristallphysik, 1-e Aufl., Leipzig, 1910.

Wooster W. A., A text-book on crystal physics, Cambridge, 1938, 1949.

Cady W. G., Piezoelectricity, New York, 1946. (Имеется перевод: У. Кэди, Пьезоэлектричество, ИЛ, 1949.) [Эта книга посвящена главным образом пьезоэлектричеству, но включает также много сведений по близким вопросам кристаллофизики.]

Boas W., Mackenzie J. K., Anisotropy in metals, Progr. Met. Phys., 2, 90 (1950).

Smith C. S., Macroscopic symmetry and properties of crystals, Solid State Physics, vol. 6, New York, 1958, p. 175. [Содержание этого отличного обзора охватывает часть вопросов, рассмотренных в данной книге. Полезной его чертой является то, что для ряда конкретных физических свойств обсуждаются микроскопические атомные модели, показывающие причину возникновения анизотропии этих свойств. Поэтому можно рекомендовать параллельное чтение книги и обзора.]

Wooster W. A., Experimental crystal physics, Oxford, 1957. (Имеется перевод: В. А. Вустер, Практическое руководство по кристаллофизике, ИЛ, 1959.) [Курс экспериментальных упражнений по кристаллофизике, рассчитанный на преподавателей.]

II. Книги и статьи, цитированные в тексте

1. Abraham M., Becker R., Klassische Elektrizität und Magnetismus, Berlin, 1932. (Имеется перевод: М. Абрагам, Р. Беккер, Теория электричества, Л.—М., 1939.)
2. Aitken A. C., Determinants and matrices, Edinburgh, 1948.
3. Bates L. F., Rep. Progr. Phys., 3, 185 (1937).
4. Bates L. F., Modern magnetism, 3d ed., Cambridge, 1951.
5. Becker R., Döring W., Ferromagnetismus, Berlin, 1939.
6. Bell R. J. T., An elementary treatise on coordinate geometry of three dimensions, 2d ed., London, 1937.
7. Bhagavantam S., Proc. Ind. Acad. Sci., **16A**, 359 (1942).
8. Bhagavantam S., Acta Cryst., **5**, 591 (1952).
9. Bhagavantam S., Proc. Ind. Acad. Sci., **41A**, 72 (1955).
10. Bhagavantam S., Krishna Rao K. V., Acta Cryst., **6**, 799 (1953).
11. Bhagavantam S., Krishna Rao K. V., Current Sci., **23**, 257 (1954).
12. Bhagavantam S., Suryanarayana D., Proc. Ind. Acad. Sci., **26A**, 97 (1947).
13. Bhagavantam S., Suryanarayana D., Acta Cryst., **2**, 21 (1949).
14. Bhagavantam S., Suryanarayana D., Acta Cryst., **2**, 26 (1949).

15. Bhagavantam S., Venkatarayudu T., Theory of groups and its application to physical problems, 2d ed., Waltair, 1951. (Имеется перевод: С. Багавантам, Т. Венкатарайуду, Теория групп и ее применение к физическим проблемам, ИЛ, 1959.)
16. Birch F., Phys, Rev., **71**, 809 (1947).
17. Boas W., Mackenzie J. K., Progr. Met. Phys., **2**, 90 (1950).
18. Bond W. L., Bell System Techn. Journ., **22**, 1 (1943).
19. Born M., Optik, Berlin, 1933. (Имеется перевод: М. Борн, Оптика, Харьков — Киев, 1937.)
20. Böttcher C. J. F., Theory of electric polarisation, Amsterdam, 1952, ch. V.
21. Bruhat G., Grivet P, Journ. Phys. Rad., ser. 7, **6**, 12 (1935).
22. Burstein E., Smith P. L., Phys. Rev., **74**, 229 (1948).
23. Burstein E., Smith P. L., Phys. Rev., **74**, 1880 (1948).
24. Cady W. G., Piezoelectricity, New York, 1946. (Имеется перевод: У. Кэди, Пьезоэлектричество, ИЛ, 1949.)
25. Callen H. B., Phys. Rev., **73**, 1349 (1948).
26. Carpenter R. O'B., Journ. Opt. Soc. Amer., **40**, 225 (1950).
27. Casimir H. B. G., Rev. Mod. Phys., **17**, 343 (1945).
28. Condon E. U., Rev. Mod. Phys., **9**, 432 (1937).
29. Cookson T. W. Phys. Rev., **47**, 194 (1935).
30. De Groot S. R., Thermodynamics of irreversible processes, Amsterdam, 1951.
31. Devonshire A. F., Phil. Mag., Suppl. **3**, 85 (1954).
32. Domenicali C. A., Phys. Rev., **92**, 877 (1953).
33. Donnay J. D. H., Amer Mineralogist, **32**, 52, 477 (1947).
34. Eddington A. S., The mathematical theory of relativity, Cambridge, 1923, § 20, 21. (Имеется перевод: А. Эддингтон, Математическая теория относительности, Харьков—Киев, 1938.)
35. Ehrenfest P., Rutgers A. J., Proc. Acad. Amsterdam, **32**, 698, 883 (1929).
36. Eisenhart L. P., Coordinate geometry, Boston, 1939.
37. Epstein P. S., Textbook of themodynamics, New York (1937). (Имеется перевод: П. Эпштейн, Курс термодинамики, М.—Л., 1948.)
38. Ferrar W. L. Algebra, a text-book of determinants, matrices and algebraic forms, Oxford, 1941.
39. Fieschi R., Fumi F. G., Nuovo Cimento, **10**, 865 (1953).
40. Fumi F. G., Phys. Rev., **83**, 1274 (1951).
41. Fumi F. G., Acta Cryst., **5**, 44 (1952).
42. Fumi F. G., Phys. Rev., **86**, 561 (1952).
43. Fumi F. G., Acta Cryst., **5**, 691 (1952).
44. Fumi F. G., Nuovo Cimento, **9**, 739 (1952).
45. Goens E., Ann. d. Phys., **16**, 793 (1933).
46. Guggenheim E. A., Proc. Roy. Soc., **155A**, 49, 70 (1936).
47. Hartree D. R., Numerical analysis, Oxford; 1952.
48. Hartshorne N. H., Stuart A., Crystals and the polarising microscope, 2d ed., London, 1950.
49. Hearmon R. F. S., Rev. Mod. Phys., **18**, 409 (1946).
50. Hearmon R. F. S., Acta Cryst., **6**, 331 (1953).
50a. Hearmon R. F. S., Phil. Mag. Suppl., **5**, 323 (1956).
51. Heckmann G., Erg. exakt. Naturwiss., **4**, 140 (1925).
52. Higman B., Applied group-theoretic and matrix methods, Oxford, 1955.
53. Hoek H., Physica, 8, 209 (1941).
53a. Huntington H. B., The elastic constants of crystals, Solid State Physics, vol. 7, New York, 1958, p. 213. [Имеется перевод: Г. Хантингтон, Усп. физич. наук, **74**, 2, 302, 461 (1961).]

54. International Critical Tables, New York, 1929.
55. International tables for X-ray crystallography, v. I, Birmingham, 1952.
56. Jahn H. A., Zs. Kristallogr., **98**, 191 (1937).
57. Jahn H. A., Acta Cryst., **2**, 30 (1949).
58. Jeffreys H., Cartesian tensors, Cambridge, 1931.
59. Joos G., Theoretical physics, Glasgow, 1934, p. 355.
60. Koenig F. O., Journ. phys. Chem., **41**, 597 (1937).
61. Landolt-Börnstein Physikalisch-Chemische Tabellen, Berlin, 1923, 1936.
62. Lonsdale K., Rep. Progr. Phys., **4**, 368 (1937).
63. Maris H. B., Journ. Opt. Soc. Amer., **15**, 194 (1927).
64. Mason W. P., Phys. Rev., **69**, 173 (1946).
65. Mason W. P., Phys. Rev., **82**, 715 (1951); **85**, 1065 (1952).
66. Mason W. P., Piesoelectric crystals and their applications to ultrasonics, New York, 1950. (Имеется перевод: У. Мэзон, Пьезоэлектрические кристаллы и их применения в ультраакустике, ИЛ, 1952.)
67. McGreevy T., The M. K. S. system of units, London, 1953.
68. Mueller H., Phys. Rev., **47**, 947 (1935).
69. Münster C., Szivessy G., Phys. Zs., **36**, 101 (1935).
70. Narasimhamurty T. S., Current Sci., **23**, 149 (1954).
71. Narasimhamurty T. S., Proc. Ind. Acad. Sci., **40A**, 167 (1954).
72. Onsager L., Phys. Rev., **37**, 405 (1931).
73. Onsager L., Phys. Rev., **38**, 2265 (1931).
74. Phillips F. C., An introduction to crystallography, London, 1946.
75. Pockels F., Lehrbuch der Kristalloptik, Leipzig, 1906.
76. Ramachandran G. N., Proc. Ind. Acad. Sci., **25A**, 208 (1947).
77. Raman C. V., Viswanathan K. S., Proc. Ind. Acad. Sci., **42A**, 51 (1955).
78. Raman C. V., Krishnamurti D., Proc. Ind. Acad. Sci., **42A**, 111 (1955).
79. Sas R. K., Pidduck F. B., The metre-kilogram-second system of electrical units, London, 1947.
80. Scarborough J. B., Numerical mathematical analysis, 2d ed., Baltimore, 1950, p. 399.
81. Schmid E., Boas W., Kristallplastizität, Berlin, 1935. (Имеется перевод: Е. Шмид, В. Боас, Пластичность кристаллов, М., 1938.)
82. Sears F. W., Principles of physics II, Electricity and magnetism, Cambridge, 1946.
83. Slater J. C., Frank N. H., Electromagnetism, New York, 1947.
84. Soret C., Arch de Genève, **29**, 322 (1893).
85. Soret C., Arch. de Genève, **32**, 631 (1894).
86. Standards on piezoelectric crystals, Proc. Inst. Radio Eng., **37**, 1378 (1949).
87. Stratton J. A., Electromagnetic theory, New York, 1941. (Имеется перевод: Дж. А. Стрэттон, Теория электромагнетизма, М.—Л., 1948.)
88. Szivessy G., в книге Handbuch der Physik, Bd. **20**, Berlin, 1928, S. 804.
89. Szivessy G., Münster C., Ann. d. Phys., **20**, 703 (1934).
90. Tutton A. E. H., Crystallography and practical crystal measurement, v. 2, London, 1922, p. 1308.
91. Van Dyke K. S., Gordon G. D., A manual of piezoelectric data, supplementary volume, 2d ed., privately circulated.
92. Voigt W., Gött. Nachr., **87** (1903).
93. Voigt W., Lehrbuch der Kristallphysik, 1-e Aufl., Leipzig, 1910.
94. West C. D., Makas A. S., Journ. Chem. Phys., **16**, 427 (1948).
95. Woods F. S., Advanced calculus, Boston, 1934.
96. Wooster W. A., A text-book on crystal physics, Cambridge, 1938, 1949.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА [1])

97. Белов Н. В., Труды Института кристаллографии, вып. 6, 25 (1951).
98. Белов Н. В., Труды Института кристаллографии, вып. 9, 21 (1954).
99. Белов Н. В., Структурная кристаллография, Изд. АН СССР, 1951.
100. Белов Н. В., Кристаллография, **3**, вып. 6, 765 (1958); **4**, вып. 2, 268 (1959).
101. Боровик-Романов А. С., ЖЭТФ, **36**, вып. 6, 1954 (1959); **38**, вып. 4, 1088 (1960).
102. Делоне Б., Падуров Н., Александров А., Математические основы структурного анализа кристаллов, М.—Л., 1934.
103. Желудев И. С., Кристаллография, **1**, вып. 1, 95 (1956).
104. Иоффе А. Ф., Физика полупроводников, Изд. АН СССР, М., 1957.
105. Кочин Н. Е., Векторное исчисление и начала тензорного исчисления, М., 1965.
106. Курош А. Г., Курс высшей алгебры, М., 1955.
107. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика, М., 1964.
108. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Механика сплошных сред, М.—Л., 1953.
109. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Электродинамика сплошных сред, М.—Л., 1959.
110. Лехницкий С. Г., Теория упругости анизотропного тела, М.—Л., 1950.
111. Любарский Г. Я., Теория групп и ее применение в физике, М.—Л., 1959.
112. Мусхелишвили Н. И., Аналитическая геометрия, М.—Л., 1947.
113. Окунев Л. Я., Высшая алгебра, М.—Л., 1949.
114. Попов Г. М., Шафрановский И. И., Кристаллография, М., 1964.
115. Сена Л. А., Единицы измерения физических величин, М.—Л., 1951.
116. Смоленский Г. А., Изв. АН СССР, сер. физич., **21**, 333 (1957).
117. Тамм И. Е., Основы теории электричества, М., 1957.
118. Шубников А. В., Изв. АН СССР, сер. физич. 13, № 3, 376 (1949).
119. Шубников А. В., Оптическая кристаллография, М.—Л., 1950.
120. Шубников А. В., Кристаллография, **1**, вып. 1, 95 (1956).
121. Шубников А. В., Усп. физич. наук, **59**, вып. 4, 591 (1956).
122. Шубников А. В., Основы оптической кристаллографии, М., 1958.
123. Шубников А. В., Флинт Е. Е., Бокий Г. Б., Основы кристаллографии, Изд. АН СССР, М., 1940.
124. Forsbergh P. W., в книге Handbuch der Physik, Bd. XVII, Berlin, 1956.
125. Futama H., Pepinsky R., Journ. Phys. Soc. Japan, **17**, 725 (1962).
126. Jona F., Shirane G., Ferroelectric crystals, Oxford, 1962. (Имеется перевод: Ф. Иона, Д. Ширане, Сегнетоэлектрические кристаллы, Изд. «Мир», 1965.)
127. Кенциг В., Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики, ИЛ, 1960.
128. Piezoelectricity, ed. by Bechman, London, 1957.

[1]) Составлена переводчиком.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие переводчика 5
Предисловие 9
Введение 11

ЧАСТЬ I
ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Глава I. Основы кристаллофизики 17
§ 1. Скаляры, векторы и тензоры второго ранга 17
1. Запись с индексами суммирования (21)
§ 2. Преобразования 23
1. Преобразования осей координат (23). 2. Преобразование компонент вектора (24). 3. Преобразование координат точки (25). 4. Преобразование компонент тензора второго ранга (26). 5. Закон преобразования произведения координат (28).
§ 3. Определение тензора 29
1. Различие между преобразованиями матрицы (a_{ij}) и тензора $[T_{ij}]$ (30). 2. Симметричные и антисимметричные тензоры (30).
§ 4. Характеристическая поверхность второго порядка 31
1. Главные оси (33). 2. Упрощение уравнений при приведении к главным осям (34).
§ 5. Влияние симметрии кристаллов на их свойства 35
1. Влияние симметрии кристалла на его свойства, описываемые тензорами второго ранга (37).
§ 6. Величина, характеризующая свойство в данном направлении . 41
1. Определение (41). 2. Аналитические выражения (41).
§ 7. Геометрические свойства характеристической поверхности . . 43
1. Длина радиуса-вектора (43). 2. Свойство радиуса-вектора и нормали (44). 3. Сводка геометрических свойств (46).
Резюме 47
Задачи 49

Глава II. Преобразования и тензоры второго ранга 51
§ 1. Преобразование осей координат 51
1. Соотношения между направляющими косинусами (51). 2. Значение $|a_{ij}|$ (53).

§ 2. Векторное произведение. Полярные и аксиальные векторы . . 56
§ 3. Главные оси тензора 59
§ 4. Построение окружности Мора 62
1. Поворот вокруг главных осей (62). 2. Поворот вокруг произвольной оси (65).
§ 5. Эллипсоид значений тензора 66
Резюме 67
Задачи 69

ЧАСТЬ II

РАВНОВЕСНЫЕ СВОЙСТВА

Глава III. Парамагнитная и диамагнитная восприимчивости . . . 73
§ 1. Общие соотношения 73
§ 2. Энергия намагничивания кристалла 78
§ 3. Силы и моменты сил 80
1. Момент сил, действующий на кристалл в однородном магнитном поле (81). 2. Сила, действующая на кристалл в неоднородном магнитном поле (82). 3. Механический момент, действующий на кристалл в неоднородном магиитном поле (85).
§ 4. Магнитная восприимчивость порошка 86
Резюме 87
Задачи 88

Глава IV. Электрическая поляризация 89
§ 1. Общие соотношения 89
§ 2. Различие между электрической поляризацией и намагниченностью 91
§ 3. Соотношение между D, E и P в плоском конденсаторе . . . 94
§ 4. Энергия поляризованного кристалла 96
§ 5. Сила и момент сил, действующие на кристалл в электрическом поле 97
§ 6. Электростатическое поле в однородном анизотропном диэлектрике 97
§ 7. Пироэлектричество 99
§ 8. Сегнетоэлектричество 102
Резюме 103
Задачи 105

Глава V. Тензор напряжений 106
§ 1. Понятие напряжения 106
1. Однородное напряжение (106). 2. Неоднородное напряжение (108).
§ 2. Доказательство того, что σ_{ij} образуют тензор 111
§ 3. Поверхность напряжений 113

§ 4. Частные формы тензора напряжений 114
§ 5. Различие между тензором напряжений и тензорами, описывающими свойства кристалла 116
Резюме 116
Задачи 117

Глава VI. Тензор деформаций и тепловое расширение 118
§ 1. Одномерная деформация 118
§ 2. Двумерная деформация 119
1. Однородная двумерная деформация (123).
§ 3. Трехмерная деформация 123
1. Однородная трехмерная деформация (125). 2. Обобщение на случай неоднородной деформации (129).
§ 4. Деформация и симметрия кристалла 130
§ 5. Тепловое расширение 130
1. Конус нулевого расширения в кальците (132).
Резюме 133
Задачи 135

Глава VII. Пьезоэлектричество. Тензоры третьего ранга 137
§ 1. Прямой пьезоэлектрический эффект 137
§ 2. Уменьшение числа независимых модулей. Матричные обозначения 140
§ 3. Обратный пьезоэлектрический эффект 142
§ 4. Уменьшение числа независимых модулей из-за ограничений, налагаемых симметрией кристалла 144
1. Соображения, в основе которых лежит лишь анализ симметрии (144). 2. Аналитические методы (145).
§ 5. Результаты для всех кристаллографических классов 151
§ 6. Характеристические поверхности 155
Резюме 158
Задачи 160

Глава VIII. Упругость. Тензоры четвертого ранга 161
§ 1. Закон Гука 161
§ 2. Матричные обозначения 165
§ 3. Энергия деформированного кристалла 166
§ 4. Влияние симметрии кристалла 168
1. Дополнительные ограничения, налагаемые на упругие константы (171). 2. Соотношения между напряжениями и деформациями для изотропных материалов (174).
§ 5. Характеристические поверхности и модуль Юнга 175
§ 6. Объемная и линейная сжимаемости кристалла 177
§ 7. Соотношения между податливостями и жесткостями 178
§ 8. Численные значения упругих констант 179
Резюме 180
Задачи 182

Глава IX. **Матричный метод** 183
§ 1. Матричные и тензорные обозначения 183
§ 2. Матричная алгебра 183
1. Линейные преобразования и умножение матриц (183). 2. Сложение и вычитание матриц (186). 3. Сводка свойств матриц (186).
§ 3. Свойства кристаллов в матричной записи 186
§ 4. Две производные матрицы 188
1. Транспонирование матрицы (188). 2. Обратная матрица (189).
§ 5. Величина, характеризующая свойство в произвольном направлении 190
§ 6. Поворот осей координат 191
§ 7. Примеры вычислений с помощью матриц 192
1. Главные коэффициенты и главные направления для моноклинного кристалла. Метод наименьших квадратов (192). 2. Главные коэффициенты и главные направления для триклинного кристалла (198).
Резюме 203
Задачи 206
Глава X. **Термодинамика равновесных свойств кристаллов** . . . 207
§ 1. Тепловые, электрические и механические свойства кристалла 207
§ 2. Термодинамика термоупругих свойств 211
1. Теплота деформации и термические напряжения (215). 2. Соотношение между адиабатическими и изотермическими упругими податливостями (216).
§ 3. Термодинамика тепловых, электрических и упругих свойств . . 217
§ 4. Соотношения между коэффициентами, измеренными при различных условиях 223
1. Главные эффекты (225). 2. Сопряженные эффекты (226). 3. Численные значения коэффициентов (227). 4. Первичный и вторичный пироэлектрические эффекты (229).
Резюме 231
Задачи 232

ЧАСТЬ III

СВОЙСТВА, ХАРАКТЕРИЗУЮЩИЕ ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА

Глава XI. **Теплопроводность и электропроводность** 235
§ 1. Тензоры коэффициентов теплопроводности и теплового сопротивления 235
§ 2. Два частных случая стационарного теплового потока 238
§ 3. Общий случай стационарного теплового потока 241
1. Тепловой поток от точечного источника (243).
§ 4. Электропроводность 245
§ 5. О симметричности тензора $[k_{ij}]$ 246

§ 6. Термодинамическое рассмотрение. Принцип Онзагера 248
1. Теоретическое обоснование принципа Онзагера (252).
Резюме 253
Задачи 256
Глава XII. Термоэлектричество 257
§ 1. Термоэлектрические эффекты в изотропных проводниках . . . 257
1. Вывод соотношений Томсона (258).
§ 2. Термоэлектрические эффекты в изотропной непрерывной среде 261
1. Вывод уравнений потока (261). 2. Скорость выделения тепла (262). 3. Вывод из полученных уравнений формул для наблюдаемых термоэлектрических эффектов (264). 4. Порядок величины коэффициентов (266).
§ 3. Термоэлектрические эффекты в кристаллах 267
1. Вывод уравнений потока (267). 2. Скорость выделения тепла (268). 3. О нагревании за счет термоэлектрических эффектов (269).
Резюме 273

ЧАСТЬ IV

КРИСТАЛЛООПТИКА

Глава XIII. Естественное и искусственное двойное лучепреломление. Эффекты второго порядка 279
§ 1. Двойное лучепреломление 279
1. Индикатриса (279). 2. Влияние симметрии кристалла (281). 3. Волновая поверхность (282).
§ 2. Электрооптический эффект и фотоупругость 285
1. Электрооптический эффект. Основные положения (285). 2. Фотоупругость. Основные положения (288). 3. Общий случай (288). 4. Первичный и вторичный электрооптические эффекты (290). 5. Влияние симметрии (290). 6. Фотоупругость кубических кристаллов (297).
§ 3. Общее рассмотрение эффектов второго порядка 302
1. Термодинамическое рассмотрение (302). 2. Электрострикция и морфические эффекты (303).
Резюме 305
Задачи 307
Глава XIV. Вращение плоскости поляризации 308
§ 1. Введение 308
§ 2. Вращение плоскости поляризации и двойное лучепреломление 311
§ 3. Принцип суперпозиции 315
§ 4. Величина эффекта 317
§ 5. Тензорные свойства $[g_{ij}]$ 318
§ 6. Влияние симметрии кристалла на g_{ij} 320
Резюме 323
Задачи 325

ПРИЛОЖЕНИЯ

1. Сводка векторных обозначений и формул 329
2. Симметрия кристаллов и правила выбора осей координат 330
Решетка и элементарная ячейка (330). Плоскости решетки, кристаллические грани и направления (331). Элементы симметрии (332). Пространственные группы (333). Точечные группы и кристаллографические классы (333). Перечисление 32 точечных групп и кристаллографических классов (334). Символы $\{hkl\}$ и $\langle UVW\rangle$ (341). Кристаллографические системы (341). Выбор осей Ox, Oy, Oz (341). Оси в установке Миллера — Бравэ и в ромбоэдрической установке (342). Выбор осей Ox_1, Ox_2, Ox_3 (344). Оптически изотропные, одноосные и двуосные кристаллы (345). Литература по кристаллографии 346
3. Сводка свойств кристаллов 347
Некоторые тензоры, рассматриваемые в кристаллофизике и не включенные в табл. 22а и 22б (351). Некоторые анизотропные свойства кристаллов, непосредственно не выражаемые тензорами (351).
4. Число независимых коэффициентов для каждого из 32 кристаллографических классов 353
5. Матрицы равновесных свойств для 32 кристаллографических классов 355
6. Магнитная и электрическая энергия 363
7. Различие между изотермическими диэлектрическими проницаемостями зажатого и свободного кристаллов 365
8. Доказательство свойств индикатрисы с помощью уравнений Максвелла 366
Ответы на задачи и пояснения 372

Литература 376

Дж. Най

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

Редактор *А. А. ГУСЕВ*
Художник *М. В. Цаплин*
Худож. редактор *Е. И. Подмарькова*
Технический редактор *С. В. Приданцева*
Корректор *Н. В. Серегин*

Подписано к печати 21/I 1967 г. с матриц
Бумага $60\times90^{1}/_{16} = 12{,}13$ бум. л.
печ. л. 24,25
Уч.-изд. л. 22,1 Изд. № 2/4128
Цена 1 г. 70 к. Зак. № 517

* * *

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»
1-й Рижский пер., дом 2

* * *

Ленинградская типография № 2
имени Евгении Соколовой
Главполиграфпрома
Комитета по печати
при Совете Министров СССР,
Измайловский проспект, 29.

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»

КНИГИ ПО ФИЗИКЕ

Вышли в свет в 1966 году

Займан Дж. **Принципы теории твердого тела,** перевод с английского, 334 стр., цена 1 р. 83 к.

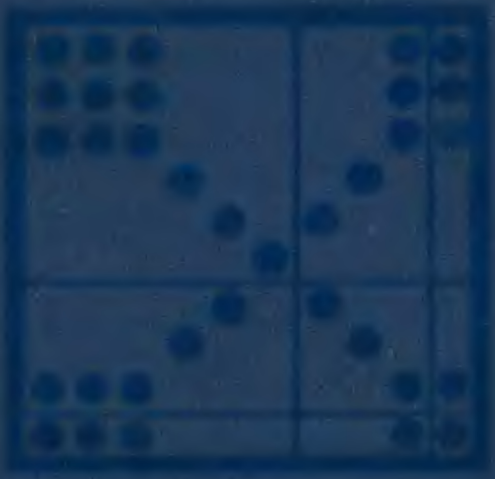
Нокс Р. **Теория экситонов,** перевод с английского, 220 стр., цена 1 р. 12 к.

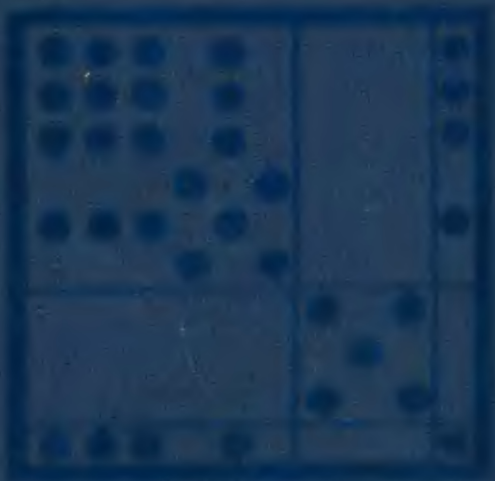
Хамермеш М. **Теория групп и ее применение к физическим проблемам,** перевод с английского, 588 стр., цена 2 р. 39 к.

Роуз А. **Основы теории фотопроводимости,** перевод с английского, 192 стр., цена 61 коп.

Уэрт Ч., Томсон Р. **Физика твердого тела,** перевод с английского, 568 стр., цена 2 р. 50 к.

Хуанг К. **Статистическая механика,** перевод с английского, 520 стр., цена 2 р. 24 к.



Дж. НАЙ

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ