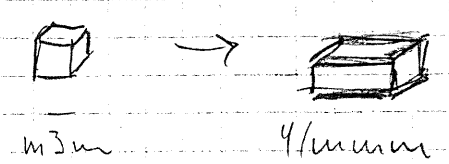
Eksamen i fag 74530 Strukturegenskaper for krystaller. Våren 1992.

LØSNING

a) Brytningsindeksen er definert som $n = \sqrt{\epsilon}$. Siden $\underline{\underline{\epsilon}}$ er en makroskopisk størrelse må symmetrien for representasjonsflaten være en supergruppe for punktgruppa $m\bar{3}m$. Dette er bare mulig ved isotropi.

b) Ved strekk blir [100] aksen unik. Den nye punktgruppa må bli $4/mmm$ og romgruppesymbolet kan skrives $F4/mmm$.



c) Vi har dielektrisk impermeabilitet

$$B_{ij} = \epsilon_0 \partial E_i / \partial D_j$$

og

$$\Delta B_{ij} = z_{ijk} E_k + \pi_{ijkl} \sigma_{kl}$$

der π_{ijkl} er piezo-optiske koeffisienter. Siden permittivitetstensoren $\underline{\underline{\epsilon}}$ er symmetrisk må $\Delta B_{ij} = \Delta B_{ji}$. Da må også $\pi_{ijkl} = \pi_{jikl}$. Dessuten gjelder $\pi_{ijkl} = \pi_{ijlk}$ fordi $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$.

d) For det første er π_{ijkl} tensorkomponenter. De transformerer slik når koordinatsystemet dreies:

$$\pi_{ijkl}' = a_{im} a_{jn} a_{kp} a_{lq} \pi_{mnpq}$$

Det er hensiktsmessig å tabellere π_{ij} istedet for π_{ijkl}. Dette er mulig fordi vi definerer

$$\pi_{mn} = \pi_{ijkl} \quad \text{når } n = 1, 2 \text{ og } 3$$

$$\pi_{mn} = 2\pi_{ijkl} \quad \text{nå } n = 4, 5 \text{ og } 6.$$

Spenningen uttrykkes ved hjelp av en 6×1 vektor.

Det samme gjør vi med forandringene i $\underline{B}$:

$$\underline{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix}, \qquad \Delta\underline{B} = \begin{bmatrix} \Delta B_1 \\ \Delta B_2 \\ \Delta B_3 \\ \Delta B_4 \\ \Delta B_5 \\ \Delta B_6 \end{bmatrix}$$

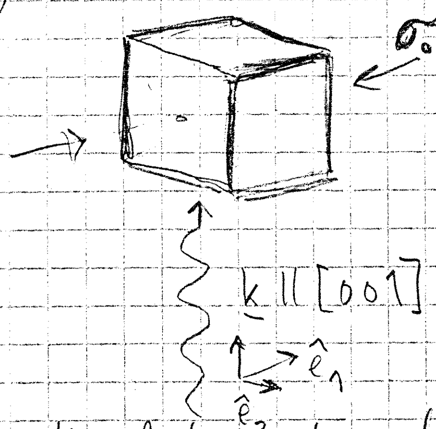
hvor $\sigma_{11} = \sigma_1$, $\sigma_{22} = \sigma_2$, $\sigma_{33} = \sigma_3$, $\sigma_{23} = \sigma_4$, $\sigma_{13} = \sigma_5$ og $\sigma_{13} = \sigma_6$.

Da kan fotoelastisk effekt skrives

$$\Delta B_m = \pi_{mn} \sigma_n \qquad (m, n = 1, 2 \dots 6)$$

Kolonnevektoren $\Delta\underline{B}$ defineres analogt $\underline{\sigma}$.

e)



Vi får følgende likning

$$\begin{bmatrix} \Delta B_1 \\ \Delta B_2 \\ \Delta B_3 \\ \Delta B_4 \\ \Delta B_5 \\ \Delta B_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{23} & 0 & 0 & 0 \\ \pi_{13} & \pi_{23} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Hovedaksesystemet blir <u>ikke</u> rotert under spenningspåkjenningen fordi $\Delta B_4 = \Delta B_5 = \Delta B_6 = 0$. Nå er

$$B_i = 1/\epsilon_i = 1/n_i^2 \qquad (i = 1, 2, 3)$$

Derfor må

$$\Delta B_i = -\frac{2}{n_i^3} \Delta n_i$$

som gir

$$\Delta n_i = -\frac{1}{2} n_i^3 \Delta B_i$$

dvs

$$\Delta n_1 = -\frac{1}{2} n^3 \pi_{11} \sigma_0$$

$$\Delta n_2 = -\frac{1}{2} n^3 \pi_{12} \sigma_0$$

som gjelder for bølger med polarisasjonsretningene $\hat{e}_1$ og $\hat{e}_2$.

(3)

Den isotrope brytningsindeksen kalles n. Faseleddene for de to svingeretningene er $(2\pi/\lambda) l n_1$ og $(2\pi/\lambda) l n_2$ når l er sidekanten på krystallen. Forskjellen er

$$\left(n - \tfrac{1}{2} n^3 \pi_{11} \sigma_0 - n + \tfrac{1}{2} n^3 \pi_{12} \sigma_0\right) = n_1 - n_2 = \Delta n$$

Dessuten gjelder for veilengdeforskjellen. (Bruker at $\Delta k = (\Delta n) k$)

$$1.02 \cdot 10^{-6} = a \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = a \frac{\Delta k}{k} = a |\Delta n| = a \tfrac{1}{2} n^3 \sigma_0 (\pi_{12} - \pi_{11})$$

Dvs. $\sigma_0 = 0.4897 \cdot 10^8\ \mathrm{Pa} \approx 500\ \mathrm{bar}$

a) Anta at A har a elementer og B har b elementer. Produktgruppen består da av elementene

$$C = A \otimes B = \{E, A_2, A_3 \cdots A_a\} \cdot \{E, B_2, B_3 \cdots B_b\}$$
$$= \{E, A_2, A_3 \cdots A_a, B_2, A_2 B_2 \cdots A_a B_b\}$$

Dette utgjør en gruppe hvis vi har kommutasjon, dvs. at

$$A_g B_k = B_k A_g$$

b) Inversjonsoperasjonen inverterer alle koordinatene

$$\{\bar{1}\} \underline{r} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = -\underline{r}$$

En to-foldig rotasjonsakse langs [001]aksen medfører

$$\{2\} \underline{r} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ z \end{bmatrix}$$

Skrueakse 2_1:

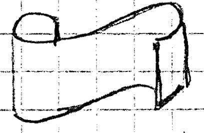
$$\{2_1\} \underline{r} = \{2\} \underline{r} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ z + \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Speiling går som

$$\{m\} \underline{r} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ -z \end{bmatrix}$$

Speiling og inversjon medfører overgang til venstrehånds koordinatsystem.

c) Punktgruppa $2/m$ har et speilplan $\perp$ en 2-akse
Som f.eks.

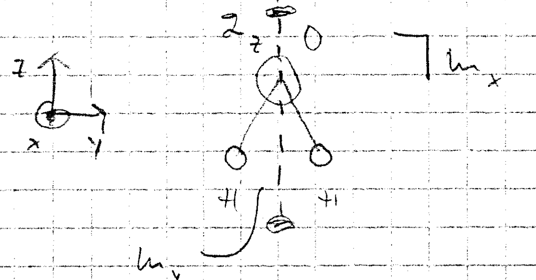


$2/m$

Her har vi åpenbart elementene $\{E, 2, m, \bar{1}\} = 2/m$
Men $\{E,2\}\cdot\{E,\bar{1}\} = \{E, 2, \bar{1}, 2\bar{1}\} = 2\otimes\bar{1}$ fordi vi har kommutasjon – siden $\{\bar{1}\}$-matriseoperatoren er $(-1)\times$enhetsmatrisen.
Gjenstår nå å vise at $2\bar{1} = m$. Dette ser vi lettest ved hjelp av

$$\{2\}\{\bar{1}\} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \equiv \{m\}$$

Punktgruppa $2mm$ beskriver f.eks. H_2O og har elementer $2mm = \{E, 2, m_x, m_y\}$.



Men $2\otimes m_x = \{E,2\}\cdot\{E,m_x\} = \{E, 2, m_x, 2m_x\}$
Igjen har vi åpenbart kommutasjon og siden

$$\{2\}\{m_x\} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \{m_y\}$$

har vi også vist at $2\otimes m = 2mm$.

d) Generell form for en ikke-symmorf romgruppeoperator er

$$\{\underline{\underline{R}}|\underline{\tau}\}\underline{r} = \underline{\underline{R}}\,\underline{r} + \underline{\tau}$$

der τ tar vare på gittertranslasjoner og translasjoner p.g.a. skruakser og glideplan. Rotasjon og speiling er tatt vare på av $\underline{\underline{R}}$-matrisen. Den sistnevnte matrisen kan medføre makroskopiske avstander mens translasjonene p.g.a. skruakser og glideplan høyst beløper seg til noen få ångstrøm. Egentlig er makroskopiske egenskaper bestemt av $\underline{\underline{R}}$ alene i $\{\underline{\underline{R}}|\underline{\tau}\}$

e) Etter det vi fant i d) er pyroelektriske egenskaper bestemt av punktgruppa til romgruppa. Dette må bety at en TGS-krystall er pyroelektrisk i P2₁ fasen fordi 2-punktgruppa er en polar gruppe. Polare grupper er undergrupper av symmetrigruppa for polarisasjonsvektoren $\underline{P}$.

Oppgave 3.

a) Kap. 9 i Guinier, sidene 180 og 181.

b) Kap. 9 i Guinier, sidene 198 - 200.

c) Kap. 8.26 i Burns & Glazer, sidene 194 - 196.