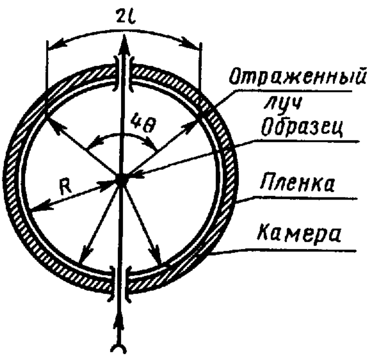

Рис. 1.63. Схема съемки рентгенограммы от поликристаллического образца в цилиндрической камере, R — радиус камеры

на рис. 1.61. С помощью рис. 1.63 установим связь между расстояниями $2l$ и брэгговскими углами отражения 2θ:

$$2l=2\theta(2\pi R/180), \qquad (1.44)$$

где l — выражается в см, а θ — в град.

В случае съемки на плоскую пленку связь между θ и радиусом дебаевского кольца (см. рис. 1.54) имеет вид,

$$\operatorname{tg} 2\theta=l/D, \qquad (1.45)$$

где D — расстояние от образца до пленки.

1.9. СИММЕТРИЯ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

Исследование физических свойств кристаллов привело ученых к заключению о том, что в группы симметрии (точечные, пространственные) кристалла как однородной непрерывной среды может входить, кроме уже известных нам элементов симметрии, также и новый характерный элемент симметрии — ось симметрии бесконечного порядка, которая имеет обозначение ∞. Примерами фигур, обладающих осями бесконечного порядка, могут служить любые тела вращения — конус, цилиндр, шар. Фигура, имеющая ось симметрии бесконечного порядка, совмещается сама с собой при повороте ее вокруг такой оси на любой угол. Точечные группы симметрии таких фигур называются *предельными, или группами Кюри.* Смысл слова «предельный» ясен из того, что тела вращения могут рассматриваться как фигуры, получающиеся в результате увеличения числа граней многогранников (пирамиды, призмы, додекаэдра), которое в пределе будет равно бесконечности. П. Кюри показал, что не только кристаллы, но и физические явления, поля, воздействия могут иметь симметрию, которая описывается семью предельными точечными группами (см. рис. 1.64):

1) группа ∞ содержит только одну ось симметрии бесконечного порядка. Такой симметрией обладает вращающийся конус. Существуют две модификации вращающегося конуса: с правым и левым вращением; обе модификации имеют одинаковую симметрию, т. е. принадлежат к одной группе. Такие фигуры, как мы видели выше, энантиоморфны. Ось вращающегося конуса

полярна — ее концы кристаллографически различны и не могут быть совмещены друг с другом с помощью элементов симметрии;

2) невращающийся конус имеет симметрию ∞mm, в нем есть одна ось симметрии бесконечного порядка и бесконечное число продольных плоскостей симметрии, пересекающихся между собой по оси конуса. Ось симметрии полярна. Полярные направления обычно изображают одноконечной прямой стрелкой, например, однородное электрическое поле имеет как раз симметрию ∞mm и вектор напряженности поля E изображается такой стрелкой;

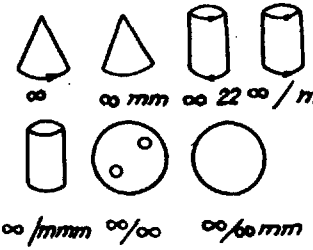

Рис. 1.64. Примеры конечных фигур, обладающих предельной симметрией

3) группа ∞/m. Такую симметрию имеет вращающийся цилиндр; в нем есть одна ось бесконечного порядка, совпадающая с геометрической осью цилиндра, одна поперечная плоскость симметрии m и центр симметрии. Ось вращающегося цилиндра неполярна. Обычно эту группу называют аксиальной. Выше мы видели, что электрические силовые линии полярны, магнитные — аксиальны (вращательны). Вращательные направления обычно изображают отрезком прямой и обтекающей ее стрелкой. Симметрией ∞/m обладают поле постоянного магнита и магнитное поле прямолинейного тока;

4) группа симметрии $\infty 22$. Такую симметрию имеет скрученный цилиндр (правый и левый), в котором имеется одна ось бесконечного порядка вдоль оси цилиндра и бесконечное число осей второго порядка, перпендикулярных оси цилиндра. Ось неполярна, т. к. оба ее конца совмещаются друг с другом поворотом вокруг осей второго порядка. Такие оси называются крутильными, или биаксиальными. На рисунках ось изображается отрезком прямой и двумя обтекающими стрелками. Фигуры с крутильными направлениями имеют две энантиоморфные модификации. Симметрия, соответствующая группе $\infty 22$, характерна для удельного вращения плоскости поляризации в анизотропной среде;

5) группа ∞/mmm. Фигурой, обладающей такой симметрией, является неподвижный цилиндр. В нем есть одна ось бесконечного порядка, совпадающая с геометрической осью цилиндра, одна поперечная плоскость m, бесконечное число продольных плоскостей симметрии m, бесконечное число осей второго порядка, перпендикулярных оси цилиндра, и центр симметрии. Ось бесконечного порядка в этой группе обозначается двухконечной стрелкой;

6) группа $\infty/\infty mm$. Описывает симметрию обычного шара, у которого имеется бесконечное число осей бесконечного поряд-

ка и плоскостей симметрии m, пересекающихся в центре шара, совпадающем с центром симметрии;

7) группа ∞/∞ описывает симметрию шара, радиусы которого вращаются в одну сторону (если смотреть со стороны поверхности шара). Такой шар не имеет плоскостей симметрии, но имеет множество осей бесконечного порядка. Шар с симметрией ∞/∞ может иметь две энантиоморфных модификации — правую и левую.

С учетом этих семи групп получается всего 39 точечных групп симметрии, при этом 32 группы симметрии кристаллических многогранников являются подгруппами предельных групп. Поскольку от симметрии среды, в которой происходят физические явления, зависит весь ход явления, то при изучении физических свойств кристаллов важно установить, какой предельной группе подчинена данная группа симметрии кристалла, т. е. в какую предельную группу входят целиком все элементы симметрии кристаллической среды. Каждой предельной группе соответствует определенное число групп симметрии кристалла. Возьмем для примера предельную группу ∞mm, состоящую из одной оси бесконечного порядка и множества продольных плоскостей m. Ось бесконечного порядка содержит повороты на любой угол, следовательно, группе ∞mmn подчинены кристаллографические группы 1, 2, 3, 4, 6. Кроме того, этой же предельной группе подчинены кристаллографические группы $1m$, $2m$, $3m$, $4m$, $6m$, так как зеркальные плоскости симметрии m этих групп содержатся среди плоскостей предельной группы ∞mm. Важно подчеркнуть, что между симметрией кристалла (среды) и симметрией физических свойств всегда есть определенная связь. Ключом к пониманию этой связи является фундаментальный постулат кристаллофизики, известный под названием *принципа Неймана: элементы симметрии любого физического свойства должны включать элементы симметрии точечной группы кристалла.* Отсюда ясно, что физическое свойство кристалла может обладать и более высокой симметрией, чем кристалл. Говоря о симметрии физических свойств, мы в это понятие вкладываем определенный смысл, вытекающий из самого определения симметрии, которое подразумевает наличие в объектах и явлениях неизменного, инвариантного по отношению к некоторым преобразованиям. Поясним это на примере. Физическое свойство кристалла — это соотношение между определенными измеримыми величинами, характеризующими кристалл. Предположим, что мы хотим знать, обладает ли данное физическое свойство тем или иным элементом симметрии или нет. Для этого мы сначала измеряем это свойство по отношению к некоторым фиксированным осям. Затем действуем предполагаемым элементом симметрии на кристалл и снова измеряем это свойство в тех же направлениях и относительно тех же фиксированных осей. Если соотношение между измеряемыми величинами не изменялось, то мы говорим, что рассматриваемое физическое свойство обладает предполагаемым элементом симметрии. Любое физическое свойство имеет собственную симметрию независимо от того, какую симметрию имеет кристалл, в то же время, согласно принципу Неймана, симметрия физического свойства должна включать все элементы симметрии исходного (до воздействия) кристалла. *Наряду с принципом Неймана в кристаллофизике важен еще один постулат, называемый обычно принципом суперпозиции Кюри: когда различные воздействия или явления накладываются друг на друга, образуя единую систему, их диссимметрии (нарушение, расстройство симметрии) складываются.* В результате остаются лишь общие элементы симметрии. С математической точки зрения этот принцип может быть сформулирован как принцип, согласно которому группа симметрии двух или более объектов (явлений), рассматриваемых как целое, является общей высшей подгруппой групп симметрии этих объектов, определяемой с учетом взаимного расположения их элементов симметрии. Для геометрических фигур этот принцип формулируется более просто: при соединении двух (или более), подчеркнем, не равных друг другу, симметричных фигур в одну составную в последней остаются лишь те элементы симметрии, которые являются общими для всех составляющих фигур при заданном способе их размещения в пространстве. Например, на геометрическую фигуру (квадрат с симметрией $4mm$), имеющую симметрию кристалла, накладывается в заданной ориентации фигура (равносторонний треугольник — симметрии $3m$) с симметрией воздействия. Легко видеть (см. рис. 1.65), что в получающейся в результате такой суперпозиции фигуре, составленной из квадрата и треугольника, остается лишь одна плоскость симметрии m, общая для них обоих. При рассмотрении макроскопических физических свойств обычно подразумевается, что кристалл является однородной непрерывной анизотропной средой. Это будет справедливо в том случае, если мы имеем дело с расстояниями, существенно большими, чем наибольший из периодов кристаллической решетки, и с объемами гораздо большими, чем объем ячейки.

Для однозначного описания физических свойств кристаллов используется правая декартова (ортогональная) кристаллофизическая система координат X_1, X_2, X_3, *определенным образом ориентированная относительно кристаллографической системы координат* (см. табл. 1.3, правила

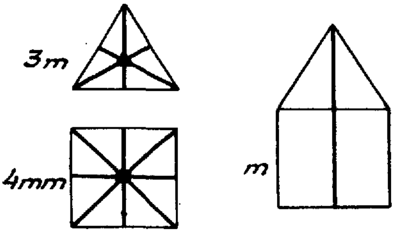

Рис. 1.65. К иллюстрации принципа Кюри. Жирные линии — зеркальные плоскости симметрии

Таблица 1.3. **Правила выбора кристаллофизической системы координат**

Сингония	Ориентация осей	
	кристаллографич.	кристаллофизич.
Триклинная	c — вертикально b — слева направо a — к наблюдателю	выбор осей X_1, X_2, X_3 произволен
Моноклинная	c — вертикально b — слева направо a — к наблюдателю наклонно	$X_2 \parallel b$ и $X_1 \parallel a$ (или $X_3 \parallel c$). Иногда $X_3 \parallel b$ и $X_1 \parallel a$ (или $X_2 \parallel c$)
Ромбическая	c — вертикально b — слева направо a — к наблюдателю	$X_3 \parallel c$, $X_2 \parallel b$, $X_1 \parallel a$
Тетрагональная	c — вертикально b — слева направо a — к наблюдателю	$X_3 \parallel c$, $X_2 \parallel b$, $X_1 \parallel a$
Тригональная и гексагональная	c — вертикально a и u — к наблюдателю в равномерном расхождении	$X_3 \parallel c$, $X_1 \parallel a$ Для классов $3m$ и $6m2$ иногда $X_2 \parallel b$, X_2 X_1, X_3
Кубическая	c — вертикально b — слева направо a — к наблюдателю	$X_3 \parallel c$, $X_2 \parallel b$, $X_1 \parallel a$

кристаллографической установки — см. также табл. 1.1). Углы между положительными направлениями соответственных осей обеих систем берутся меньшими 90°.

При решении многих кристаллофизических задач иногда бывает удобнее пользоваться не кристаллофизической, а другой, специальной, декартовой системой координат. Переход от одних прямоугольных осей X_1, X_2, X_3 к другим таким же X_1', X_2', X_3' с тем же началом (начало остается неподвижным) и той же метрикой, как известно из аналитической геометрии, производят с помощью формул преобразования:

$$\left.\begin{aligned} X_1' &= a_{11} X_1 + a_{12} x_2 + a_{13} X_3 \\ X_2' &= a_{21} X_1 + a_{22} X_2 + a_{23} X_3 \\ X_3' &= a_{31} X_1 + a_{32} X_2 + a_{33} X_3 \end{aligned}\right\} \qquad (1.46)$$

где a_{ij} — направляющие косинусы углов между новыми X_i' и старыми X_j осями, определяемые матрицей ортогонального преобразования:

$$\|a_{ij}\| = \left\| \begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{matrix} \right\|. \tag{1.47}$$

Коэффициенты матрицы (1.47) обладают тем свойством, что сумма квадратов элементов каждой строки или столбца равна единице, а сумма произведений соответствующих элементов двух разных строк или столбцов равна нулю. Математически это означает, что

$$a_{ik}\,a_{jk} = \begin{cases} 1 \text{ при } i=j, \\ 0 \text{ при } i \neq j. \end{cases} \tag{1.48}$$

Физические свойства кристаллов описываются скалярными, векторными или тензорными величинами. Если величина, описывающая свойство, является просто численной, т. е. не связана с направлением в пространстве и не изменяется при преобразовании координат, то она называется скаляром (температура, энтропия, теплоемкость и др.). Векторы и тензоры являются анизотропными и в общем случае изменяют свое числовое значение при преобразовании координат. Одна векторная величина может быть функцией другой векторной величины. Если свойство T связывает два вектора $\vec{b}(b_1, b_2, b_3)$ и $\vec{a}(a_1, a_2, a_3)$, где a_1, a_2, a_3 и b_1, b_2, b_3 — компоненты векторов $\vec{a}$ и $\vec{b}$, таким образом, что

$$\begin{aligned} b_1 &= T_{11}\,a_1 + T_{12}\,a_2 + T_{13}\,a_3 \\ b_2 &= T_{21}a_1 + T_{22}\,a_2 + T_{23}\,a_3, \\ b_3 &= T_{31}\,a_1 + T_{32}\,a_2 + T_{33}\,a_3, \end{aligned} \tag{1.49}$$

где T_{ij} — константы, то говорят, что девять компонентов образуют тензор второго ранга

$$\left| \begin{matrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{matrix} \right|.$$

Уравнения (1.49) в компактной форме можно записать в виде

$$b_i = T_{ij}\,a_j \quad (i,\ j = 1, 2, 3). \tag{1.50}$$

Тензор второго ранга, подобно вектору, описывает некоторую физическую величину, которая не зависит от выбора системы координат. При замене осей физическая величина не изменяется, а изменяется только способ ее представления. Заметим, что по ряду причин (в частности, из-за сходства законов преобразования новых компонент через старые и, наоборот, при выборе новой системы координат) скаляры и векторы относят к тензорам. Скаляр — тензор нулевого ранга, а вектор — тензор первого ранга. При описании физических свойств некоторые свойства представляются тензорами более высоких рангов — третьего, четвертого. Многие свойства кристаллов (удельная электропроводность, теплопроводность, магнитная проницаемость и др.), которые зависят от направления измерения, описываются симметричными тензорами второго ранга, поэтому в дальнейшем мы, в основном, будем уделять внимание именно этому тензору.

Найдем геометрическую интерпретацию тензора второго ранга. Из аналитической геометрии известно, что уравнение центральной поверхности второго порядка с центром в начале координат можно записать в виде

$$S_{ij} \cdot X_i X_j = 1, \quad \text{где } (i, j = 1, 2, 3) \text{ и } S_{ij} = S_{ji}. \tag{1.51}$$

С помощью уравнений (1.49) уравнение (1.51) может быть преобразовано к новым осям:

$$S'_{\kappa l} X'_{\kappa} X'_{l} = 1, \quad \text{где } S_{\kappa l} = a_{\kappa i} a_{lj} S_{ij}.$$

Если сравнить это выражение с уравнением преобразования тензора второго ранга

$$T'_{ij} = a_{i\kappa} a_{jl} T_{\kappa l},$$

то легко видеть их идентичность. Отсюда делается вывод, что законы преобразования (симметричного $T_{ij} = T_{ji}$) тензора второго ранга совпадают с законами преобразования поверхностей второго порядка; чтобы найти, как преобразуются компоненты такого тензора, достаточно рассмотреть преобразование уравнения центральной поверхности второго порядка с центром в начале координат и с коэффициентами, равными компонентам тензора. Поэтому такая поверхность называется *характеристической поверхностью для симметричного тензора второго ранга* и может быть использована для описания любого тензорного свойства кристалла. Важным свойством поверхностей второго порядка является то, что они обладают *главными осями* — тремя взаимно перпендикулярными направлениями, при выборе которых в качестве осей координат уравнение поверхности принимает простой вид

$$T_1 X_1^2 + T_2 X_2^2 + T_3 X_3^2 = 1, \tag{1.52}$$

а тензор, приведенный к главным осям, запишется

$$T_{ij} = \begin{vmatrix} T_1 & 0 & 0 \\ 0 & T_2 & 0 \\ 0 & 0 & T_3 \end{vmatrix}, \tag{1.53}$$

где T_1, T_2, T_3 — главные значения компонент тензора T_{ij}.

Если уравнение поверхности второго порядка записать в канонической форме

$$\frac{x_1^2}{a^2} + \frac{x_2^2}{b^2} + \frac{x_3^3}{a^2} = 1$$

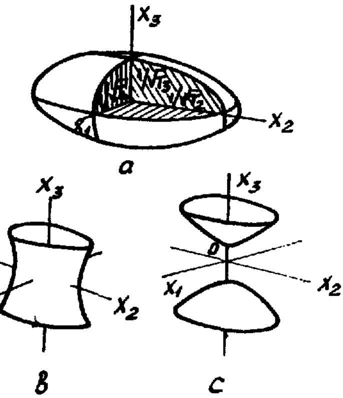

Рис. 1.66. Характеристические поверхности тензора 2-го ранга: а) эллипсоид; в) однополостной гиперболоид; с) двухполостной гиперболоид

и сравнить его с уравнением поверхности (1.52), то видно, что полуоси характеристической поверхности имеют длину $1/\sqrt{T_1}$, $1/\sqrt{T_2}$ и $1/\sqrt{T_3}$. Когда T_1, T_2 и T_3 положительны, поверхность (1.52) представляет собой трехосный эллипсоид (рис. **1.66, а**). Если два коэффициента положительны, а один отрицателен, поверхность является однополостным гиперболоидом (рис. 1.66). Если два коэффициента отрицательны, а один — положителен, то поверхность представляет собой двухполостной гиперболоид (рис. 1.66, с).

Для наглядного представления о симметрии и анизотропии свойства, описываемого тензором второго ранга, кроме характеристической поверхности, можно ввести и другую полезную, так называемую, *указательную поверхность.* Для построения такой поверхности из какой-либо точки, взятой внутри кристалла и выбранной за начало координат, проводят радиусы-векторы по всем возможным направлениям, откладывая вдоль них измеренные относительные значения величин, характеризующих рассматриваемое свойство. Соединив концы этих векторов, получают поверхность, описывающую данное физическое свойство.

Уравнение указательиой поверхности для свойства, описываемого тензором второго ранга, приведенное к главным осям T_{ij}, имеет вид

$$\frac{x_1^2}{T_1^2}+\frac{x_2^2}{T_2^2}+\frac{x_3^2}{T_3^2}=1. \qquad (1.54)$$

Эта поверхность при любых знаках главных компонент тензора есть эллипсоид с полуосями $|T_1|$, $|T_2|$, $|T_3|$, где T — величина, характеризующая данное тензорное свойство в направлении главных осей.

Выше говорилось о полезности указательной поверхности Это действительно так. По форме этой поверхности можно выявить экстремальные направления, в которых величина, определяющая свойство, принимает максимальное или минимальное значение; можно также увидеть симметрию самого свойства.

Как мы уже говорили, физические свойства описываются скалярами, векторами и тензорами. Все эти величины имеют собственную симметрию. Легко видеть, что симметрия скаляра соответствует симметрии (шара) предельной группы $\infty/\infty mm$ Полярный вектор имеет симметрию ∞mm. Аксиальный вектор имеет ось ∞, есть поперечная плоскость симметрии m, но нет продольной, поэтому группа симметрии аксиального вектора (магнитного) есть ∞/m.

Наконец, симметричный тензор второго ранга в зависимости от соотношений между его главными компонентами может иметь собственную симметрию mmm, ∞/mmm или $\infty/\infty mm$. При $T_1=T_2=T_3$ характеристическая поверхность (1.52) вырождается в сферу. В этом случае симметрия тензора будет $\infty/\infty mm$ и, следовательно, тензор вырождается в скаляр. При $T_1=T_2\neq T_3$ характеристическая поверхность — эллипсоид вращения с осью ∞ вдоль X_3 и симметрия тензора будет ∞/mmm. Если $T_1\neq T_2\neq T_3$, то характеристическая поверхность превращается в трехосный эллипсоид с симметрией mmm, а следовательно, и тензор T_{ij} будет иметь эту же симметрию.

До сих пор не принималось во внимание конкретное физическое содержание тензоров. В зависимости от их отношения к объекту физические тензоры бывают двух различных видов: *материальные* тензоры — описывают свойства кристаллов и *полевые тензоры* — описывают воздействие на кристалл и его реакцию. Симметрия материальных тензоров, в соответствии с принципом Неймана, должна согласовываться с симметрией кристалла, и элементы симметрии этих тензоров, характеристических и указательных поверхностей должны совпадать с соответствующими элементами симметрии кристалла. Симметрия полевых тензоров не связана с симметрией кристалла, и тензоры могут иметь любую ориентацию по отношению к элементам симметрии кристалла. При этом, в соответствии с принципом суперпозиции Кюри, кристалл под внешним воздействием изменяет свою точечную группу симметрии так, что сохраняет лишь элементы симметрии, общие с элементами симметрии воздействия. Для более полного и более углубленного изучения вопросов, связанных с соотношением между точечной симметрией кристалла и симметрией его физических свойств, отсылаем читателя к книге «Современная кристаллография», М.: Наука, 1981, Т. 4.