

**ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
КРИСТАЛЛОВ**

УДК 548.55

К 70-летию Института кристаллографии РАН

**КОЛИЧЕСТВО ОПТИЧЕСКИХ ОСЕЙ
В ТРИКЛИННЫХ ПОГЛОЩАЮЩИХ КРИСТАЛЛАХ**

© 2013 г. Т. Г. Головина, А. Ф. Константинова, К. К. Константинов, Е. А. Евдищенко

Институт кристаллографии РАН, Москва

E-mail: tatgolovina@mail.ru

Поступила в редакцию 20.05.2013

Рассмотрены возможные варианты количества оптических осей в поглощающих триклинных кристаллах. В большинстве таких кристаллов имеются четыре круговые оптические оси, но возможно существование кристаллов с одной изотропной оптической осью, двумя или тремя круговыми оптическими осями, или одновременно с одной изотропной и одной или двумя круговыми оптическими осями. Показано существенное отличие частных случаев от общего случая кристалла с четырьмя круговыми осями. Представлен вид комплексного тензора диэлектрической проницаемости в зависимости от числа оптических осей. Рассчитаны эллиптичности собственных волн для таких кристаллов, а также эллиптичности прошедшего света при нормальном падении на кристалл волны правой или левой круговой поляризации.

DOI: 10.7868/S002347611306012X

ВВЕДЕНИЕ

Основы теории распространения света в поглощающих ромбических кристаллах заложены Фойгтом, Друдом и Борном [1–3]. В этих работах использовалась система главных осей. Для ромбического кристалла такое упрощение всегда применимо, но оно может быть неприменимым для моноклинных и триклинных кристаллов. Федоровым построена общая теория распространения света в поглощающих кристаллах с помощью ковариантного метода [4]. В этом методе не используется какая-либо система координатных осей, поэтому он применим к любым кристаллам, даже в случае, когда комплексный тензор диэлектрической проницаемости не приводится к диагональному виду. В [4–7] рассмотрены шесть различных вариантов числа оптических осей в поглощающих моноклинных и триклинных кристаллах при разном виде тензора диэлектрической проницаемости. В [8, 9] подробно изучены эти варианты для поглощающих моноклинных кристаллов. Также проводилось сравнение между моноклинными и ромбическими кристаллами.

В предлагаемой работе рассматриваются триклинные поглощающие кристаллы с разным количеством оптических осей. Показаны соотношения, которым должны удовлетворять компоненты тензора диэлектрической проницаемости для частных случаев таких кристаллов, а также изменение количества оптических осей при отклонении от этих соотношений. Проведено сравнение поглощающих триклинных кристаллов с поглощающими моноклинными и ромбическими

кристаллами. При расчетах использован матричный метод Берремана [10–12].

**ОПТИЧЕСКИЕ ОСИ В ПОГЛОЩАЮЩИХ
ТРИКЛИННЫХ КРИСТАЛЛАХ**

Для общего случая поглощающих триклинных кристаллов (классы 1, $\bar{1}$) обратный тензор диэлектрической проницаемости ε^{-1} записывается в виде [4]:

$$\varepsilon^{-1} = a + b(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}'' + \mathbf{c}'' \cdot \mathbf{c}'), \quad (1)$$

$$\mathbf{c}' = \{c'_1, c'_2, c'_3\}, \quad \mathbf{c}'' = \{c''_1, c''_2, c''_3\},$$

$\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}''$ — диада, \mathbf{c}' , \mathbf{c}'' — комплексные векторы. Вектор \mathbf{c} , т. е. любой из векторов \mathbf{c}' и \mathbf{c}'' , является линейным, если $[\mathbf{c}\mathbf{c}^*] = 0$; круговым, если $\mathbf{c}^2 = 0$; эллиптическим, если $[\mathbf{c}\mathbf{c}^*] \neq 0$ и $\mathbf{c}^2 \neq 0$ [4]. Направляющие векторы \mathbf{n}_{\pm} оптических осей находятся из соотношения

$$\mathbf{n}_{\pm} = \frac{\sqrt{(\mathbf{c}^*)^2} \mathbf{c} + \sqrt{\mathbf{c}^2} \mathbf{c}^* \pm i[\mathbf{c}\mathbf{c}^*]}{|\mathbf{c}|^2 + |\mathbf{c}^2|}. \quad (2)$$

Запишем систему уравнений (1) в виде

$$\varepsilon^{-1} = \begin{pmatrix} a + 2bc'_1c''_1 & b(c'_1c''_2 + c'_2c''_1) & b(c'_1c''_3 + c'_3c''_1) \\ b(c'_1c''_2 + c'_2c''_1) & a + 2bc'_2c''_2 & b(c'_2c''_3 + c'_3c''_2) \\ b(c'_1c''_3 + c'_3c''_1) & b(c'_2c''_3 + c'_3c''_2) & a + 2bc'_3c''_3 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Получается шесть уравнений. Еще два уравнения добавляются при задании типа векторов \mathbf{c}' и \mathbf{c}'' (линейный, круговой или эллиптический).

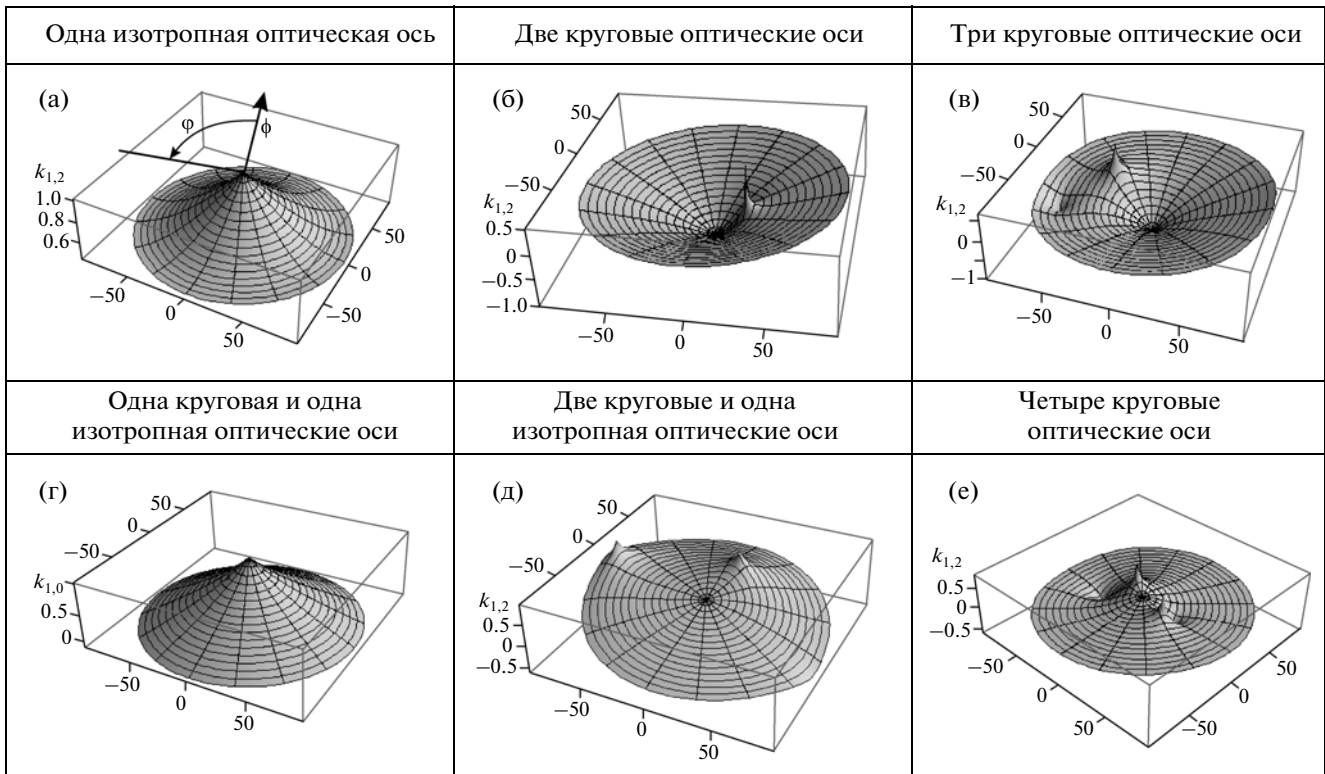


Рис. 1. Зависимости эллиптичностей собственных волн $k_{1,2}(\phi, \varphi)$ для разных случаев поглощающих триклинных кристаллов.

Обычно вдоль оптической оси в триклинном поглощающем кристалле распространяются не две, а одна волна, поляризованная по кругу. Такие оси названы Фойгтом [13] поворотными. Также их называют или сингулярными, или винтовыми, или круговыми осями. В дальнейшем изложении будем называть такие оптические оси круговыми.

В большинстве случаев векторы \mathbf{c}' , \mathbf{c}'' эллиптические, и каждому из них соответствуют две круговые оптические оси. Если есть круговой вектор, то ему отвечает только одна круговая оптическая ось, а линейному вектору соответствует изотропная оптическая ось. Вдоль изотропной оси возможно распространение волны любой поляризации.

На рис. 1 показаны зависимости эллиптичностей собственных волн $k_{1,2}$ от угла падения ϕ и угла поворота φ кристалла вокруг оси Z для всех возможных случаев поглощающих триклинных кристаллов, на рис. 2 – эллиптичности прошедшего света для правой и левой круговой поляризации падающего света при нормальном падении в зависимости от угла θ поворота плоскости YOZ вокруг оси X . Для наглядности в каждом из рассматриваемых случаев ориентация кристалла в лабораторной системе координат выбрана отдельно.

Рассмотрим более подробно каждый случай.

Одна изотропная оптическая ось: $\mathbf{c}'^2 = 0$, $\mathbf{c}'\mathbf{c}'' = 0$, $\mathbf{c}''^2 = 1$, $\mathbf{c}'' = \mathbf{c}''^*$ (\mathbf{c}' – круговой вектор, \mathbf{c}'' – линейный, $\mathbf{c}'\mathbf{c}'' = 0$) [4]. Комплексный тензор диэлек-

трической проницаемости не приводится к диагональному виду. Пусть изотропная оптическая ось направлена вдоль оси Z (это всегда можно добиться поворотом системы координат). Тогда линейный вектор должен иметь вид $\mathbf{c}'' = \{0, 0, 1\}$, а круговой – $\mathbf{c}' = \{c'_1, c'_2, 0\}$. В таком случае круговая оптическая ось, отвечающая круговому вектору, совпадает по направлению с изотропной оптической осью, в результате получается изотропная оптическая ось.

Из (3), учитывая, что $\mathbf{c}'^2 = 0$, и обозначив $bc'_1 = \delta$, получим

$$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & \delta \\ 0 & \alpha & \pm i\delta \\ \delta & \pm i\delta & \alpha \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где α, δ – комплексные числа. Возьмем тензор (4) со знаком “+” перед $i\delta$ и запишем собственные значения и собственные векторы дифференциальной матрицы распространения Δ [10–12] для такого тензора в зависимости от угла отклонения θ оптической оси от оси Z .

Собственные значения

$$\xi = \{-n_1, n_1, -n_2, n_2\}, \quad (5)$$

$$n_{1,2} = \sqrt{\frac{2\alpha \mp \delta \pm \delta \exp[\mp 2i\theta]}{2\alpha^2 - \delta^2 + \delta^2 \cos 2\theta - 2i\alpha\delta \sin 2\theta}}$$

Собственные векторы

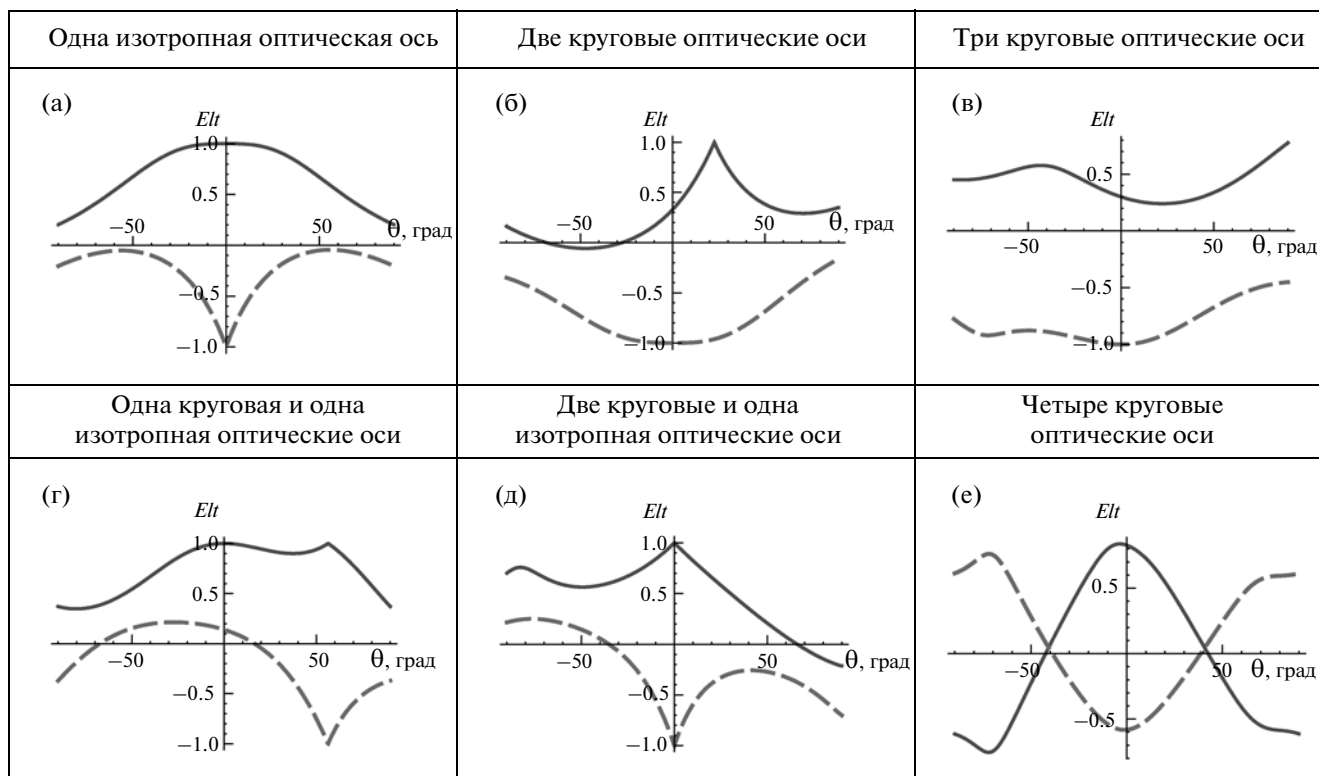


Рис. 2. Зависимости эллиптичностей прошедшего света EIt от угла θ при правой (сплошная линия) и левой (пунктир) круговой поляризации падающего света для разных случаев поглощающих триклинных кристаллов.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{u}_3 \\ \mathbf{u}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (i \cos \theta + \sin \theta)/n_1 & -i \cos \theta - \sin \theta & -1/n_1 & 1 \\ -(i \cos \theta + \sin \theta)/n_1 & -i \cos \theta - \sin \theta & 1/n_1 & 1 \\ (i \cos \theta - \sin \theta)/n_2 & -i \cos \theta + \sin \theta & -1/n_2 & 1 \\ -(i \cos \theta - \sin \theta)/n_2 & -i \cos \theta + \sin \theta & 1/n_2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Собственные векторы матрицы Δ имеют тот же общий вид, что и для моноклинного кристалла, имеющего одну круговую и одну изотропную оптические оси (в случае, когда круговая ось параллельна оси Z , а изотропная – оси Y) [8]. Используя (6), приведем выражение для эллиптичности собственных волн в зависимости от угла отклонения θ оптической оси от оси Z

$$k_{1,2} = \text{tg}[\arcsin(\cos \theta)/2]. \quad (7)$$

На рис. 1а приведены зависимости $k_{1,2}(\theta)$ для триклинного поглощающего кристалла с одной изотропной оптической осью. Максимум в начале координат соответствует положению оптической оси. Эллиптичности прошедшего света EIt для правой и левой круговой поляризации падающего света в точке оптической оси ($\theta = 0$) равны соответственно $+1$ и -1 (рис. 2а), т.е. прошедший свет сохраняет правую и левую круговую поляризацию.

Две круговые оптические оси: \mathbf{c}' – круговой вектор, \mathbf{c}'' – эллиптический, $\mathbf{c}'\mathbf{c}'' = 0$, $\mathbf{c}'^2 = 0$, $\mathbf{c}''^2 = 1$. Комплексный тензор диэлектрической проницаемости не приводится к диагональному виду. Пусть ориентация кристалла такова, что оптическая ось, отвечающая круговому вектору \mathbf{c}' , параллельна оси Z . Тогда $\mathbf{c}' = \{c'_1, c'_2, 0\}$, $\mathbf{c}'' = \{c''_1, c''_2, c''_3\}$.

Пусть $c'_1 = ic'_2$ (возможно также $c'_1 = -ic'_2$). Используя (3) и обозначив $\gamma = 2bc'_2c''_2$, $\eta = c''_3/(2c''_2)$, получим ε^{-1} в виде

$$\varepsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha - \gamma & i\gamma & i\gamma\eta \\ i\gamma & \alpha + \gamma & \gamma\eta \\ i\gamma\eta & \gamma\eta & \alpha \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где α, γ – комплексные числа. Рассмотрим случай, когда η – вещественная величина. Тогда обе круговые оптические оси лежат в плоскости YOZ .

Одна из оптических осей параллельна оси Z ($\theta = 0$). Другая ось отклоняется от Z на угол θ , величина которого в зависимости от η имеет вид:

1) $\eta^2 < 1/4$, $\theta = -\text{sgn}(\eta)\arccos[(1 - 4\eta^2)/(1 + 4\eta^2)]$. При этом эллиптичность собственных волн имеет один знак в окрестности обеих оптических осей.

2) $\eta^2 > 1/4$, $\theta = \text{sgn}(\eta)\arccos[(4\eta^2 - 1)/(4\eta^2 + 1)]$, эллиптичность собственных волн имеет разные знаки в окрестностях разных оптических осей.

На рис. 1б максимум и минимум эллиптичности собственных волн $k_{1,2}(\phi, \varphi)$ соответствуют положениям круговых оптических осей. На рис. 2б хорошо видно, что при падении в направлении одной из оптических осей волны правой круговой поляризации эллиптичность прошедшего света равна +1, т.е. прошедшая волна также имеет правую круговую поляризацию. При падении в том же направлении волны левой круговой поляризации прошедший свет эллиптически поляризован. В направлении другой оптической оси, наоборот, при падении волны левой круговой поляризации прошедший свет имеет такую же поляризацию, а для правой круговой поляризации падающего света прошедший свет эллиптически поляризован.

Три круговые оптические оси: \mathbf{c}' – круговой вектор, \mathbf{c}'' – эллиптический, $\mathbf{c}'^2 = 0$, $\mathbf{c}''^2 = 1$. Уже нет условия $\mathbf{c}'\mathbf{c}'' = 0$. Так же как и в двух предыдущих случаях, тензор ϵ не приводится к диагональному виду. Пусть ориентация кристалла такова, что оптическая ось, отвечающая круговому вектору \mathbf{c}' , параллельна оси Z . Тогда $\mathbf{c}' = \{c'_1, c'_2, 0\}$, $\mathbf{c}'' = \{c''_1, c''_2, c''_3\}$.

Пусть $c'_1 = ic'_2$. Используя (3) и обозначая $\gamma = 2bc'_2c''_2$, $\eta = -c'_1c''_1/c'_2c''_2$, $\delta = bc'_2c''_3$, запишем тензор ϵ^{-1} в виде

$$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha - \eta\gamma & i\gamma(\eta + 1)/2 & i\delta \\ i\gamma(\eta + 1)/2 & \alpha + \gamma & \delta \\ i\delta & \delta & \alpha \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где $\alpha, \gamma, \eta, \delta$ – комплексные числа, $\eta \neq 1$ (при $\eta = 1$ получается кристалл с двумя круговыми оптическими осями).

На рис. 1в максимумы и минимумы эллиптичностей собственных волн соответствуют положениям трех круговых оптических осей. Видно, что при использованных данных эллиптичность собственных волн для одной оптической оси положительна, а для двух других отрицательна. На рис. 2в видна только одна оптическая ось – та, которая соответствует направлению $\theta = 0$, а две другие оси находятся в другой плоскости. При распространении вдоль этой оси эллиптичность прошедшего света при левой круговой поляризации падающего света равна –1, т.е. прошедшая волна также имеет левую круговую поляризацию,

а при падении волны правой круговой поляризации прошедшая волна эллиптически поляризована.

Одна круговая и одна изотропная оптические оси. В этом случае или \mathbf{c}' – круговой вектор, \mathbf{c}'' – линейный, или \mathbf{c}'' – эллиптический, но $\mathbf{c}'^*\mathbf{c}'' = 0$. Тензор ϵ не приводится к диагональному виду. Пусть ориентация кристалла такова, что круговая оптическая ось расположена вдоль оси Z , а изотропная лежит в плоскости YOZ , тогда $\mathbf{c}' = \{c'_1, c'_2, 0\}$, $\mathbf{c}'' = \{0, c''_2, c''_3\}$. Обозначим $\gamma = 2bc'_2c''_2$, $\eta = c''_3/(2c''_2)$, и, используя (3), запишем ϵ^{-1} в виде

$$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & i\gamma/2 & i\gamma\eta \\ i\gamma/2 & \alpha + \gamma & \gamma\eta \\ i\gamma\eta & \gamma\eta & \alpha \end{pmatrix}, \quad (10)$$

при этом η – вещественная величина, α, γ – комплексные числа.

Зависимость $k_{1,2}(\phi, \varphi)$ в этом случае (рис. 1г) аналогична $k_{1,2}(\phi, \varphi)$ для случая одной изотропной оптической оси (рис. 1а). Но на рис. 1г максимум $k_{1,2}(\phi, \varphi)$ в начале координат соответствует положению круговой оптической оси, а изотропная ось не видна. Обе оптические оси видны на рис. 2г. В направлении круговой оптической оси ($\theta = 0$) при правой круговой поляризации падающего света прошедший свет также имеет правую круговую поляризацию (эллиптичность прошедшего света $El = 1$), а при падении волны левой круговой поляризации прошедшая волна эллиптически поляризована. При этом в точке изотропной оптической оси ($\theta \approx 55^\circ$) прошедшая волна сохраняет поляризацию, и соответственно, при падении волны правой или левой круговой поляризации прошедшая волна также имеет правую или левую круговую поляризацию.

При этом случай одной круговой и одной изотропной оптических осей для триклинного кристалла отличается от соответствующего случая для моноклинного кристалла [8, 9] только тем, что круговая и изотропная оптические оси не перпендикулярны друг другу. Если эти оси совпадут по направлению, то получится кристалл с одной изотропной оптической осью. Зависимости $k_{1,2}(\phi, \varphi)$ при такой ориентации кристалла, когда круговая оптическая ось расположена вдоль Z , для этих трех случаев аналогичны, а положение изотропной оптической оси не влияет на эллиптичность собственных волн.

Две круговые и одна изотропная оптические оси. В этом случае или \mathbf{c}' – эллиптический вектор, \mathbf{c}'' – линейный, или $\mathbf{c}', \mathbf{c}''$ – эллиптические, но $\mathbf{c}'\mathbf{c}''^* = 0$. Тензор ϵ приводится к диагональному виду. Рассмотрим такую систему координат, в которой изотропная оптическая ось параллельна оси Z . При этом $\mathbf{c}' = \{c'_1, c'_2, c'_3\}$, $\mathbf{c}'' = \{0, 0, 1\}$. Тогда, исполь-

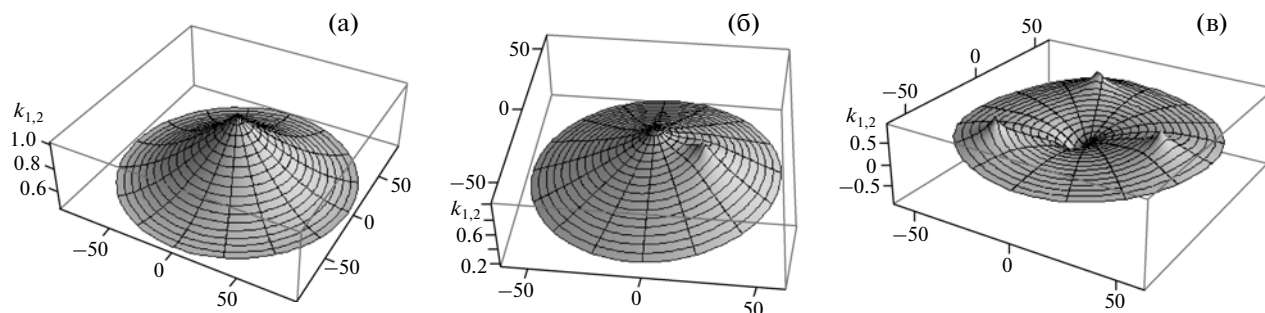


Рис. 3. Переход от случая одной изотропной оптической оси к случаям двух или четырех круговых оптических осей: а — одна изотропная оптическая ось, б — появление двух круговых оптических осей при изменении ϵ_{33} , в — появление четырех круговых оптических осей при изменении любой компоненты ϵ , кроме ϵ_{33} .

зую (3) и обозначив $\delta_1 = bc'_1$, $\delta_2 = bc'_2$, $\delta_3 = bc'_3$, запишем обратный тензор диэлектрической проницаемости ϵ^{-1} в виде

$$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & \delta_1 \\ 0 & \alpha & \delta_2 \\ \delta_1 & \delta_2 & \alpha + 2\delta_3 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где α , δ_i ($i = 1, 2, 3$) — комплексные числа.

На рис. 1д видно положение двух круговых оптических осей, а изотропная ось не видна. На рис. 2д видно положение изотропной оптической оси ($\theta = 0$), в направлении которой эллиптичности прошедшего света равны ± 1 , при этом круговые оптические оси расположены в другой плоскости.

Четыре круговые оптические оси. Это самый общий и самый распространенный случай. Оба вектора \mathbf{c}' , \mathbf{c}'' эллиптические. Тензор ϵ приводится к диагональному виду. Кристалл имеет четыре круговые оптические оси. В отличие от ромбических и моноклинных кристаллов здесь нет никакой симметрии в расположении этих осей. Рассматривается такая система координат, в которой действительная часть тензора диэлектрической проницаемости имеет диагональный вид.

На рис. 1е показаны зависимости эллиптичностей собственных волн $k_{1,2}(\phi, \varphi)$. Максимумы и минимумы эллиптичностей соответствуют положениям круговых оптических осей. Видно, что оси расположены несимметрично. На рис. 2е оптические оси не попадают в плоскость рисунка, поэтому при падении волны круговой поляризации прошедшая волна эллиптическая для всех углов θ поворота плоскости YOZ вокруг оси X .

Для реализации каждого из частных случаев, когда в кристалле меньше четырех оптических осей, необходимо выполнение достаточно строгих ограничений на компоненты тензора диэлектрической проницаемости кристалла ϵ . При изменении какой-либо из этих компонент меняется и количество оптических осей. На рис. 3 показана

но, как меняется эллиптичность собственных волн при изменении компонент тензора ϵ . Если взять кристалл с одной изотропной оптической осью (рис. 3а) и немного изменить величину ϵ_{33} , получим кристалл с двумя круговыми оптическими осями (рис. 3б). Если изменить любую другую компоненту ϵ , получается общий случай четырех круговых оптических осей (рис. 3в).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследованы шесть вариантов триклинных поглощающих кристаллов, отличающихся количеством и типом оптических осей. В триклинных кристаллах нет выделенного направления, поэтому во всех случаях оптические оси расположены произвольно в отличие от моноклинных поглощающих кристаллов, где также существуют шесть вариантов числа и типа оптических осей. При этом в ромбических поглощающих кристаллах возможны только два варианта: либо две изотропные, либо четыре круговые оптические оси. В общем случае в триклинных поглощающих кристаллах, также как и в моноклинных, и в ромбических, существуют четыре круговые оптические оси.

Существуют триклинные кристаллы, имеющие только одну изотропную оптическую ось, расположенную произвольно. Однако в моноклинном кристалле возможно существование одной круговой оптической оси, которая расположена вдоль оси второго порядка или перпендикулярно плоскости симметрии.

В триклинном кристалле, как и в моноклинном, могут существовать две круговые оптические оси, три круговые оптические оси, а также одна круговая и одна изотропная или две круговые и одна изотропная оптические оси. Однако в триклинном кристалле в отличие от моноклинного нет никакой симметрии в расположении этих осей.

Для триклинного кристалла соотношение знаков эллиптичностей в направлениях оптических

осей может быть любым. В моноклинном кристалле обычно две оси имеют положительную эллиптичность, а две — отрицательную, но возможен случай, когда эллиптичность собственных волн имеет один знак в направлении всех четырех оптических осей. Для ромбического поглощающего кристалла с четырьмя круговыми оптическими осями эллиптичность собственных волн в направлении двух осей положительна, а для двух других осей отрицательна.

Во всех низкосимметричных поглощающих кристаллах возможны разные варианты количества и типов оптических осей. В большинстве таких кристаллов имеются четыре круговые оптические оси. Все другие случаи являются редкими, так как для их реализации необходимы определенные соотношения между показателями преломления и коэффициентами поглощения. Но возможно, что такие варианты могут появиться при фазовых переходах, магнитных и электрических явлениях, при наличии различных примесей и в других ситуациях, и это надо учитывать при исследовании низкосимметричных поглощающих кристаллов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Voigt W.* Kompendium der theoretischen Physik. Bd. 2: Elektrizität and Magnetismus, Optik. Leipzig, 1896.
2. *Друде П.* Оптика. М.: ОНТИ, 1935. 458 с.
3. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. М.: Наука, 1970. 855 с.
4. *Федоров Ф.И.* Оптика анизотропных сред. Минск: Изд-во АН БССР. 1958. 380 с.
5. *Гончаренко А.М.* Дис. “Исследование оптических свойств поглощающих кристаллов на основе инвариантного метода” канд. физ.-мат. наук. Минск, БГУ, 1960. 159 с.
6. *Гончаренко А.М.* // Кристаллография. 1959. Т. 4. Вып. 3. С. 393.
7. *Гончаренко А.М.* // Кристаллография. 1959. Т. 4. Вып. 5. С. 727.
8. *Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Евдищенко Е.А. и др.* // Кристаллография. 2012. Т. 57. № 6. С. 886.
9. *Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Евдищенко Е.А. и др.* // Проблемы физики, математики и техники. 2012. № 4 (13). С. 15.
10. *Berreman D.W.* // J. Opt. Soc. Am. 1972. V. 62. P. 502.
11. *Константинова А.Ф., Константинов К.К., Набатов Б.В., Евдищенко Е.А.* // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 4. С. 702.
12. *Константинова А.Ф., Набатов Б.В., Евдищенко Е.А., Константинов К.К.* // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 5. С. 879.
13. *Voigt W.* // Gött. Nachr. 1902. V. 1.