Секция 3

Актуальные проблемы научных исследований в области физики, математики, информатики и техники

М. А. АМАНОВА, В. В. ШЕПЕЛЕВИЧ
МГПУ им. И.П. Шамякина (г. Мозырь, Беларусь)

О ПРИМЕНЕНИИ КОВАРИАНТНЫХ МЕТОДОВ АКАДЕМИКА Ф.И. ФЕДОРОВА К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ОТЛИЧНЫХ ОТ НУЛЯ КОМПОНЕНТ ТЕНЗОРОВ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН В КРИСТАЛЛАХ

Определить отличные от нуля компоненты тензора некоторой физической величины в кристаллах различных классов симметрии можно разными методами.

Один из них, матричный метод, подробно описан в [1]. Он может применяться к тензорам второго и третьего рангов, но к тензорам четвертого ранга и выше применять его, по нашему мнению, не рационально в силу громоздкости производимых математических действий. В этом случае *ковариантный* метод академика Ф.И. Федорова [2] представляется более понятным и удобным, так как применение диад, триад, тетрад и т. д. позволяет формально свести математические операции к действиям только над векторами.

Продемонстрируем методику применения метода Ф.И. Федорова [2] для определения отличных от нуля компонент некоторого тензора на примере флексоэлектрического тензора четвертого ранга f_{ijmr}, который определяется как пространственная дисперсия пьезоэлектрических свойств среды.

Этот тензор в составе слагаемого $(-f_{ijmr}\frac{\partial E_m}{\partial x_r})$, где E_m – компонента вектора электрического поля в кристалле, x_r – декартова координата точки, включён в следующее уравнение:

$$T_{ij} = C^E_{ijkl}S_{kl} + \gamma^E_{ijklr}\frac{\partial S_{kl}}{\partial x_r} - e_{mij}E_m - f_{ijmr}\frac{\partial E_m}{\partial x_r}, \qquad (1)$$

где T_{ij} – компонента тензора упругих напряжений, C^E_{ijkl} и e_{mij} – компоненты тензоров упругости и пьезоэлектрического тензора кристалла соответственно, S_{kl} и γ^E_{ijklr} – тензорные компоненты упругой деформации и упругой пространственной дисперсии.

В качестве примера кристаллов, проявляющих флексоэлектрический эффект, рассмотрим кристаллы ромбической сингонии класса симметрии 222.

Для кристалла класса 222 формула симметрии может быть записана в виде $3L_2$ (см. [3]). Это означает, что кристаллы этого класса содержат три взаимно ортогональные оси симметрии второго порядка, любую из которых можно обобщённо обозначить единичным вектором $\boldsymbol{c}$. Для определения отличных от нуля компонент флексоэлектрического тензора четвёртого ранга в таком кристалле к нему применяется преобразование, которое представляет собой поворот на фиксированные углы $\varphi_k = 2\pi/k$, где $k = 2$, вокруг каждой из трёх взаимно ортогональных единичных осей симметрии $\boldsymbol{e}_n$ $(n = 1, 2, 3)$.

Поворот на угол φ_k вокруг единичного вектора $\boldsymbol{c}$ каждой из осей симметрии выполняется по Ф.И. Федорову с помощью следующего преобразования [4]:

$$S_k = cos\varphi_k + (1 - cos\varphi_k)\boldsymbol{c}.\boldsymbol{c} + sin\varphi_k \boldsymbol{c}^{\times}. \qquad (2)$$

Здесь выражение $\boldsymbol{c}.\boldsymbol{c}$ представляет собой диадное произведение двух одинаковых векторов $\boldsymbol{c}$, а выражение $\boldsymbol{c}^{\times}$ формально представляет собой антисимметричный тензор второго ранга, дуальный вектору $\boldsymbol{c}$. В соответствии с принципом Неймана [5] преобразование (2) при $k = 2$ не должно изменять физических свойств кристалла. Тогда для компоненты тензора f_{ijmr}, представленной в ковариантной форме (в форме тетрады), имеем:

$$\begin{aligned} &f_{ijmr} S_k \boldsymbol{e}_i . S_k \boldsymbol{e}_j . S_k \boldsymbol{e}_m . S_k \boldsymbol{e}_r = f_{ijmr}(-1 + 2\boldsymbol{c}.\boldsymbol{c})\boldsymbol{e}_i.(-1 + 2\boldsymbol{c}.\boldsymbol{c})\boldsymbol{e}_j(-1 + \\ &+2\boldsymbol{c}.\boldsymbol{c})\boldsymbol{e}_m.(-1 + 2\boldsymbol{c}.\boldsymbol{c})\boldsymbol{e}_r = f_{ijmr}\left(-\boldsymbol{e}_i + 2\boldsymbol{c}(\boldsymbol{c}\boldsymbol{e}_i)\right).\left(-\boldsymbol{e}_j + 2\boldsymbol{c}(\boldsymbol{c}\boldsymbol{e}_j)\right). \qquad (3) \\ &.\left(-\boldsymbol{e}_m + 2\boldsymbol{c}(\boldsymbol{c}\boldsymbol{e}_m)\right).\left(-\boldsymbol{e}_r + 2\boldsymbol{c}(\boldsymbol{c}\boldsymbol{e}_r)\right) = f_{ijmr}(-\boldsymbol{e}_i + 2\boldsymbol{c}\delta_{in}).(-\boldsymbol{e}_j + \\ &+2\boldsymbol{c}\delta_{jn}).(-\boldsymbol{e}_m + 2\boldsymbol{c}\delta_{mn}).(-\boldsymbol{e}_r + 2\boldsymbol{c}\delta_{rn}) = f_{ijmr}\boldsymbol{e}_i.\boldsymbol{e}_j.\boldsymbol{e}_m.\boldsymbol{e}_r, \end{aligned}$$

где $\boldsymbol{e}_i,\ \boldsymbol{e}_j,\ \boldsymbol{e}_m,\ \boldsymbol{e}_r$ – единичные векторы кристаллофизической системы координат; $\delta_{in},\ \delta_{jn},\ \delta_{mn},\ \delta_{rn}$ – символы Кронекера.

Ниже мы приводим методики применения ковариантного подхода к задаче определения отличных от нуля компонент тензора f_{ijmr} в кристалле класса 222.

Сначала рассматривается влияние одной из трёх взаимно ортогональных осей симметрии второго порядка на отличные от нуля компоненты флексоэлектрического тензора, полагая для определенности, что единичный вектор $\boldsymbol{c}$ в (2) совпадает с единичным вектором $\mathbf{e}_2$ кристаллофизической системы координат. В результате получаем:

$$\begin{aligned} &f_{1111}, f_{1122}, f_{1133}, f_{1131}, f_{1113}, f_{2211}, f_{2222}, f_{2233}, f_{2231}, f_{2213}, f_{3311}, f_{3322}, \\ &f_{3333}, f_{3331}, f_{3313}, f_{2323}, f_{2312}, f_{2332}, f_{2321}, f_{3111}, f_{3122}, f_{3133}, f_{3131}, f_{3113}, \\ &f_{1223}, f_{1212}, f_{1232}, f_{1221}, f_{3223}, f_{3212}, f_{3232}, f_{3221}, f_{1311}, f_{1322}, f_{1333}, f_{1331}, \\ &f_{1313}, f_{2123}, f_{2112}, f_{2132}, f_{2121}. \qquad (4) \end{aligned}$$

Если выбрать вектор $\boldsymbol{c}$ в (2) совпадающим с единичным вектором $\mathbf{e}_3$ кристаллофизической системы координат, то легко получить следующие отличные от нуля компоненты тензора f_{ijmr}:

$$\begin{aligned} &f_{1111}, f_{1122}, f_{1133}, f_{1112}, f_{1121}, f_{2211}, f_{2222}, f_{2233}, f_{2212}, f_{2221}, f_{3311}, f_{3322}, \\ &f_{3333}, f_{3312}, f_{3321}, f_{2323}, f_{2331}, f_{2332}, f_{2313}, f_{3123}, f_{3131}, f_{3132}, f_{3113}, f_{1211}, \\ &f_{1222}, f_{1233}, f_{1212}, f_{1221}, f_{3223}, f_{3231}, f_{3232}, f_{3213}, f_{1323}, f_{1331}, f_{1332}, f_{1313}, \\ &f_{2111}, f_{2122}, f_{2133}, f_{2112}, f_{2121}. \qquad (5) \end{aligned}$$

В кристалле класса 222 для нахождения отличных от нуля независимых компонент флексоэлектрического тензора следует выбрать совпадающие компоненты из систем компонент (4) и (5). Легко видеть, что это следующие независимые компоненты:

$$\begin{aligned} &f_{1111}, f_{1122}, f_{1133}, f_{2211}, f_{2222}, f_{2233}, f_{3311}, f_{3322}, f_{3333}, f_{2323}, f_{2332}, f_{3131}, \\ &f_{3113}, f_{1212}, f_{1221}, f_{3223}, f_{3232}, f_{1331}, f_{1313}, f_{2112}, f_{2121}. \qquad (6) \end{aligned}$$

Легко проверить, что рассмотрение случая, когда вектор $\boldsymbol{c}$ совпадает по направлению с вектором $\mathbf{e}_1$, не приводит к новому результату.

Представим полученные выше результаты (6) для кристалла класса 222 в виде матрицы

$$\begin{pmatrix} f_{1111} & f_{1122} & f_{1133} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ f_{2211} & f_{2222} & f_{2233} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ f_{3311} & f_{3322} & f_{3333} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f_{2323} & 0 & 0 & f_{2332} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & f_{3131} & 0 & 0 & f_{3113} & 0 \end{pmatrix} \qquad (7)$$

$$
\begin{array}{ccccccccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & f_{1212} & 0 & 0 & f_{1221} \\
0 & 0 & 0 & f_{3223} & 0 & 0 & f_{3232} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & f_{1331} & 0 & 0 & f_{1313} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & f_{2112} & 0 & 0 & f_{2121}
\end{array}
$$

Подобный метод нахождения отличных от нуля компонент электрооптического тензора третьего ранга представлен в [5].

Таким образом, ковариантный метод [2] для определения отличных от нуля компонент тензора f_{ijmr} (7) представляется нам более простым и удобным, чем матричный метод [1].

Предложенная методика применения симметрии кристалла для определения ненулевых компонент тензора четвертого ранга согласуется с результатами [3] (Таблица Д.22) и может быть использована для определения отличных от нуля компонент тензора пятого ранга f^{E}_{ijklr}.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Най, Дж. Физические свойства кристаллов / Дж. Най. – М. : Мир, 1967. – С. 161–173.
2. Федоров, Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах / Ф.И. Федоров. – Минск : Наука, 1965. – С. 45–65.
3. Сиротин, Ю.И. Основы кристаллофизики / Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. – М. : Наука, 1975. – С. 45–67.
4. Федоров, Ф.И. Теория гиротропии / Ф.И. Федоров. – Минск : Наука и техника, 1976. – С. 240–241.
5. Шепелевич, В.В. Голография в фоторефрактивных оптически активных кристаллах / В.В. Шепелевич. – Минск : Изд. центр БГУ, 2012. – С. 72–84.