



САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

О. В. Франк-Каменецкая

# КРИСТАЛЛОФИЗИКА



ГЕОЛОГИЯ

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ  
ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ  
ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ  
ОКРУЖНОСТЬ МОРА  
СКАЛЯР  
ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКАЯ ПОВЕРХНОСТЬ  
ВЕКОВОЕ  
УРАВНЕНИЕ  
ЭЛЛИПСОИД ЗНАЧЕНИЯ ТЕНЗОРА  
ПОВЕРХНОСТЬ  
НАПРЯЖЕНИЕ  
АКСИАЛЬНЫЙ  
СИСТЕМА КООРДИНАТ  
ГЛАВНЫЕ ОСИ  
СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ  
ДЕФОРМАЦИЯ  
ПРИНЦИП НАПРЯЖЕНИЯ  
СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ  
РАДИУС-ВЕКТОР  
КУРИ  
ПРОДОЛЬНАЯ КОМПОНЕНТА  
НОРМАЛЬ  
ПОЛЯРИЗАЦИЯ  
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦЕЛЯЕМОСТЬ  
ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ  
ВЕКТОР

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

О. В. Франк-Каменецкая

# КРИСТАЛЛОФИЗИКА

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ



ИЗДАТЕЛЬСТВО САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

УДК 539.2(075)

ББК 22.37я73

Ф83

Рецензенты: д-р геол.-минер. наук, проф. *А. И. Глазов*  
(Нац. минерально-сырьевой ун-т «Горный»);  
д-р физ.-мат. наук, проф. *В. К. Рябчук* (С.-Петерб. гос. ун-т);  
канд. технич. наук, доц. *В. А. Парфёнов* (С.-Петерб. гос.  
электротехн. ун-т «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина))

*Печатается по решению  
Учебно-методической комиссии Института наук о Земле  
Санкт-Петербургского государственного университета*

**Франк-Каменецкая О. В.**

Ф83      Кристаллофизика: учебное пособие. — СПб.: Изд-во  
С.-Петерб. ун-та, 2016. — 84 с.  
ISBN 978-5-288-05673-4

Настоящее пособие знакомит читателя с математическим (тензорным) аппаратом, который используется для изучения меняющихся с направлением (анизотропных) физических свойств кристаллов, и его практическим применением. Даются определения тензоров разных рангов, выводятся законы их преобразования, обсуждаются возможности геометрической интерпретации тензоров второго ранга. Особое внимание уделяется влиянию точечной симметрии кристаллов на их свойства, а также практическим вопросам приведения симметричных тензоров второго ранга к главным осям (диагональному виду). Рассматриваются примеры применения тензоров первого и второго рангов для описания механических и электрических свойств кристаллов. В пособии много задач и упражнений, часть из которых приведена с решениями.

Пособие предназначено для студентов и аспирантов геологических специальностей, слушающих курсы кристаллографии и кристаллофизики, а также для молодых специалистов, знакомящихся с основами кристаллофизики.

**ББК 22.37я73**

ISBN 978-5-288-05673-4

© Санкт-Петербургский  
государственный  
университет, 2016

## ВВЕДЕНИЕ

Кристаллофизика — одно из основных направлений современной кристаллографии, изучающее физические свойства кристаллов, их взаимосвязь с симметрией и атомной структурой.

Цель настоящего учебного пособия — дать читателю представление о математическом (тензорном) аппарате, который используется для описания меняющихся с направлением (анизотропных) физических свойств кристаллов. Основная задача — объяснить, что такое тензоры, и показать на конкретных примерах, как они применяются.

Наиболее известным и широко используемым во всем мире учебным пособием по тензорной кристаллофизике для лиц нефизических специальностей (геологов, химиков, биологов и др.) является книга английского кристаллографа Джона Ная *Physical Properties of Crystals* (Oxford: Clarendon Press, 1957), которая неоднократно переиздавалась, в том числе и на русском языке в прекрасном профессиональном переводе Л. А. Шувалова. Эта книга давно завоевала широкий круг читателей и стала полезным пособием не только для студентов и аспирантов, изучающих физические свойства кристаллов, но и для многих научных работников и инженеров, желающих овладеть применяемыми в кристаллофизике методами исследования. К сожалению, в России книга Дж. Ная давно уже стала библиографической редкостью (последнее издание на русском языке вышло в 1967 году). Имеющиеся в распоряжении российского читателя другие книги, в которых рассматриваются вопросы физической (тензорной) кристаллографии (Современная кристаллография, 1981; Сиротин и Шаскольская, 1979 и др.), знакомят с основным кругом проблем и законов кристаллофизики, но не могут рассматриваться в качестве учебного пособия к университетским курсам по кристаллофизике для студентов и аспирантов естественных (нефизических) институтов и факультетов. Не отвечает этому назначению и адресованное студентам физических специальностей учебное пособие А. С. Сониной (2006), которое знакомит читателя с симметричными аспектами кристаллофизики.

Настоящее пособие продолжает серию учебно-методических изданий по кристаллофизике (Франк-Каменецкая и Чернятьева, 2012), рассчитанных на студентов геологических специальностей. В книге обобщен многолетний опыт преподавания, накопленный автором при чтении курсов лекций («Кристаллофизика», «Тензорное описание физических свойств кристаллов») на кафедре кристаллографии Института наук о Земле Санкт-Петербургского государственного университета. Уровень изложения максимально прост и достаточно детален — все приводимые уравнения выводятся.

Учебное пособие состоит из двух частей. В первой части излагаются основы тензорного описания физических свойств кристаллов. Даются определения тензоров разных рангов, рассматриваются законы их преобразования. Особое внимание уделяется различным указательным поверхностям, используемым для геометрической интерпретации тензоров  $II$  ранга. В специальных главах рассматриваются практические вопросы приведения симметричных тензоров  $II$  ранга к главным осям (диагональному виду) и влияние симметрии кристаллов на их свойства (основные симметрийные постулаты кристаллофизики). Во второй части приводятся примеры описания механических и электрических свойств кристаллов с использованием тензоров  $I$  и  $II$  рангов. В книге много задач и упражнений, часть из которых взята непосредственно или с небольшими изменениями из задачников Н. В. Переломовой и М. М. Тагиевой (1972, 1982) и из книги Дж. Ная (1967). К части задач даются решения.

Предлагаемое учебное пособие — это, по сути, хорошо структурированная рабочая тетрадь, содержание которой должно быть востребовано студентами и аспирантами геологических специальностей при освоении ими курсов кристаллографии и кристаллофизики, а также молодыми специалистами при знакомстве с основами физической кристаллографии.

Автор выражает глубокую признательность своему учителю по кристаллофизике профессору, доктору физ.-мат. наук В. А. Боккову, а также благодарит А. В. Русакова и А. П. Чернятьеву за неоценимую помощь при оформлении работы.

## Часть I

# МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОФИЗИКИ

## Глава 1

### ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

#### 1.1. Определения тензоров 0, I и II ранга

*Тензоры* — математический аппарат, эффективно применяемый для описания и количественного исследования анизотропии физических свойств кристаллов.

*Скаляр* — величина, не связанная с направлением; описывается числом, инвариантным к выбору начала координат.

*Тензор 0 ранга* — это число, определяющее физическую величину и не зависящее от выбора начала координат. Примеры физических свойств, которые описываются тензорами 0 ранга: масса, площадь, температура, плотность, объем.

*Вектор* — величина, связанная с определенным направлением; он задается длиной и направлением. Кроме того, его можно задать тремя компонентами — проекциями на координатные оси, которые по абсолютной величине равны длинам составляющих этого вектора, направленных вдоль соответствующих координатных осей. Знаки компонент определяются направлением соответствующих составляющих. При преобразовании системы координат компоненты вектора изменяются.

*Тензор I ранга* — это три числа, определяющие физическую величину, каждое из которых связано с одной координатной осью (характеризуется одним индексом). Примеры физических свойств, которые описываются тензорами I ранга: скорость, ускорение, сила тока, напряженность электрического и магнитного полей.

*Кристаллофизические системы координат* — это правые и левые прямоугольные системы координат, выбор осей в которых определяется симметрией кристалла. Если в начале координат расположить человека и вдоль его тела снизу вверх направить положительный конец оси  $X_3$ , то в правой системе координат его

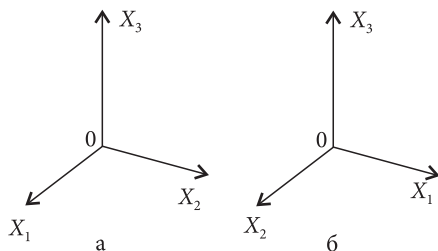


Рис. 1. Правая (а) и левая (б) кристаллофизические системы координат

правой руке соответствует положительный конец оси  $X_1$ , а левой —  $X_2$ . В левой системе координат оси  $X_1$  и  $X_2$  меняются местами (рис. 1).

Правила выбора кристаллофизических осей координат в кристаллах различной симметрии представлены в таблице 1.

Таблица 1. Правила выбора кристаллофизической системы координат

| Сингония                      | Ориентация относительно кристаллографических осей |                |        | Ориентация относительно элементов симметрии |                             |                          |
|-------------------------------|---|----------------|--------|---|-----------------------------|--------------------------|
|                               | $X_1$   | $X_2$          | $X_3$  | $X_1$                                       | $X_2$                       | $X_3$                    |
| Триклинная                    | в плоскости (001)                                 |                | [001]  | Нет   |                             |                          |
| Моноклинная                   | В плоскости (010)                                 | [010]          | [001]  | В плоскости m                               | $2, \bar{2}$                | В плоскости m            |
|                               | В плоскости (001)                                 |                |        | В плоскости m                               |                             | $2, \bar{2}$             |
| Ромбическая                   | [100]   | [010]          | [001]  | $2, \bar{2}$                                |                             | 2                        |
| Тетрагональная                | [100]   | [010]          | [001]  | $2, \bar{2}$<br>(если есть)                 | $2, \bar{2}$<br>(если есть) | $4, \bar{4}$             |
| Тригональная и гексагональная | $[2\bar{1}\bar{1}0]$                              | $[01\bar{1}0]$ | [0001] | $2, \bar{2}$<br>(если есть)                 | $2, \bar{2}$<br>(если есть) | $3, \bar{3}, 6, \bar{6}$ |
| Кубическая                    | [100]   | [010]          | [001]  | $4, \bar{4}, 2$                             |                             |                          |

Определение тензора II ранга введем на примере тензора электропроводности. Если электрическое поле, заданное вектором  $E$ , действует на проводящий материал, то величина электрического тока в нем определяется законом Ома.

Пусть проводник *изотропен*. Тогда закон Ома описывается уравнением

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$$

где  $\mathbf{J}$  — вектор плотности тока, характеризующий ток через единицу поверхности перпендикулярной направлению тока;  $\mathbf{E}$  — вектор напряженности электрического поля;  $\sigma$  — удельная электропроводность (скалярная величина). В этом случае векторы  $\mathbf{J}$  ( $J_1, J_2, J_3$ ) и  $\mathbf{E}$  ( $E_1, E_2, E_3$ ) параллельны друг другу (рис. 2а):

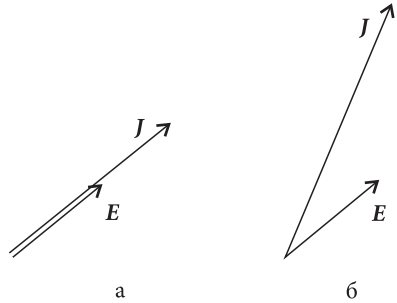


Рис. 2. Взаимное расположение векторов плотности тока  $\mathbf{J}$  и напряженности электрического поля  $\mathbf{E}$  в изотропном (а) и анизотропном (б) проводниках

$$J_1 = \sigma E_1,$$

$$J_2 = \sigma E_2,$$

$$J_3 = \sigma E_3.$$

Если проводник *анизотропен* (представлен некубическим кристаллом), векторы  $\mathbf{J}$  ( $J_1, J_2, J_3$ ) и  $\mathbf{E}$  ( $E_1, E_2, E_3$ ) не параллельны друг другу (рис. 2б). В этом случае каждая компонента вектора  $\mathbf{J}$  зависит от всех компонент вектора  $\mathbf{E}$  следующим образом:

$$\begin{aligned} J_1 &= \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3, \\ J_2 &= \sigma_{21}E_1 + \sigma_{22}E_2 + \sigma_{23}E_3, \\ J_3 &= \sigma_{31}E_1 + \sigma_{32}E_2 + \sigma_{33}E_3. \end{aligned} \quad (1)$$

Таким образом, для того чтобы охарактеризовать электропроводность анизотропного тела, надо задать 9 коэффициентов  $\sigma_{ij}$ , каждый из которых характеризуется двумя индексами, т.е. связан с двумя координатными осями. Эти коэффициенты являются компонентами тензора электропроводности:

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

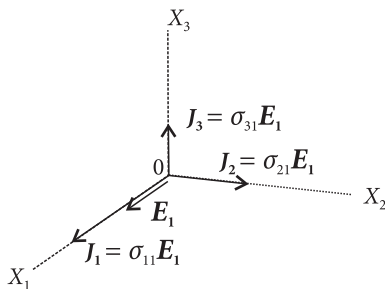


Рис. 3. Составляющие вектора  $\mathbf{J}$  при условии приложения поля  $\mathbf{E}$  вдоль оси  $X_1$

Тензор электропроводности — это пример *тензора II ранга*. Ранг тензора равен числу индексов, характеризующих каждую из его компонент.

Рассмотрим частный случай. Пусть вектор поля  $\mathbf{E}$  приложен вдоль оси  $X_1$ , т.е. характеризуется компонентами  $(E_1, 0, 0)$ . Тогда согласно уравнению (1)

$$J_1 = \sigma_{11} E_1,$$

$$J_2 = \sigma_{21} E_1,$$

$$J_3 = \sigma_{31} E_1.$$

Таким образом, убеждаемся, что и в этом случае вектор плотности тока не параллелен вектору напряженности электрического поля (рис. 3).

Дадим определение тензора *II* ранга в общем случае.

Если свойство  $S$  связывает два вектора  $\mathbf{A}$  ( $A_1, A_2, A_3$ ) и  $\mathbf{B}$  ( $B_1, B_2, B_3$ ) таким образом, что

$$\begin{aligned} A_1 &= S_{11}B_1 + S_{12}B_2 + S_{13}B_3, \\ A_2 &= S_{21}B_1 + S_{22}B_2 + S_{23}B_3, \\ A_3 &= S_{31}B_1 + S_{32}B_2 + S_{33}B_3, \end{aligned} \quad (1')$$

где  $S_{ij}$  — константы, то говорят, что компоненты  $S_{ij}$  образуют тензор *II* ранга:

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

Примеры физических свойств кристаллов, описываемых тензорами *II* ранга, представлены в таблице 2.

В дальнейшем будем использовать *сокращенную запись* тензорных соотношений (правило суммирования по Эйнштейну).

Таблица 2. Примеры физических свойств кристаллов, описываемых тензорами II ранга

| Заданный вектор $B$               | Индукцированный вектор $A$    | Физическое свойство $S$         |
|-----------------------------------|-------------------------------|---------------------------------|
| Напряженность электрического поля | Плотность электрического тока | Удельная электропроводность     |
| — " —                             | Диэлектрическая поляризация   | Диэлектрическая восприимчивость |
| — " —                             | Электрическая индукция        | Диэлектрическая проницаемость   |
| Градиент температуры              | Плотность теплового потока    | Коэффициенты теплопроводности   |
| Напряженность магнитного поля     | Магнитная индукция            | Магнитная проницаемость         |

Систему (1') можно записать в виде

$$A_1 = \sum S_{1j} B_j,$$

$$A_2 = \sum S_{2j} B_j,$$

$$A_3 = \sum S_{3j} B_j,$$

или

$$A_i = \sum S_{ij} B_j \quad (i, j = 1 \div 3).$$

Опускаем значок суммирования (суммируем по повторяющемуся индексу) и получаем сокращенную запись уравнения (1):

$$A_i = S_{ij} B_j \quad (i, j = 1 \div 3). \quad (1'')$$

В матричной форме это уравнение имеет вид

$$A = SB, \quad (1''')$$

где  $A$ ,  $S$  и  $B$  — матрицы  $(3 \times 1)$ ,  $(3 \times 3)$  и  $(3 \times 1)$  соответственно:

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix}.$$

## ОГЛАВЛЕНИЕ

|   |           |
|---|-----------|
| Введение .....  | 3         |
| <b>ЧАСТЬ I. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОФИЗИКИ .....</b>   | <b>5</b>  |
| Глава 1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ.....   | 5         |
| 1.1. Определение тензоров $0$ , $I$ и $II$ ранга.....   | 5         |
| 1.2. Преобразования тензоров .....  | 10        |
| 1.2.1. Ортогональные преобразования системы координат .....   | 10        |
| 1.2.2. Преобразования компонент вектора .....   | 10        |
| 1.2.3. Преобразования компонент тензора $II$ ранга .....  | 12        |
| 1.2.4. Преобразования компонент тензоров высших рангов .....  | 13        |
| 1.3. Свойства тензора $II$ ранга .....  | 14        |
| 1.4. Аксиальные тензоры (псевдотензоры).....  | 15        |
| 1.4.1. Аксиальный тензор $I$ ранга (аксиальный вектор).....   | 15        |
| 1.4.2. Аксиальные тензоры $0$ и $II$ ранга .....  | 17        |
| Глава 2. ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ТЕНЗОРОВ $II$ РАНГА. УКАЗАТЕЛЬНЫЕ ПОВЕРХНОСТИ.....                                    | 19        |
| 2.1. Характеристическая поверхность .....   | 19        |
| 2.1.1. Определение .....  | 19        |
| 2.1.2. Главные оси .....  | 20        |
| 2.1.3. Вид характеристической поверхности.....  | 21        |
| 2.2. Величина, характеризующая свойство в заданном направлении.....   | 22        |
| 2.3. Геометрические свойства характеристической поверхности .....   | 23        |
| 2.3.1. Длина радиуса-вектора.....   | 23        |
| 2.3.2. Свойство радиуса-вектора и нормали .....   | 24        |
| 2.4. Другие указательные поверхности .....  | 27        |
| 2.4.1. Эллипсоид значений тензора .....   | 27        |
| 2.4.2. Поверхность продольной компоненты тензора .....  | 28        |
| Глава 3. ПРИВЕДЕНИЕ ТЕНЗОРА $II$ РАНГА К ГЛАВНЫМ ОСЯМ (ОПРЕДЕЛЕНИЕ НАПРАВЛЕНИЙ И ДЛИН ГЛАВНЫХ ОСЕЙ).....                    | 29        |
| 3.1. Использование векового уравнения (общий случай).....   | 29        |
| 3.2. Использование окружности Мора.....   | 33        |
| ГЛАВА 4. ВЛИЯНИЕ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ НА ИХ СВОЙСТВА.....   | 40        |
| 4.1. Принцип Неймана и его применение .....   | 40        |
| 4.2. Принцип Кюри и его применение .....  | 43        |
| <b>ЧАСТЬ II. ПРИМЕРЫ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫХ ТЕНЗОРАМИ <math>I</math> И <math>II</math> РАНГОВ .....</b> | <b>45</b> |
| Глава 5. МЕХАНИЧЕСКОЕ НАПРЯЖЕНИЕ .....  | 45        |
| 5.1. Общие представления.....   | 45        |
| 5.2. Тензор напряжений .....  | 47        |
| 5.3. Поверхность напряжений.....  | 48        |
| 5.4. Частные формы тензора напряжений .....   | 49        |
| 5.5. Материальные и полевые тензоры .....   | 50        |

|   |    |
|---|----|
| Глава 6. ДЕФОРМАЦИЯ И ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ.....  | 51 |
| 6.1. Одномерная деформация.....   | 51 |
| 6.2. Двумерная деформация.....  | 52 |
| 6.3. Трехмерная деформация.....   | 56 |
| 6.4. Тепловое расширение.....   | 59 |
| Глава 7. ПОЛЯРИЗАЦИЯ ДИЭЛЕКТРИКОВ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ....                                  | 62 |
| 7.1. Общие представления.....   | 62 |
| 7.2. Электронная, ионная и ориентационная поляризуемость.....                               | 63 |
| 7.3. Электрические поля диэлектрика.....  | 64 |
| 7.4. Диэлектрические проницаемость и восприимчивость.....                                   | 65 |
| Глава 8. ПИРО- И СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСТВО.....  | 68 |
| 8.1. Общие представления.....   | 68 |
| 8.2. Пироэлектрический эффект.....  | 70 |
| 8.3. Электрокалорический эффект.....  | 71 |
| 8.4. Ограничения, накладываемые симметрией кристалла на электриче-<br>скую поляризацию..... | 72 |
| ВОПРОСЫ И ЗАДАЧИ К КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЕ.....  | 74 |
| ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ.....   | 79 |
| РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА.....   | 81 |

---



---

Учебное издание

*Ольга Викторовна Франк-Каменецкая*

**КРИСТАЛЛОФИЗИКА**

*Учебное пособие*

Редактор *Г. Б. Ерусалимский*

Корректор *Е. В. Величина*

Компьютерная верстка *Ю. Ю. Тауриной*

Подписано в печать 15.06.2016. Формат 60×84 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>.  
Усл. печ. л. 4,9. Тираж 230 экз. (1-й завод). Заказ № 128.

Издательство Санкт-Петербургского университета.  
199004, С.-Петербург, В.О., 6-я линия, 11.  
Тел. (812)328-96-17; факс (812)328-44-22  
publishing@spbu.ru      publishing.spbu.ru

Типография Издательства СПбГУ. 199061, С.-Петербург, Средний пр., 41.

Книги Издательства СПбГУ можно приобрести  
в Доме университетской книги  
Менделеевская линия, д. 5  
тел.: +7(812) 329 24 71  
часы работы 10.00–20.00 пн. — сб.,  
а также в интернет-магазине OZON.ru