Доклады Академии Наук СССР
1950. Том LXX, № 4

ФИЗИКА

Действительный член АН БССР Н. С. АКУЛОВ и Я. И. ФЕЛЬДШТЕЙН

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ГРУПП К АНАЛИЗУ АНИЗОТРОПИИ КРИСТАЛЛОВ

§ 1. В 1928 г. одним из нас на основе расчета магнитных взаимодействий между атомами в решетке кристалла ([1]) был установлен тензор анизотропии, примененный для расчета магнитострикции. В дальнейшем было показано, что тензор этого типа применим для расчета ряда других физических свойств ([2]) (четные эффекты).

В общем виде проблема может быть сформулирована следующим образом: пусть в том или ином анизотропном или изотропном пространстве протекает процесс, описываемый линейной связью двух векторов **B** и **C**:

$$\mathbf{B} = A\mathbf{C}, \tag{1}$$

где A — тензор, удовлетворяющий условию ([3]):

$$A\cdot T_k = T_k\cdot A, \tag{2}$$

T_k — элементы группы, преобразующей пространство „само в себя".

Если компоненты тензора A являются функциями компонент некоторого возмущающего тензора, в частности вектора результирующего спина **s**, соотношение (2) обращается ([3]):

$$T_k A(\mathbf{s}) = \pm A(T_k\mathbf{s})\cdot T_k, \tag{3}$$

где плюс относится к случаю четных эффектов, а минус к зеркальным отображениям при нечетных эффектах.

§ 2. Для вывода законов анизотропии в случае кристаллов кубической симметрии с помощью (3) удобно пользоваться матрицами

$$T_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{4}$$

соответствующими отражению относительно (100), (010), (001), и

$$T_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{5}$$

соответствующими повороту на 90° вокруг осей [001], [100], [010] с последующим отражением относительно плоскостей (010), (001), (100) соответственно.

В случае других преобразований, относящихся к группе вращений и зеркальных отображений кристалла, при которых его решетка переходит сама в себя, результаты совпадут с теми, которые получаются с помощью (4) и (5).

Используя уравнение (2) и матрицы (4), (5), можно показать, что в кубических кристаллах, в случае независимости компонент тензора A от направления результирующего спина ($\mathbf{s}$), этот тензор оказывается пропорциональным единичному тензору, т. е. кубический кристалл становится изотропным.

Если компоненты тензора A суть функции направления результирующего спина ферромагнитного монокристалла, то, согласно вышесказанному, необходимо применять соотношение (3). Вследствие этого мы теперь придем к совершенно другим результатам.

Действительно, применяя преобразование T_1, имеем, вычисляя правую часть выражения (3):

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ -a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ -a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \tag{6}$$

и, соответственно, левую часть:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_{11} & -a_{12} & -a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}. \tag{7}$$

При этом преобразовании вектор $\mathbf{s}$ изменится соответственно и будет теперь иметь следующее выражение:

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 & 0 & 0 \\ s_2 & 0 & 0 \\ s_3 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -s_1 & 0 & 0 \\ s_2 & 0 & 0 \\ s_3 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Если бы a_{ij} были величинами, не меняющимися при преобразовании типа $T_k\mathbf{s}$, то из сопоставления (6) и (7) мы бы имели

$$a_{12} = a_{21} = 0, \quad a_{13} = a_{31} = 0.$$

Однако, согласно (3), к правой части (6) мы должны применить преобразование $T_k\mathbf{s}$. Из сопоставления правых частей (6) и (7) мы замечаем, что $a_{12} \neq 0$, $a_{21} \neq 0$, $a_{31} \neq 0$, $a_{13} \neq 0$, но что a_{12}, a_{21}, a_{31}, a_{13} являются лишь нечетными функциями s_1. При этом сопоставлении следует далее, что все остальные компоненты являются четными функциями s_1.

Аналогично, применяя преобразование, выражаемое матрицей T_2, заключаем, что a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{13}, a_{31} суть четные функции, а a_{12}, a_{21}, a_{32}, a_{23} — нечетные функции s_2.

Применение T_3 указывает на то, что a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{12}, a_{21} являются четными функциями, а a_{13}, a_{23}, a_{31}, a_{32} — нечетными функциями s_3.

Применяя преобразование T_4, найдем, что при перестановке s_2 и s_1 a_{12} переходит в a_{21}, $a_{22} \to a_{11}$, $a_{32} \to a_{31}$, $a_{11} \to a_{22}$, $a_{21} \to a_{12}$, $a_{31} \to a_{32}$, $a_{13} \to a_{23}$, $a_{23} \to a_{13}$, $a_{33} \to a_{33}$.

Преобразование T_5 показывает, что при перестановке s_2 и s_3 $a_{12} \to a_{13}$, $a_{31} \to a_{21}$, $a_{32} \to a_{23}$, $a_{33} \to a_{22}$, $a_{13} \to a_{12}$, $a_{21} \to a_{31}$, $a_{22} \to a_{33}$, $a_{23} \to a_{32}$, $a_{11} \to a_{11}$, а применяя преобразование T_6, получим, что при перестановке s_1 и s_3 $a_{13} \to a_{31}$, $a_{23} \to a_{21}$, $a_{33} \to a_{11}$, $a_{12} \to a_{32}$, $a_{32} \to a_{12}$, $a_{11} \to a_{33}$, $a_{21} \to a_{23}$, $a_{31} \to a_{13}$, $a_{22} \to a_{22}$.

На основании вышеизложенного устанавливаем зависимость компонент тензора анизотропии четных эффектов от направления результирующего спина, которая ранее была получена на основе иного метода ([3]).

Так как тензор A является функцией $\mathbf{s}$, то компоненты его могут быть разложены в ряд по степеням s_i. Поскольку члены 2-го и 4-го порядков уже определены, мы ограничиваем здесь вычисление членами 6-го порядка. Учитывая четность эффекта и установленную зависимость компонент тензора от направления результирующего спина, найдем, что

$$\begin{aligned}
a_{11} &= a_0 + a_1 s_1^2 + a_3 s_1^4 + a_4 s_1^6 + a_5 s_2^2 s_3^2 + a_6 s_1^2 s_2^2 s_3^2,\\
a_{22} &= a_0 + a_1 s_2^2 + a_3 s_2^4 + a_4 s_2^6 + a_5 s_1^2 s_3^2 + a_6 s_1^2 s_2^2 s_3^2,\\
a_{33} &= a_0 + a_1 s_3^2 + a_3 s_3^4 + a_4 s_3^6 + a_5 s_1^2 s_2^2 + a_6 s_1^2 s_2^2 s_3^2,\\
a_{12} &= a_{21} = a_2 s_1 s_2 + a_7 s_1 s_2 s_3^2 + a_8 s_1 s_2 s_3^4 + a_9 s_1^3 s_2^3,\\
a_{13} &= a_{31} = a_2 s_1 s_3 + a_7 s_1 s_3 s_2^2 + a_8 s_1 s_3 s_2^4 + a_9 s_1^3 s_3^3,\\
a_{23} &= a_{32} = a_2 s_2 s_3 + a_7 s_2 s_3 s_1^2 + a_8 s_2 s_3 s_1^4 + a_9 s_2^3 s_3^3.
\end{aligned} \tag{9}$$

В случае нечетных эффектов, пользуясь вышеуказанным методом, из соотношения (3) находим зависимость компонент тензора от направления результирующего спина. Учитывая нечетность эффекта и раскладывая компоненты тензора в ряд по степеням s_i, получим:

$$\begin{gathered}
a_{11} = a_{22} = a_{33} = 0, \quad a_{12} = Cs_3, \quad a_{21} = -Cs_3,\\
a_{32} = -Cs_1, \quad a_{23} = Cs_1, \quad a_{31} = Cs_2, \quad a_{13} = -Cs_2.
\end{gathered} \tag{10}$$

§ 3. Для получения тензора анизотропии кристаллов гексагональной системы применяем преобразования:

$$T_1' = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T_2' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T_3' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{11}$$

$$T_4' = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{12}$$

Преобразования (11) указывают на то, что у гексагональной решетки, аналогично кубической: а) a_{ii} являются четными функциями s_1, s_2, s_3; б) a_{ij} нечетные функции s_j, s_i и четные функции s_k.

Применяя преобразование T_4', получим для левой части уравнения (3):

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{a_{11}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} a_{21} & \frac{a_{12}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} a_{22} & \frac{a_{13}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} a_{23} \\ -\frac{a_{21}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} a_{11} & \frac{\sqrt{3}}{2} a_{12} - \frac{a_{22}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} a_{13} - \frac{a_{23}}{2} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Для правой части имеем:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{a_{11}^0}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} a_{12}^0 & \frac{\sqrt{3}}{2} a_{11}^0 - \frac{a_{12}^0}{2} & a_{13}^0 \\ \frac{a_{21}^0}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} a_{22}^0 & \frac{\sqrt{3}}{2} a_{21}^0 - \frac{a_{22}^0}{2} & a_{23}^0 \\ \frac{a_{31}^0}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} a_{32}^0 & \frac{\sqrt{3}}{2} a_{31}^0 - \frac{a_{32}^0}{2} & a_{33}^0 \end{pmatrix} \tag{14}$$

и, кроме того,

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 & 0 & 0 \\ s_2 & 0 & 0 \\ s_3 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{s_1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} s_2 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} s_1 - \frac{s_2}{2} & 0 & 0 \\ s_3 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Значок 0 над компонентами тензора означает, что s_1 и s_2 заменены соответственно на $\left(\frac{s_1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} s_2\right)$ и $\left(\frac{\sqrt{3}}{2} s_1 - \frac{s_2}{2}\right)$.

Сравнивая (13) и (14), имеем

$$\begin{gathered} a_{11} + \sqrt{3}\, a_{21} = \overset{0}{a}_{11} + \sqrt{3}\, \overset{0}{a}_{12}, \quad a_{12} + \sqrt{3} a_{22} = \sqrt{3}\, \overset{0}{a}_{11} - \overset{0}{a}_{12}, \\ a_{13} + \sqrt{3}\, a_{23} = 2\, \overset{0}{a}_{13}, \\ \sqrt{3}\, a_{11} - a_{21} = \overset{0}{a}_{21} + \sqrt{3}\, \overset{0}{a}_{22}, \quad \sqrt{3}\, a_{12} - a_{22} = \sqrt{3}\, \overset{0}{a}_{21} - \overset{0}{a}_{22}, \\ \sqrt{3}\, a_{13} - a_{23} = 2\, \overset{0}{a}_{23}, \\ 2\, a_{31} = \overset{0}{a}_{31} + \sqrt{3}\, \overset{0}{a}_{32}, \quad 2\, a_{32} = \sqrt{3}\, \overset{0}{a}_{31} - \overset{0}{a}_{32}, \quad a_{33} = \overset{0}{a}_{33}. \end{gathered} \tag{16}$$

Принимая во внимание а) и б), можно записать компоненты тензора анизотропии в следующем виде (ограничиваясь вторыми степенями разложения):

$$\begin{aligned} a_{11} &= a_0^{11} + a_1^{11} s_1^2 + a_2^{11} s_2^2 + a_3^{11} s_3^2, & a_{12} &= a_4^{12} s_1 s_2, & a_{31} &= a_4^{31} s_3 s_1, \\ a_{22} &= a_0^{22} + a_1^{22} s_1^2 + a_2^{22} s_2^2 + a_3^{22} s_3^2, & a_{21} &= a_4^{21} s_2 s_1, & a_{23} &= a_4^{23} s_2 s_3, \\ a_{33} &= a_0^{33} + a_1^{33} s_1^2 + a_2^{33} s_2^2 + a_3^{33} s_3^2, & a_{13} &= a_4^{13} s_1 s_3, & a_{32} &= a_4^{32} s_3 s_2. \end{aligned} \tag{17}$$

Подставляя в (16) значения компонент тензора анизотропии из (17), найдем:

$$\begin{gathered} a_4^{13} = a_4^{23}, \quad a_4^{31} = a_4^{32}, \quad a_1^{33} = a_2^{33}, \quad a_4^{12} = a_4^{21}, \\ a_1^{11} - a_2^{11} - a_4^{12} = 0, \quad a_1^{22} - a_2^{22} + a_4^{12} = 0, \\ a_0^{22} + a_3^{22} = a_0^{11} + a_3^{11}, \quad a_1^{22} - a_3^{22} = a_2^{11} - a_3^{11}. \end{gathered} \tag{18}$$

Таким образом, компоненты тензора примут вид (для гексагонального кристалла)

$$\begin{aligned} a_{11} &= l_0 + l_1 s_1^2 + l_2 s_3^2, & a_{12} &= a_{21} = l_1 s_1 s_2, & a_{31} &= l_5 s_3 s_1, \\ a_{22} &= l_0 + l_1 s_2^2 + l_2 s_3^2, & a_{13} &= l_4 s_1 s_3, & a_{32} &= l_5 s_3 s_2, \\ a_{33} &= l_0' + l_3 s_3^2, & a_{23} &= l_4 s_2 s_3, \end{aligned} \tag{19}$$

где

$$\begin{gathered} l_0 = a_0^{11} + a_2^{11} = a_0^{22} + a_1^{22}, \quad l_1 = a_1^{11} - a_2^{11} = a_2^{22} - a_1^{22}, \\ l_2 = a_3^{11} - a_2^{11} = a_3^{22} - a_1^{22}, \\ l_3 = a_3^{33} - a_1^{33}, \quad l_4 = a_4^{13} = a_4^{23}, \quad l_5 = a_4^{31} = a_4^{32}, \quad l_0' = a_0^{33} + a_1^{33}. \end{gathered} \tag{20}$$

Поступило
21 XI 1949

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Н. С. Акулов, Zs. f. Phys., 52, 389 (1928). [2] Н. С. Акулов, Zs. f. Phys, 87, 768 (1934). [3] Н. С. Акулов, Ферромагнетизм, 1939.