

## НЕЛИНЕЙНЫЕ ТЕНЗОРНЫЕ ФУНКЦИИ ОТ НЕСКОЛЬКИХ ТЕНЗОРНЫХ АРГУМЕНТОВ

В. В. Лохин, Л. И. Седов

(Москва)

Многие основные геометрические и физические понятия представляют собой скалярные или тензорные величины. Математическая формулировка разнообразных закономерностей геометрической или физической природы осуществляется с помощью скалярных или тензорных соотношений.

Тензорная запись уравнений позволяет формулировать инвариантные закономерности, независимые от выбора системы координат. Тензорные характеристики и тензорные уравнения обладают дополнительными инвариантными свойствами и частными особенностями, когда изучаемые геометрические или физические явления, объекты, законы и свойства допускают симметрию.

Ниже развиваются методы для автоматического учета свойств симметрии как в линейных, так и в нелинейных задачах при помощи выделения соответствующих определяющих параметров, что связано с главными посылками в постановках исследуемых задач. Соответствующие выводы о действии симметрии получаются с помощью методов, аналогичных развитым в близкой по своему существу теории подобия и размерности [1].

Предлагаемая работа посвящена разрешению двух основных задач.

а) Показано, что свойства текстур и кристаллов можно задавать при помощи тензоров, и фактически установлены простые системы тензоров, как совокупности параметрических геометрических величин, определяющих и задающих свойства симметрии для всех 7 типов текстур и для всех 32 классов кристаллов.

б) Установлен общий вид формул для тензоров произвольного ранга, когда эти тензоры можно рассматривать как функции системы аргументов, состоящей из ряда скаляров и нескольких независимых тензоров различных рангов.

Обе задачи тесно связаны с рассмотрением системы преобразований координат, образующих некоторую группу симметрии.

Свойства симметрии играют фундаментальную роль в физике. Специализация вида функций и вида тензоров различных рангов, инвариантных относительно соответствующих групп симметрии, исследованы во многих работах. Соответствующие выводы использованы и послужили источником открытия новых эффектов в множестве различных приложений.

Сводка основных данных для различных конкретных примеров содержится в книге Дж. Ная [2], там же имеются подробные литературные ссылки на предшествующие работы.

В алгебре развита общая теория получения и свойств полиномиальных относительно компонент тензоров и векторов скалярных инвариантов относительно конечных групп преобразований. Для всякой ортогональной конечной группы  $G$  показано [3], что всегда существует целый рациональный базис полиномиальных инвариантов, представляющий собой конечное число скалярных инвариантных многочленов, составленных из компонент данных тензоров и векторов, такой, что через него можно выразить любой инвариантный многочлен, составленный из этих же компонент.

Целый рациональный базис образует систему инвариантов относительно конечного числа преобразований группы  $G$ , но очевидно, что его элементы — полиномы из компонент данных тензоров — вообще не инвариантны относительно любых преобразований координат, хотя и содержат в своем числе такие инварианты. Число элементов

целого рационального базиса, зависящее только от группы и от заданного набора тензоров и векторов, вообще больше числа независимых переменных компонент данной системы тензоров и векторов и, следовательно, элементы целого рационального базиса, вообще говоря, функционально зависимы.

Фактическое построение целого рационального базиса для текстур и для кристаллических групп производилось в работах Дёринга [4], Смита и Ривлина [5], Пипкина и Ривлина [6], и Ю. И. Сиротина [7,8]. Ниже показано, что для построения тензорных функций необходимо и достаточно пользоваться полной системой функционально независимых совместных инвариантов [9,10], образованных из компонент тензоров, задающих группы симметрии и других тензорных аргументов.

Построение примеров скаляров и тензоров с заданной симметрией дано в статьях Смита и Ривлина [5,6,11,12], в книге С. Багавантама и Т. Венкатарайуду [13], в работах Яна [14], А. В. Шубникова [15,16,17] и Ю. И. Сиротина [7,8,18,19]. В работе В. А. Копчика [20] рассматривались различные тензоры физической природы, симметрию кристалла он определяет, как «группу пересечения симметрий, существующих у кристалла свойств, наблюдаемых в данный момент» (стр. 935).

Тензоры, являющиеся функциями тензорных аргументов, рассматривались в случае тензоров второго ранга.

В этом случае функциональные связи между тензорами сводятся к функциональным соотношениям между квадратными матрицами. В этой области основные результаты сводятся к формуле Гамильтона—Кэли и к ее обобщению на случай нескольких матричных аргументов [21-24, 25-28] (тензоров второго ранга). Однако в этих обобщениях рассматривались в основном только полиномиальные функции матриц и компонент тензоров.

1°. Основные понятия. Как известно, тензоры можно рассматривать как инвариантные объекты, независимые от выбора системы координат, которые определяются скалярными компонентами в соответствующем базисе. Тензорный базис можно вводить различными способами, в частности, всегда можно взять в качестве базиса полиадные произведения из векторов базиса координатной системы в некотором многообразии-пространстве.

Для простоты в дальнейшем будем рассматривать только тензоры в трехмерном пространстве.

Пусть  $x^1, x^2, x^3$  — координаты точек пространства и  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$  — векторы ковариантного базиса<sup>1</sup>.

Обозначим через  $\mathbf{H}$  тензор ранга  $r$  и через  $H^{\alpha_1 \dots \alpha_r}$  его компоненты в координатном базисе  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ .

В дальнейшем будем пользоваться представлением тензора  $\mathbf{H}$  в виде суммы

$$\mathbf{H} = H^{\alpha_1 \dots \alpha_r} \varepsilon_{\alpha_1} \dots \varepsilon_{\alpha_r} \quad (1.1)$$

где суммирование подразумевается по всем индексам  $\alpha_1, \dots, \alpha_r$ , пробегающим значение 1, 2, 3. В общем случае формула (1.1) содержит  $3^r$  линейно-независимых слагаемых, каждое из которых можно рассматривать как специальный тензор.

Заметим, что для одной и той же системы координат можно вводить различные континуальные многообразия и соответственно различные векторы базисов. При одинаковых координатах  $x^i$  и одинаковых компонентах  $H^{\alpha_1 \dots \alpha_r}$  можно рассматривать различные тензоры, соответствующие разным базисам.

В частности, такого рода различные многообразия можно рассматривать как различные положения данной среды при использовании замороженной Лагранжевой си-

<sup>1</sup> Система координат произвольная.

стемы координат, движущейся и деформирующейся с течением времени [26]. Возможны также случаи, когда для заданной Лагранжевой системы координат соответствующие различные многообразия имеют разную метрику. Таким образом, можно рассматривать одновременно разные тензоры с данными одинаковыми компонентами, но в различных базисах и в различных пространствах, некоторые из которых могут быть евклидовыми, а другие неевклидовыми (Kondo, Kröner, Vilby и др.).

Дальнейшая теория будет развита для тензоров в метрических пространствах.

Обозначим через  $ds$  расстояние между точками с координатами  $x^i$  и  $x^i + dx^i$ . Пусть величина  $ds^2$  определена формулой  $ds^2 = g_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta$ .

Матрица  $\|g_{ij}\|$  образует ковариантные компоненты фундаментального матричного тензора  $g$ . Обратная матрица  $\|g^{ij}\|$  — контравариантные компоненты. Контравариантные векторы базиса  $\varepsilon^i$  определяются формулами  $\varepsilon^i = g^{i\alpha} \varepsilon_\alpha$ .

Для фундаментального метрического тензора  $g$  верны формулы:

$$g = g_{\alpha\beta} \varepsilon^\alpha \varepsilon^\beta = g^{\alpha\beta} \varepsilon_\alpha \varepsilon_\beta = \delta_\beta^\alpha \varepsilon_\alpha \varepsilon^\beta \quad (\delta_j^i \text{ — символ Кронекера}) \quad (1.2)$$

Жонглирование индексами компонент различных тензоров осуществляется при помощи  $g_{ij}$  и  $g^{ij}$ . Формулу (1.1) можно представить в виде:

$$H = \sum_{s=1}^p k_s H_s \quad (1.3)$$

где  $k_s$  — скаляры, а  $H_s$  — некоторые тензоры ранга  $r$ .

Дальше будем всегда предполагать, что тензоры  $H_s$  линейно независимы. Очевидно, что  $p \leq 3^r$ .

Пусть компоненты тензора  $H$  независимо от выбора системы координат являются одними и теми же функциями компонент  $m$  тензоров

$$T_x = T_x^{\alpha_1 \dots \alpha_{r_x}} \varepsilon_{\alpha_1} \dots \varepsilon_{\alpha_{r_x}} \quad (x = 1, \dots, m) \quad (1.4)$$

Целые числа  $r_1, \dots, r_m$  определяют ранги тензоров  $T_x$ . В общем случае числа  $r_1, \dots, r_m$  различны между собой и не равны  $r$ .

По определению назовем тензор  $H$  функцией тензоров  $T_1, \dots, T_m$ . Тензоры  $T_x$ , среди которых могут быть как переменные, так и постоянные, являются тензорными аргументами тензорной функции  $H$ .

Если из тензоров  $T_x$  можно составить  $3^r$  линейно независимых тензоров  $H_s$  ранга  $r$ , то в этом случае для тензора  $H$  будет верна формула (1.4), в которой скаляры  $k_s$  зависят только от совместных инвариантов системы тензоров  $T_x$  и возможно от других заданных дополнительно скалярных аргументов.

Ниже рассмотрены только такие тензорные функции, когда среди тензорных аргументов  $T_x$  содержится тензор  $g$ .

Тензоры  $H_s$  можно строить из тензоров  $T_x$  при помощи двух тензорных операций: умножения и свертывания.

Операция свертывания по любым двум индексам всегда возможна, в силу наличия среди тензорных аргументов тензора  $g$ . Неопределенное умножение нескольких тензоров приводит к тензору, ранг которого равен сумме рангов сомножителей. Свертывание по  $2l$  индексам понижает ранг тензора на  $2l$  единиц.

Умножение и очевидная свертка данного тензора  $T$  с компонентами  $T^{ijkl\dots}$  на тензор  $S$  с компонентами  $\delta_n^j \delta_m^i$  приводит к тензору  $T^*$  того же ранга с компонентами

$$T^{*ijkl\dots} = T^{jikl\dots}$$

Тензор  $T^*$  называется изомером тензора  $T$ . Таким образом, операцию перестановки индексов можно свести к умножению на фундаментальный тензор и к сверткам. По определению тензор, полученный как результат перестановок нескольких индексов, тоже называется изомером тензора  $T$ .

Ниже даются способы построения общих формул вида (1.3) для тензорных функций. Для этого потребуется строить линейно-независимый тензорный базис  $H_s$  ( $s = 1, \dots, p$ ) через тензорные аргументы (1.4). Построение базиса  $H_s$  будет осуществляться при помощи операций умножения и свертки из определяющих тензоров.

2°. Группы симметрии тензоров. Контравариантные компоненты  $A^{\alpha_1 \dots \alpha_r}$  тензора  $A$  допускают группу симметрии  $G$ , заданную системой<sup>1</sup> матриц преобразования координат

$$\|a_j^i\| \quad \left( a_j^i = \frac{\partial y^i}{\partial x^j}, \quad y^i = y^i(x^j) \right)$$

если для каждой из всех матриц группы  $G$  выполняются равенства:

$$A^{i_1 \dots i_r} = A^{\alpha_1 \dots \alpha_r} a_{\alpha_1}^{i_1} \dots a_{\alpha_r}^{i_r} \quad (2.1)$$

Группы преобразований, которые допускает фундаментальный тензор  $g$ , называются ортогональными. Иначе говоря, матрицы преобразований для ортогональных групп удовлетворяют эквивалентным системам уравнений

$$g^{ij} = g^{\alpha\beta} a_{\alpha}^{i\cdot} a_{\beta}^{j\cdot}, \quad g_{ij} = g_{\alpha\beta} a^{\alpha\cdot}_i a^{\beta\cdot}_j \quad (2.2)$$

Легко проверить, что если группа  $G$  — ортогональна, то из условия (2.1) об инвариантности контравариантных компонент тензора  $A$  следует инвариантность<sup>2</sup> компонент тензора  $A$  с любым строением индексов относительно преобразований координат, образующих группу  $G$ .

Поэтому для ортогональных преобразований можно говорить просто о симметрии тензора и об инвариантности всех его компонент относительно группы  $G$ .

Совокупность всех ортогональных преобразований, относительно которых тензор  $A$  инвариантен, образует группу симметрии тензора  $A$ .

Группа симметрии некоторого тензора  $A$  может состоять только из тождественного преобразования.

<sup>1</sup> Для простоты нумерация элементов матриц группы  $G$  опускается. Так что в записях  $a^i_j$  будет вместо  $a_{(\nu)\cdot}^i_j$ , где  $\nu = 1, \dots, h$ , а  $h$  равно числу элементов группы  $G$ .

<sup>2</sup> Если группа  $G$  не ортогональна, то из равенства (2.1) не следует инвариантность компонент тензора  $A$  с другим строением индексов.

Для произвольного тензора второго ранга (несимметричного  $A^{ij} \neq A^{ji}$ ) группа симметрии состоит из двух элементов: тождественного преобразования и преобразования инверсии.

Для произвольного симметричного тензора второго ранга группа симметрии совпадает с группой совмещений трехосного эллипсоида. Если тензорный эллипсоид является эллипсоидом вращения, то группа симметрии будет бесконечной.

Шаровой тензор второго ранга имеет группу симметрии, совпадающую с полной ортогональной группой вращений, так же как и фундаментальный тензор  $g$ .

Рассмотрим несколько тензоров  $T_1, \dots, T_m$  и обозначим через  $G_1, \dots, G_m$  соответственно их группы симметрий. Группа  $G$ , образованная пересечением групп  $G_1, \dots, G_m$ , называется группой симметрии совокупности тензоров  $T_1, \dots, T_m$ .

Нетрудно видеть, что тензор  $H(T_1, \dots, T_m)$  будет допускать группу симметрии  $G$ , это следует из того, что компоненты тензора  $H$  являются функциями компонент тензоров  $T_i$ , которые инвариантны относительно преобразований группы  $G$ , поэтому компоненты тензора  $H$  также будут инвариантны относительно группы  $G$ .

В связи с этим очевидно, что группа симметрии тензора, полученного как результат операции умножения и свертывания нескольких тензоров, будет совпадать с пересечением групп симметрий составляющих тензоров или может обладать более высокой симметрией и содержит это пересечение как подгруппу.

Если тензор  $H$  допускает группу симметрии  $G$ , то число линейно-независимых слагаемых  $p$  в формуле (1.3) вообще меньше, чем  $3^r$ . Для заданной группы  $G$  и для тензора заданного ранга  $r$  число  $p$  можно вычислить при помощи теории характеров [13, 14, 30], соответствующие таблицы для текстур и кристаллических групп симметрии даны в работах [13, 14, 18].

Если тензор  $H$  нечетного ранга допускает только тривиальную группу  $G$ , состоящую из тождественного преобразования, то число линейно-независимых слагаемых  $p = 3^r$ ; в этом случае тензор  $H$  имеет самый общий вид. Если тензор  $H$  четного ранга, то его группа симметрии  $G$  всегда состоит, по крайней мере, из двух элементов: тождественного преобразования и инверсии.

Для группы симметрии, состоящей только из инверсии и тождественного преобразования, при нечетном  $r$  имеем  $H = 0$  и, следовательно,  $p = 0$ ; при четном  $r$  имеем  $p = 3^r$ , в этом случае тензор четного ранга имеет самый общий вид.

В формуле (1.3) скалярные коэффициенты  $k_s$  в общем случае являются функциями совместных инвариантов тензоров  $T_1, \dots, T_m$  и любого числа данных скаляров (например: температура, концентрация и т. д.). Некоторые из совместных инвариантов могут быть постоянными параметрами, другие — переменными.

Обозначим через  $\Omega_1, \dots, \Omega_N$  полную систему совместных инвариантов [9, 10] системы тензоров  $T_1, \dots, T_m$ .

Из полноты системы инвариантов следует, что для всякого инварианта  $J$ , образованного из компонент системы тензоров  $T_1, \dots, T_m$ , имеет место функциональная связь:

$$J = f(\Omega_1, \dots, \Omega_N)$$

По определению инварианты  $\Omega_i$  сохраняют свое значение и свой вид как функций компонент для любых преобразований координат, такие инварианты можно получить с помощью операций тензорного умножения и свертки, в этом случае инварианты представляют собой однородные полиномы [9, 10] по компонентам тензоров  $T_1, \dots, T_m$ .

Предположим, что среди тензоров  $T_1, \dots, T_m$  тензоры  $T_\nu, \dots, T_m$  ( $1 < \nu \leq m$ ) являются постоянными параметрическими тензорами.

Пусть совокупность тензоров  $T_\nu, \dots, T_m$  допускает конечную группу симметрии  $G^*$ .

Зафиксируем значения компонент тензоров  $T_\nu, \dots, T_m$ , заданных в системе координат  $x^i$ . После этого инварианты  $\Omega_i$  сводятся к  $\omega_i$ , являющимися функциями только от компонент тензоров  $T_1, \dots, T_{\nu-1}$ , причем в системе координат  $x^i$  будут верны равенства  $\omega_i = \Omega_i$ .

В других системах координат это равенство вообще не будет выполняться. Однако это равенство будет выполняться для всех преобразований координат, определенных группой  $G^*$ , так как при этих преобразованиях компоненты всех тензоров  $T_\nu, \dots, T_m$  инвариантны. Величины  $\omega_i$  вообще не будут инвариантны относительно любых преобразований координат. Ясно, что некоторые  $\omega_i$ , зависящие только от компонент тензоров  $T_\nu, \dots, T_m$  или только от компонент тензоров  $T_1, \dots, T_{\nu-1}$ , не зависят от преобразования координат. Очевидно, что все величины  $\omega_i$  как функции компонент тензоров  $T_1, \dots, T_{\nu-1}$  можно рассматривать как инварианты относительно группы  $G^*$ . Таким образом, инвариантные коэффициенты  $k_s$  в формуле (1.3) будут функциями  $\Omega_i$ . При применении только преобразований координат из группы  $G^*$  величины  $k_s$  можно рассматривать как функции только инвариантов  $\omega_i$ .

Инварианты  $\omega_i$  аналогичны инвариантам целого рационального базиса. Величины  $\omega_i$  совпадают с целым рациональным базисом при подходящем выборе полной системы инвариантов  $\Omega_i$ . В общем случае особое значение имеют переменные функционально-независимые инварианты. Функционально-независимые инварианты можно выбирать различными способами.

Фактическое построение тензоров  $H_s$  через заданные определяющие тензоры  $T_1, \dots, T_m$  всегда возможно и соответствующие общие приемы будут выявлены на примерах.

Линейную независимость тензоров  $H_s$  можно устанавливать непосредственно на основании геометрических соображений или проверкой при помощи вычисления соответствующих детерминантов, или при помощи других общих методов. В частности, тензоры  $H_{s_1}$  и  $H_{s_2}$  линейно независимы, если они ортогональны или группы симметрии тензоров  $H_{s_1}$  и  $H_{s_2}$  не совпадают, так как в противном случае эти два тензора были бы про-

порциональны, что противоречит условиям их симметрии. Однако тензоры, обладающие одной и той же группой симметрии, могут быть линейно независимыми.

Пусть тензору  $H_s$  соответствует группа симметрии  $G_s$ .

В ряде случаев удобно и выгодно [19] тензоры  $H_s$  выбирать таким образом, чтобы

$$G_1 \supseteq G_2 \supseteq G_3 \supseteq \dots \supseteq G_p$$

Очевидно, что в качестве первых  $q$  линейно-независимых тензоров  $H_1, \dots, H_q$  всегда можно взять  $q \leq p$  тензоров  $H_1, \dots, H_q$ , зависящих только от фундаментального тензора  $g$  или от  $g$  и тензора третьего ранга  $E$ .

$$E = |g^{ij}|^{1/2} (\partial_1 \partial_2 \partial_3 - \partial_1 \partial_3 \partial_2 + \partial_2 \partial_3 \partial_1 - \partial_2 \partial_1 \partial_3 + \partial_3 \partial_1 \partial_2 - \partial_3 \partial_2 \partial_1) \quad (2.3)$$

Эти тензоры соответствуют изотропии относительно полной или собственной ортогональной группы. Изотропные тензоры  $H_1, \dots, H_q$  ранга  $r$  хорошо известны из литературы [3, 9, 10, 30].

Для изотропных тензоров ранга  $r$  в трехмерном пространстве максимальное число  $q$  будет равно [30]

$r = 1$	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$q = 0$	1	1	3	6	15	36	91	232	603

Все изотропные тензоры ранга  $r$  представляют собой изомеры тензора  $H_1$ , причем

$$H_1^{\alpha_1 \dots \alpha_r} = g^{\alpha_1 \alpha_2} \dots g^{\alpha_{r-1} \alpha_r} \quad (r = 2k)$$

$$H_1^{\alpha_1 \dots \alpha_r} = E^{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3} g^{\alpha_4 \alpha_5} \dots g^{\alpha_{r-1} \alpha_r} \quad (r = 2k + 1)$$

Число  $q$  равно числу различных линейно-независимых изомеров тензора  $H_1$  с учетом симметрии компонент тензора  $g^{ij}$ .

Если число  $r$  нечетное, то для полной ортогональной группы  $q = 0$ . Все тензоры нечетного ранга, инвариантные относительно полной ортогональной группы, обращаются в нуль. Тензоры нечетного ранга, инвариантные относительно собственной ортогональной группы вращения с  $\Delta = |a^i_j| = 1$ , могут отличаться от нуля только для  $r \geq 3$ .

При  $r = 3$  имеем  $H_1 = E$  и, следовательно,  $q = 1$ .

Наличие симметрии тензорной функции относительно некоторой группы перестановок индексов уменьшает, вообще говоря, числа  $p$  и  $q$ .

Формулы для тензорных функций с наличием соответствующей симметрии по индексам всегда легко получить из полных формул при помощи операций симметрирования или альтернирования по соответствующим индексам и с сохранением только линейно-независимых слагаемых.

3°. Тензоры, задающие геометрическую симметрию текстур и кристаллов [29]. Среда называется изотропной, если все ее свойства в каждой точке инвариантны относительно группы ортогональных преобразований.

Можно различать следующие два типа изотропных сред:

1) изотропные среды относительно полной ортогональной группы преобразований координат с  $\Delta = \pm 1$ ,

2) изотропные среды относительно группы вращений с  $\Delta = +1$  (гиротропные среды).

Легко видеть, что в первом случае свойства симметрии характеризуются вполне фундаментальным тензором  $g$ .

Условие инвариантности компонент тензора  $g$  можно рассматривать как условие, определяющее бесконечное множество всех вещественных матриц — элементов полной ортогональной группы.

Группа вращений с  $\Delta = +1$ , определяющая гиротропные среды, является подгруппой полной ортогональной группы.

Такую подгруппу можно выделить дополнительным к уравнениям (2.2) требованием об инвариантности компонент тензора  $E$ , определенного формулой (2.3).

Следовательно, бесконечное множество элементов группы вращений определяется вполне условием инвариантности тензоров  $g$  и  $E$ . Эти два тензора можно рассматривать как тензоры, определяющие группу вращений с  $\Delta = +1$ .

Дальше для обозначения группы симметрии мы воспользуемся краткими символами, предложенными А. В. Шубниковым [15, 16]. Согласно этим правилам полная ортогональная группа обозначается символом  $\infty / \infty \cdot m$  (образующие элементы группы: пересекающиеся оси бесконечного порядка и зеркальная плоскость симметрии  $m$ ).

Группа вращения соответствует символу  $\infty / \infty$ .

В 2° приведены данные об общем виде тензорных функций для тензоров любого ранга при наличии изотропии, т. е. когда аргументами являются только  $g$  или  $g$  и  $E$ .

Простейшим примером анизотропной среды являются текстуры. Текстурой называется такая среда, для которой все ее свойства в каждой точке инвариантны относительно бесконечной ортогональной группы, содержащей повороты на любой угол относительно некоторой оси. Очевидно, что группы симметрии текстур являются подгруппами полной ортогональной группы.

Простой анализ показывает, что, включая два типа изотропных сред, возможны только семь различных типов текстур. Соответствующие геометрические иллюстрации для различных типов текстур и соответствующие тензоры и векторы, задающие группы симметрии текстур, даны в прилагаемой таблице.

Справедливость этих результатов легко проверить непосредственно.

Анизотропная среда с непрерывным или дискретным строением называется кристаллом, если можно ввести систему тройко-периодических решеток Браве (с одинаковыми в фиксированной системе координат периодами у разных решеток), имеющую те же геометрические свойства симметрии, что и рассматриваемая среда — кристалл.

Совокупность решеток Браве с данными периодами может допускать точечные конечные группы симметрии.

Вид этих групп зависит от строения рассматриваемого множества решеток и от вида элементарного параллелепипеда периодов.

Как известно [2, 16], имеется только 32 различных класса симметрии кристаллов, описываемых конечными точечными группами.

На таблице (стр. 402, 403) приведены характеризующие данные для всех 32 классов кристаллов; соответствующие геометрические фигуры иллюстрируют каждую из групп симметрии.

Единичные векторы  $e_1, e_2, e_3$  образуют ортогональный кристаллофизический базис, на чертежах указана ориентация этого базиса относительно фигур симметрии кристалла.

В левом углу каждой ячейки дано обозначение соответствующей группы по А. В. Шубникову, кроме этого, в каждой ячейке приведены символы установленной нами совокупности простых тензоров, характеризующих и задающих данную группу.

Определение соответствующих тензоров дано формулами, приведенными в этой же таблице<sup>1</sup>.

Рассмотрим тензоры, определяющие симметрии групп кубической сингонии.

Докажем, что тензор  $O_h$  инвариантен относительно группы из 48 преобразований, дающей изоморфное представление группы  $\bar{6}/4$ , и что нет никаких других преобразований, относительно которых тензор  $O_h$  инвариантен. Для доказательства найдем все вещественные преобразования, относительно которых тензор  $O_h$  инвариантен.

Условия инвариантности контравариантных компонент тензора  $O_h$  равносильны следующей системе нелинейных алгебраических уравнений для девяти элементов матрицы преобразования  $\|a^i_j\|$

$$a^\alpha_1 a^\beta_1 a^\gamma_1 a^\delta_1 + a^\alpha_2 a^\beta_2 a^\gamma_2 a^\delta_2 + a^\alpha_3 a^\beta_3 a^\gamma_3 a^\delta_3 = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

Правую часть нужно положить равной единице, если  $\alpha = \beta = \gamma = \delta$ , и нулю в остальных случаях.

Полагая здесь  $\alpha = \beta$  и  $\gamma = \delta$ , при  $\alpha \neq \gamma$  получим уравнения:

$$(a^\alpha_1)^2 (a^\gamma_1)^2 + (a^\alpha_2)^2 (a^\gamma_2)^2 + (a^\alpha_3)^2 (a^\gamma_3)^2 = 0 \quad (\alpha \neq \gamma) \quad (3.2)$$

Отсюда следует, что

$$a^\alpha_i a^\gamma_i = 0 \quad (3.3)$$

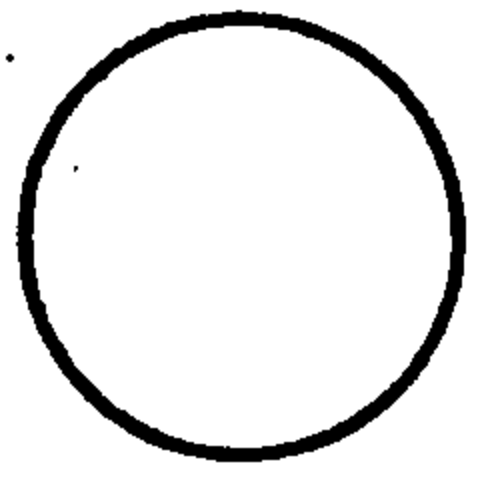
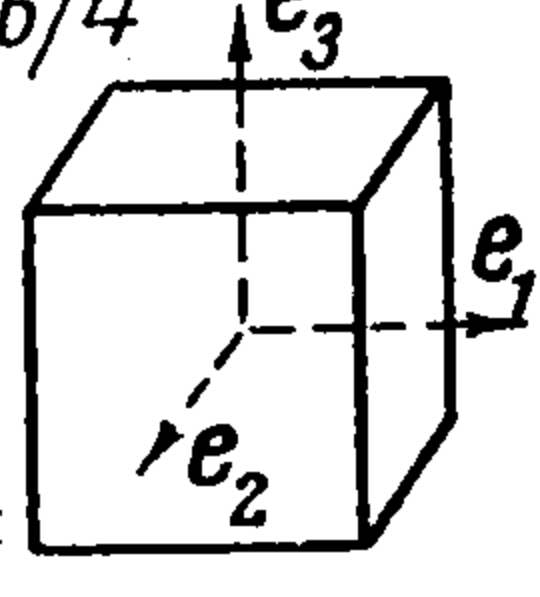
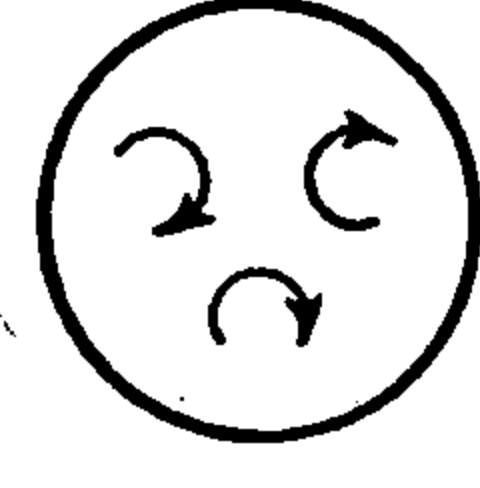
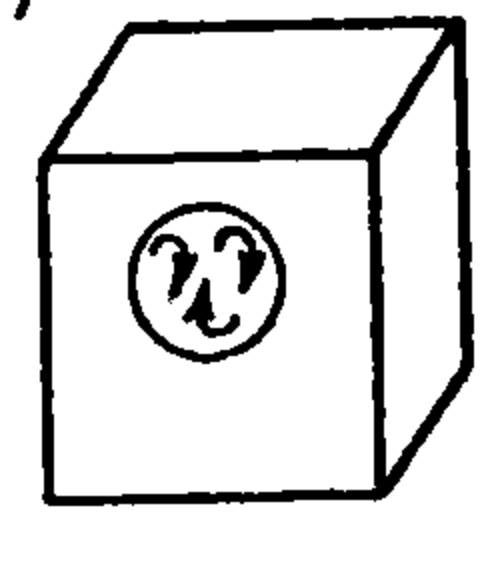
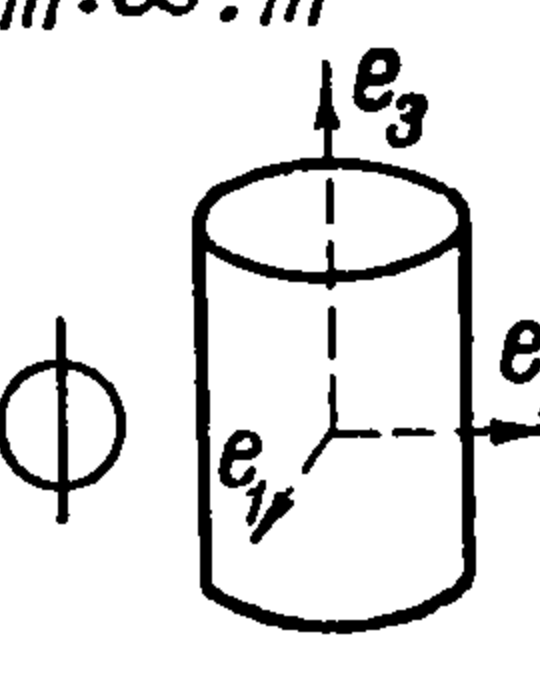
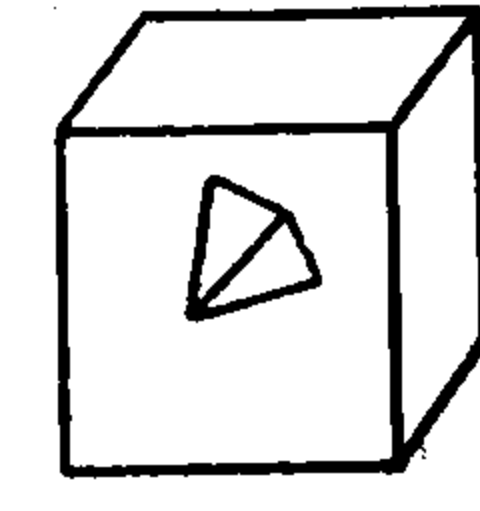
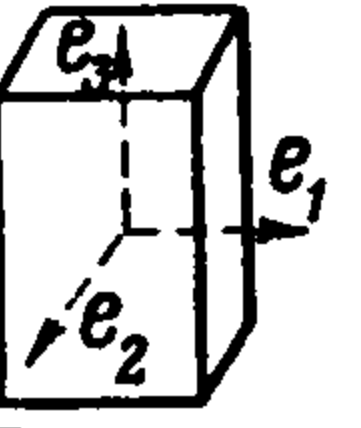
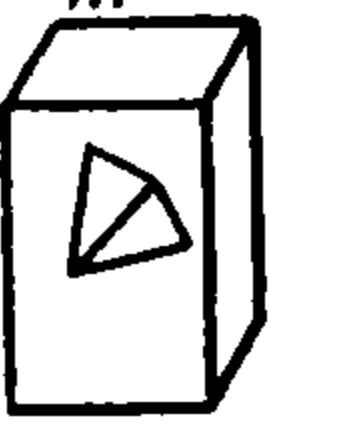
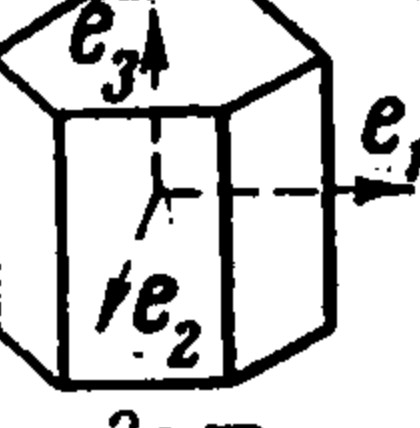
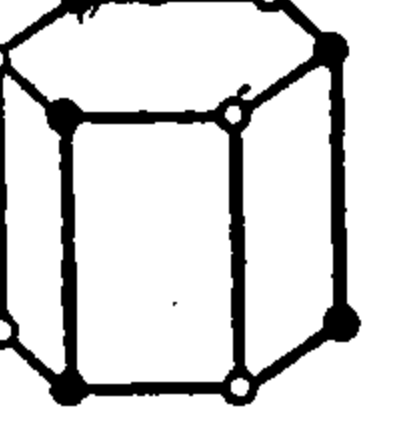
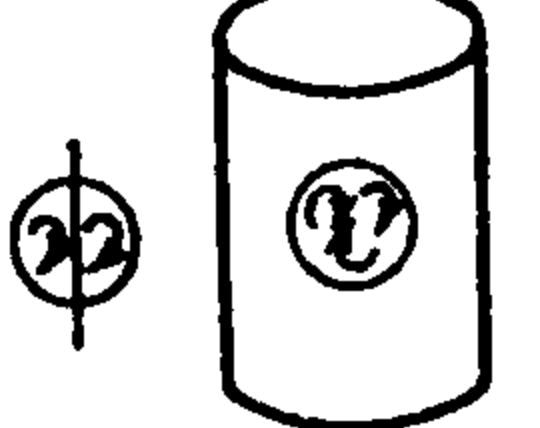
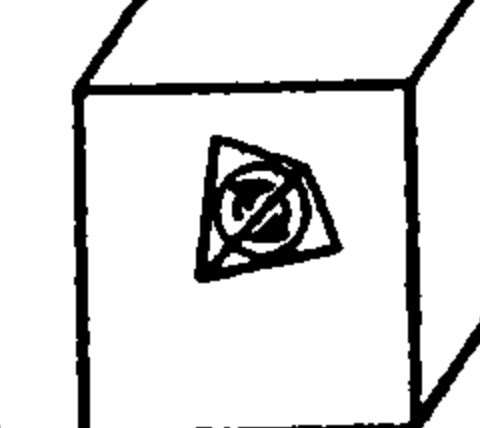
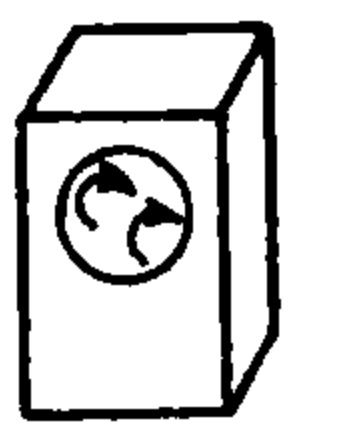
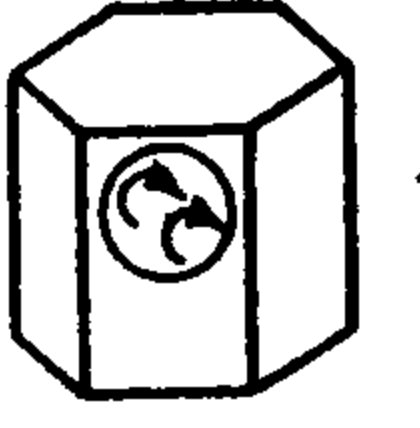
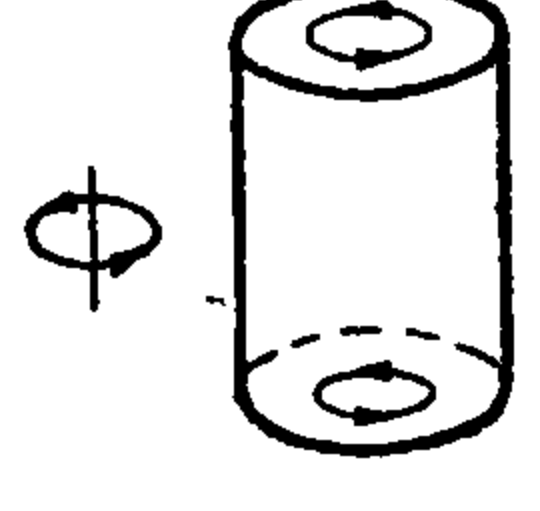
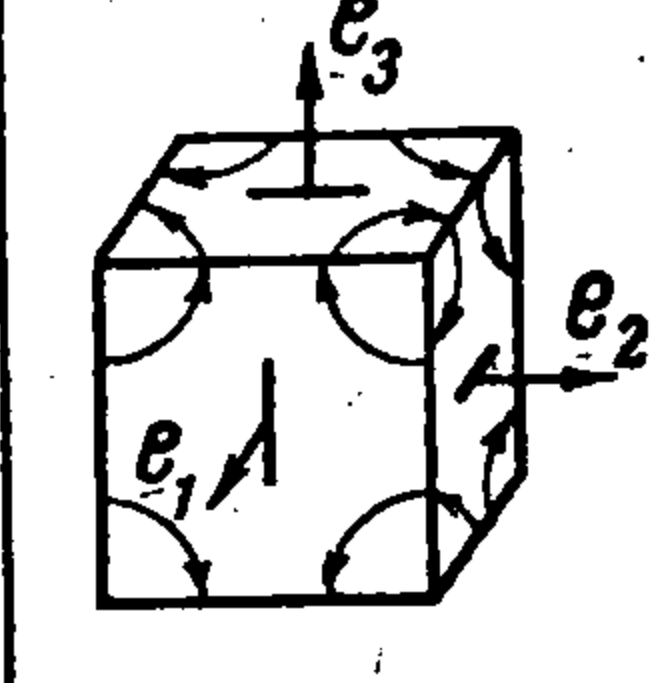
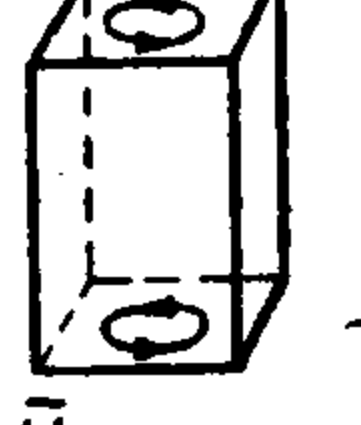
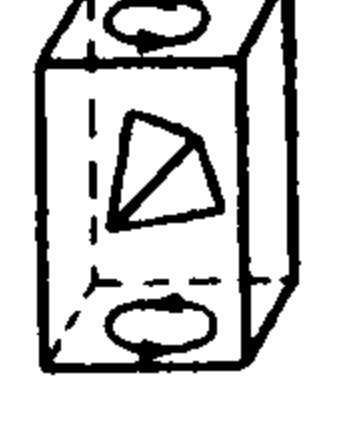
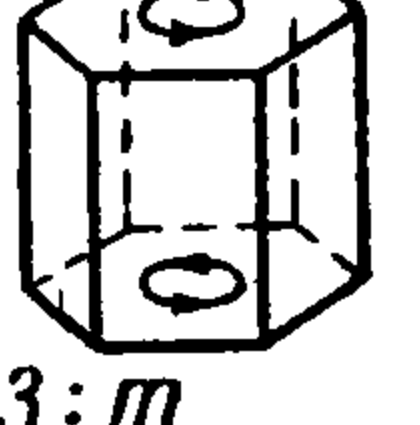
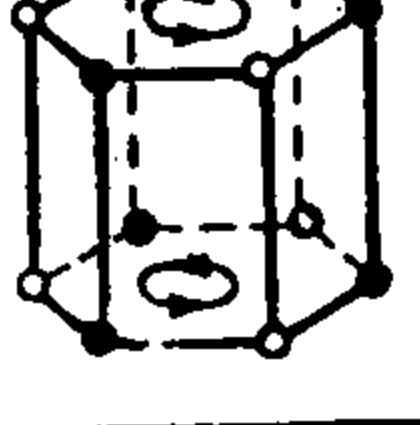
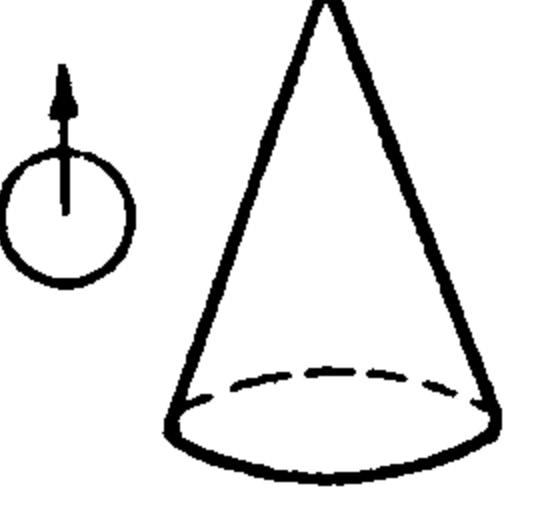
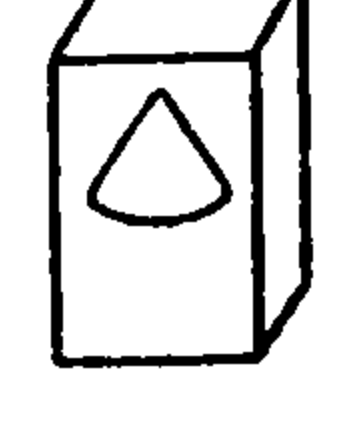
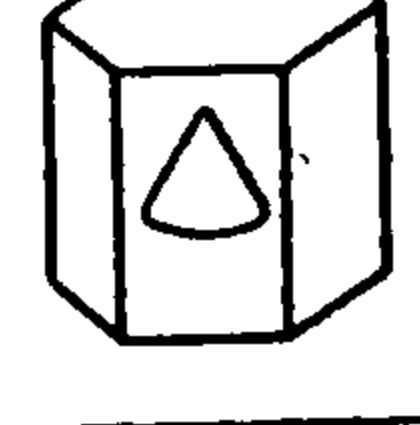
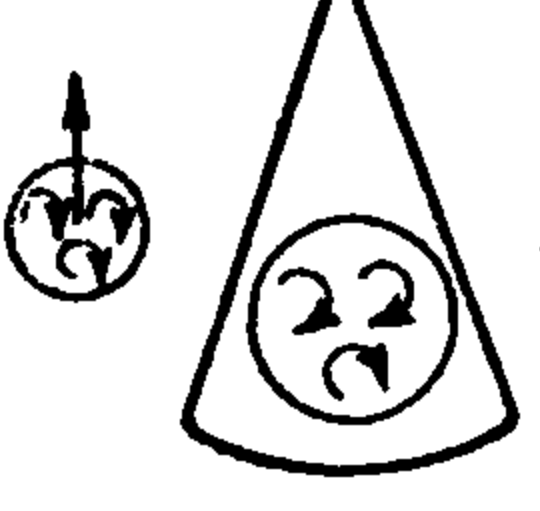
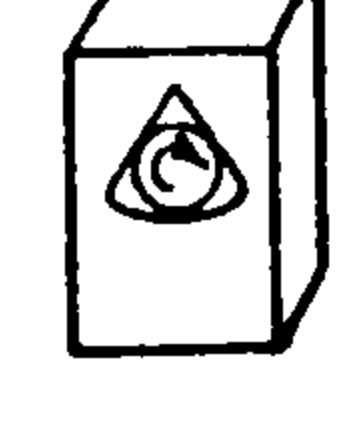
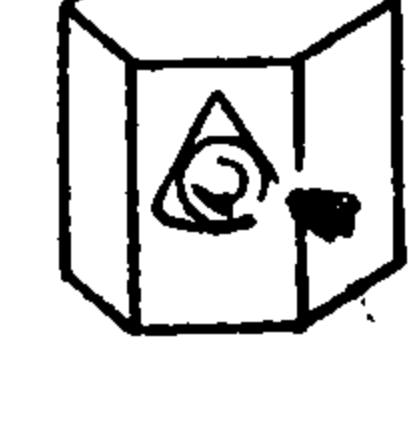
Так как определитель  $|a^\alpha_i| \neq 0$ , то из равенств (3.3) следует, что в каждой строке и в каждом столбце матрицы  $\|a^\alpha_i\|$  имеется только по одному элементу, отличному от нуля.

Так как  $(a^\alpha_1)^4 + (a^\alpha_2)^4 + (a^\alpha_3)^4 = 1$  при  $\alpha = \beta = \gamma = \delta$  согласно (3.1), то для каждого вещественного элемента матрицы  $\|a^\alpha_i\|$ , отличного от нуля, верно равенство

$$a^p_q = \pm 1 \quad (3.4)$$

На основании перечисления всех возможных случаев из (3.3) и (3.4) следует, что матрицы, состоящие из элементов  $(a^p_q)^2$ , равных 1 либо 0,

<sup>1</sup> В этой таблице и в дальнейшем степени векторов понимаются как диадные или полиадные произведения.

Текстуры	Кубическая сингония		
$\infty/\infty \cdot m$  $g$	$\bar{6}/4$  $O_h$	$x^1, x^2, x^3$ — кристаллофизические декартовы координаты $\xi^1, \xi^2, \xi^3$ — произвольные координаты $a^i_j = \frac{\partial \xi^i}{\partial x^j}, \quad \Delta =  a^i_j , \quad e_i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x^i}$ $\vartheta_i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \xi^i}$ $e_j = a^{\alpha_j} \vartheta_\alpha, \quad e_3^2 = a^{\alpha_3} a^{\alpha_3} \vartheta_\alpha \vartheta_\beta$ $g = e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 = g^{\alpha\beta} \vartheta_\alpha \vartheta_\beta$	
$\infty/\infty$  $g, E$	$3/4$  $O_h, E$	Тетрагональная сингония	Гексагональная сингония
$m \cdot \infty : m$  $g, e_3^2$	$3/\bar{4}$  $T_d, g$	$m \cdot 4 : m$  $O_h, e_3^2$ $\bar{4} \cdot m$  $T_d, g, e_3^2$	$m \cdot 6 : m$  $D_{6h}, e_3^2$ $m \cdot 3 : m$  $D_{3h}, e_3^2$
$\infty : 2$  $g, E, e_3^2$	$3/2$  $T_d, g, E$ $(T_h, E)$	$4 : 2$  $O_h, E, e_3^2$	$6 : 2$  $D_{6h}, E, e_3^2$
$\infty : m$  $g, e_3^2, \Omega$	$\bar{6}/2$  $T_h$	$4 : m$  $O_h, e_3^2, \Omega$ $\bar{4}$  $T_d, g, e_3^2, \Omega$	$6 : m$  $D_{6h}, e_3^2, \Omega$ $3 : m$  $D_{3h}, e_3^2, \Omega$
$\infty \cdot m$  $g, e_3$		$4 \cdot m$  $O_h, e_3$	$6 \cdot m$  $D_{6h}, e_3$
$\infty$  $g, E, e_3$		$4$  $O_h, E, e_3$	$6$  $D_{6h}, E, e_3$

$$E = e_1 e_2 e_3 - e_2 e_1 e_3 + e_2 e_3 e_1 - e_3 e_2 e_1 + e_3 e_1 e_2 - e_1 e_3 e_2 = \\ = \Delta (\partial_1 \partial_2 \partial_3 - \partial_2 \partial_1 \partial_3 + \partial_2 \partial_3 \partial_1 - \partial_3 \partial_2 \partial_1 + \partial_3 \partial_1 \partial_2 - \partial_1 \partial_3 \partial_2)$$

$$\Omega = e_1 e_2 - e_2 e_1 = (a^{\alpha_1} a^{\beta_2} - a^{\alpha_2} a^{\beta_1}) \partial_{\alpha} \partial_{\beta} = a^{\alpha_1} a^{\beta_2} (\partial_{\alpha} \partial_{\beta} - \partial_{\beta} \partial_{\alpha})$$

$$O_h = e_1^4 + e_2^4 + e_3^4 = (a^{\alpha_1} a^{\beta_1} a^{\gamma_1} a^{\delta_1} + a^{\alpha_2} a^{\beta_2} a^{\gamma_2} a^{\delta_2} + a^{\alpha_3} a^{\beta_3} a^{\gamma_3} a^{\delta_3}) \partial_{\alpha} \partial_{\beta} \partial_{\gamma} \partial_{\delta}$$

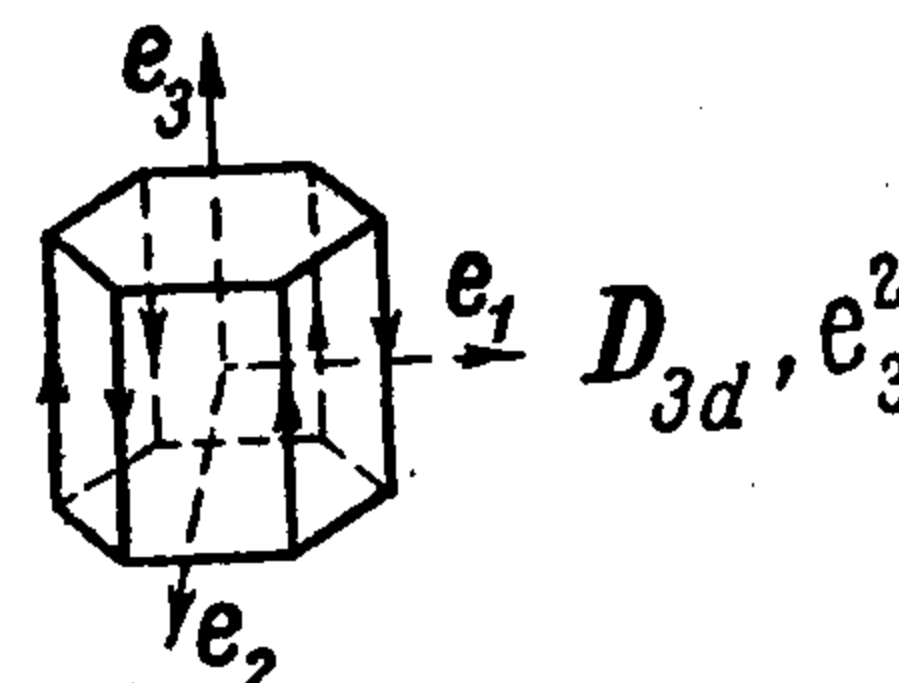
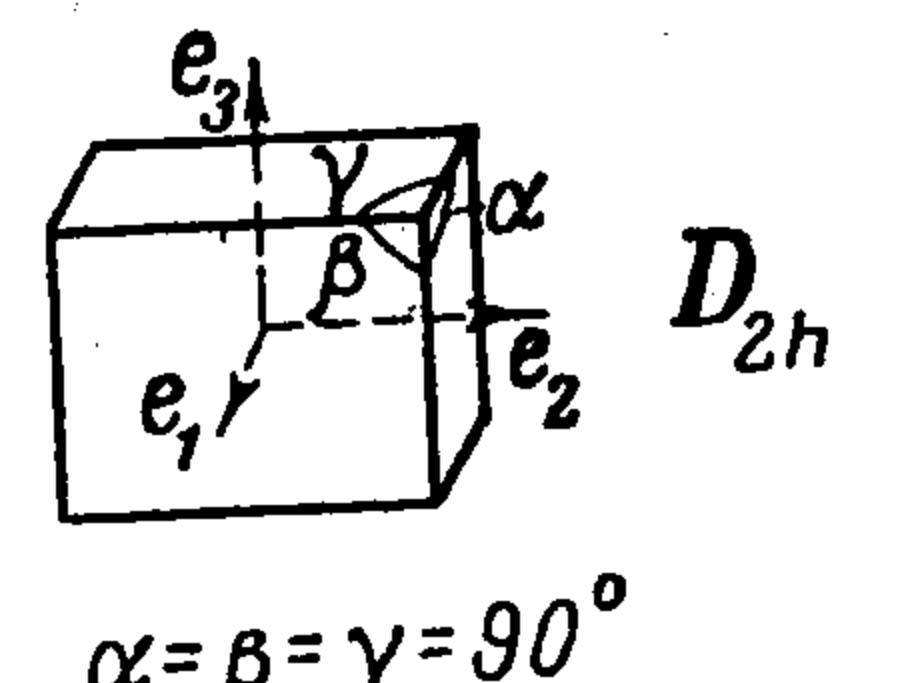
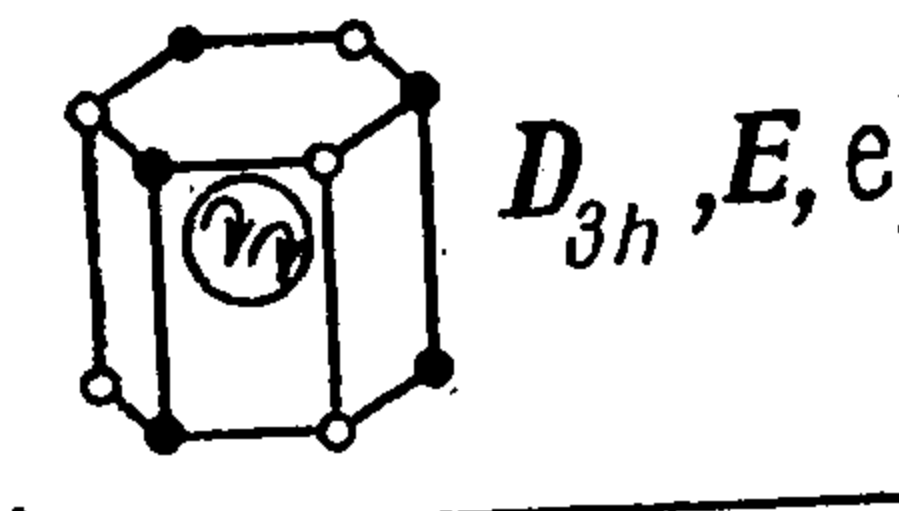
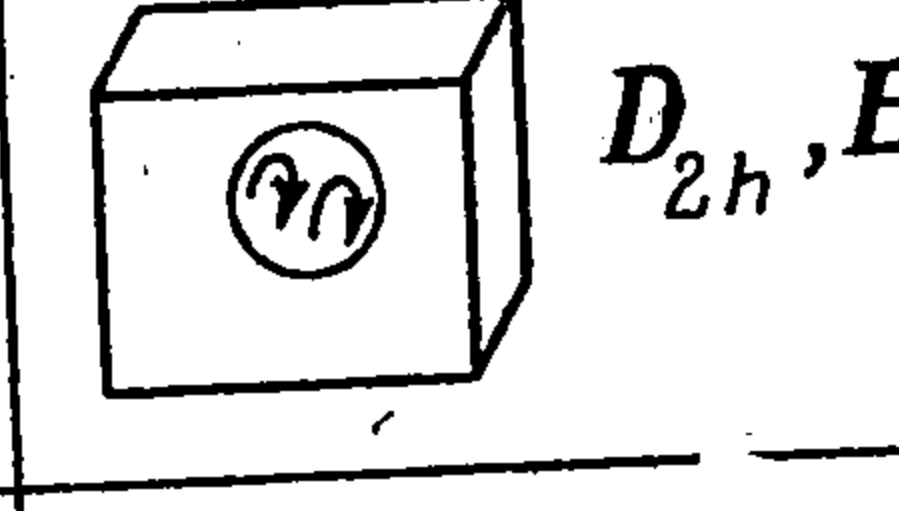
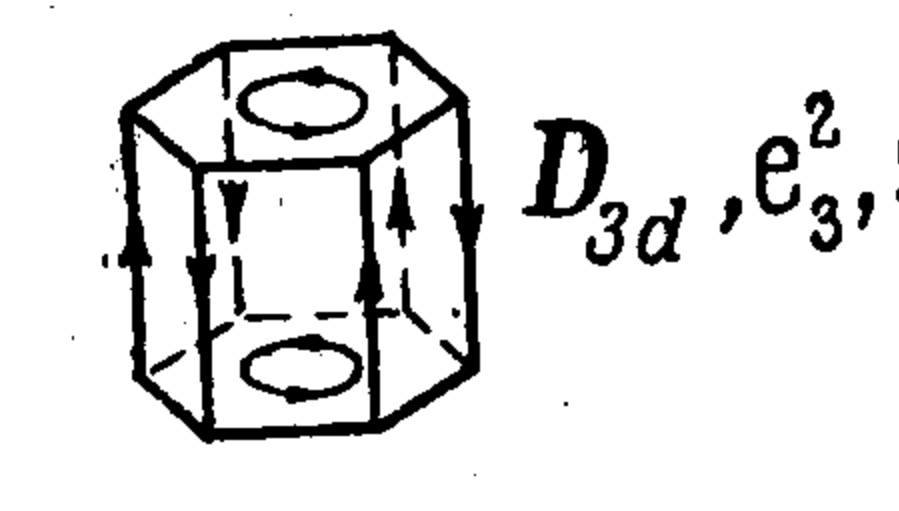
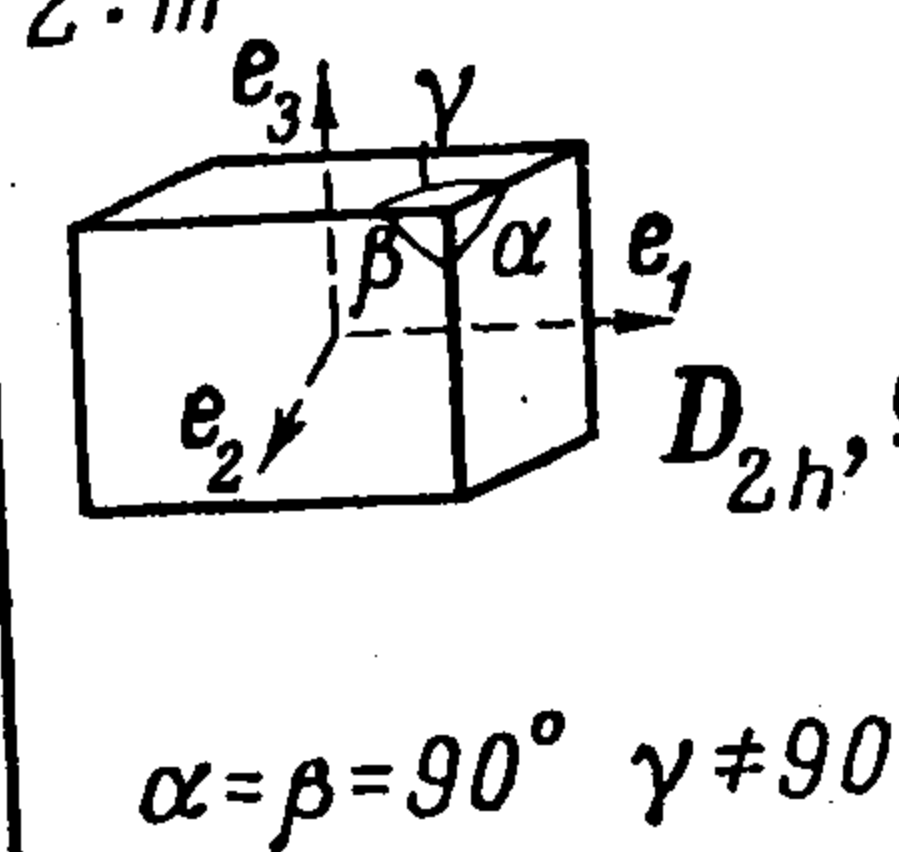
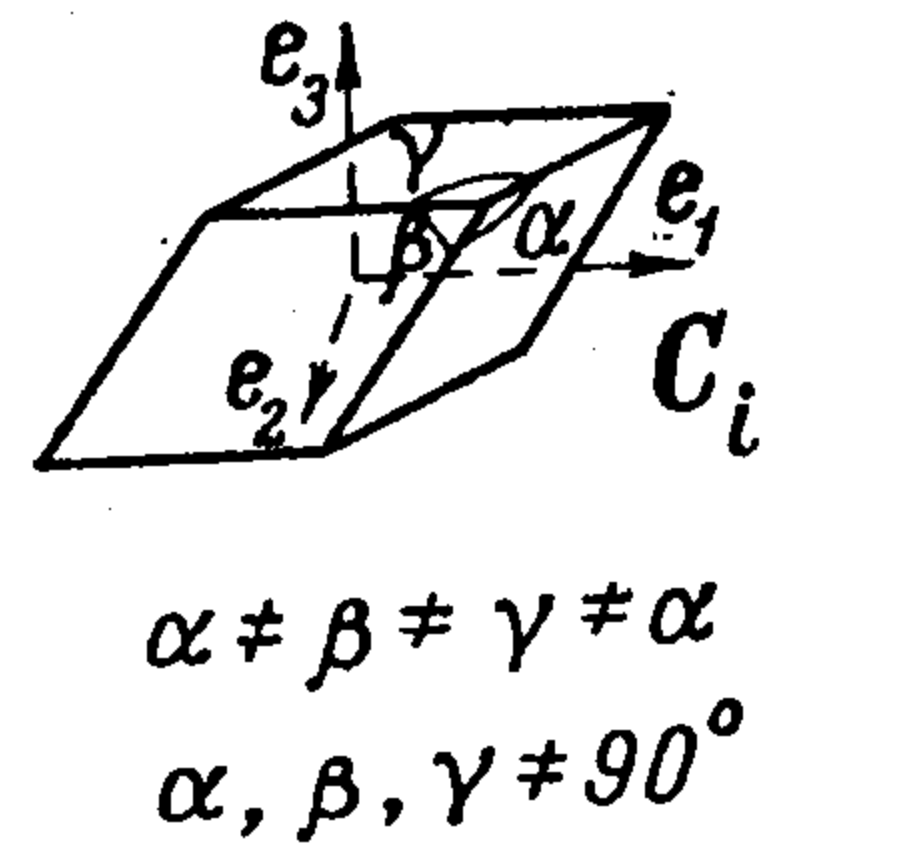

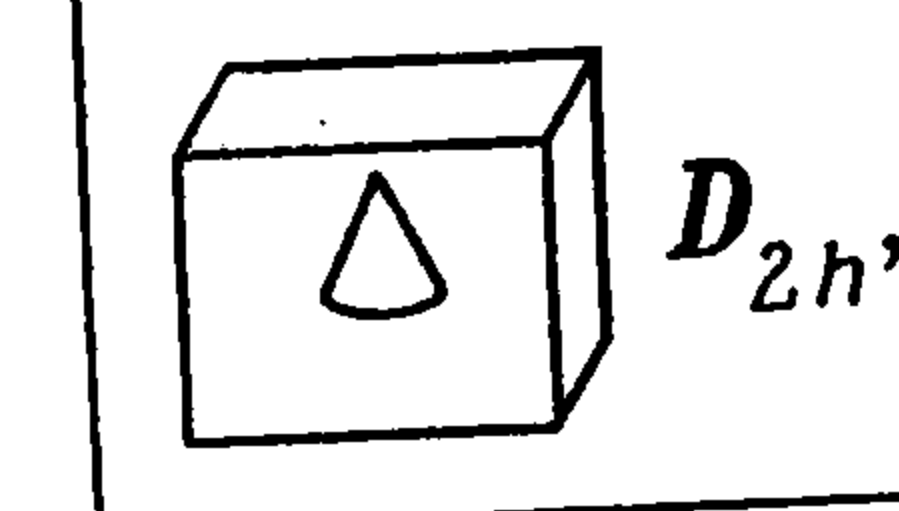
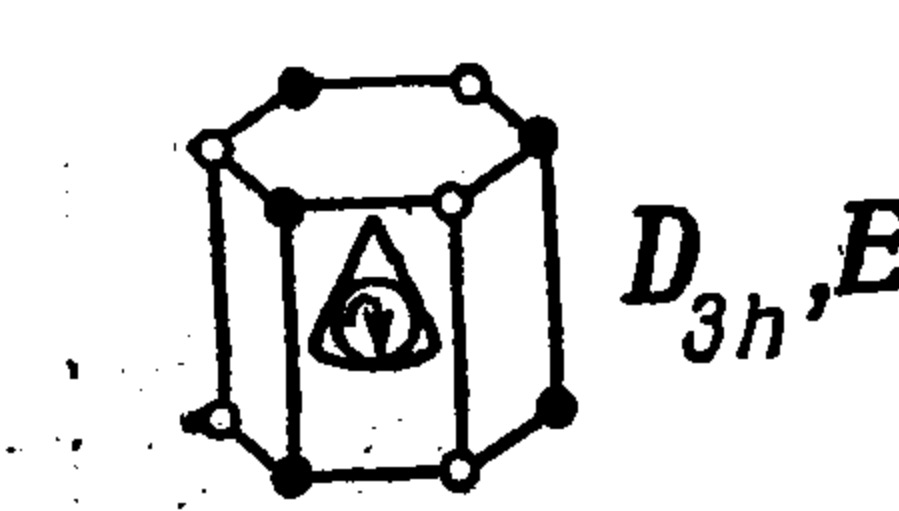
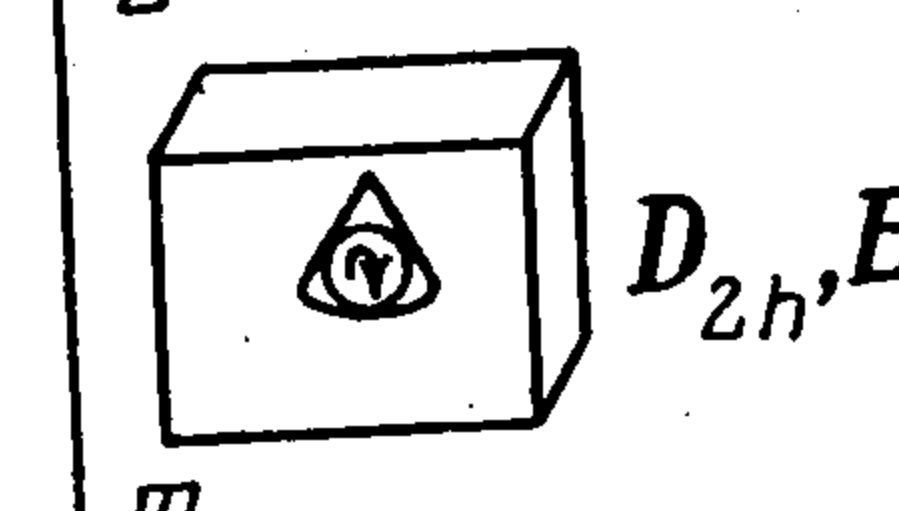
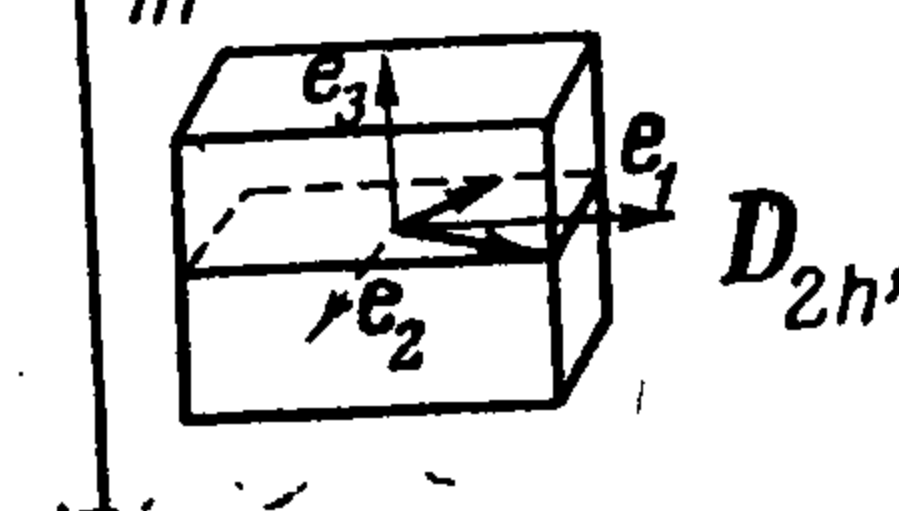
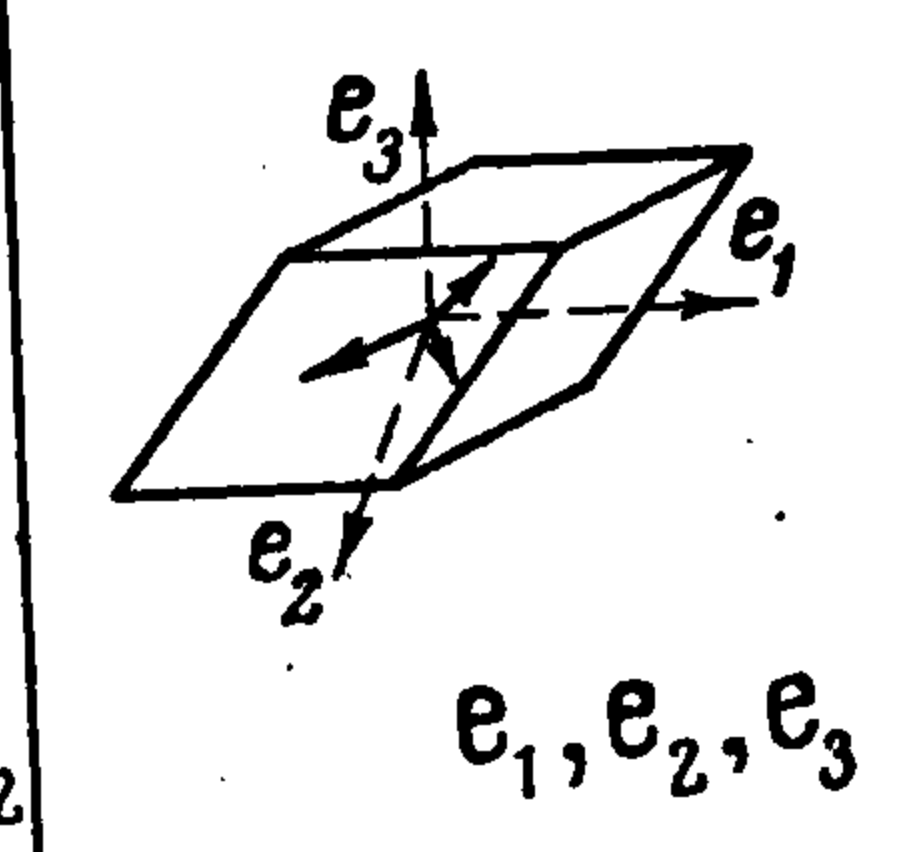
$$T_h = e_1^2 e_2^2 + e_2^2 e_3^2 + e_3^2 e_1^2, \quad T_d = e_1 e_2 e_3 + e_2 e_1 e_3 + e_2 e_3 e_1 + e_3 e_2 e_1 + e_3 e_1 e_2 + e_1 e_3 e_2$$

$$D_{3h} = e_1^3 - e_1 e_2^2 - e_2 e_1 e_2 - e_2^2 e_1, \quad D_{3d} = e_3 (e_1^3 - e_1 e_2^2 - e_2 e_1 e_2 - e_2^2 e_1)$$

$$D_{6h} = (e_1^3 - e_1 e_2^2 - e_2 e_1 e_2 - e_2^2 e_1)^2, \quad D_{2h} = \lambda^{11} e_1^2 + \lambda^{22} e_2^2 + \lambda^{33} e_3^2 =$$

$$= \lambda^{ij} a^{\alpha_i} a^{\beta_j} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} = d^{\alpha\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta} \quad (\lambda^{11} \neq \lambda^{22} \neq \lambda^{33} \neq \lambda^{11} \neq 0, \quad d^{\alpha\beta} = d^{\beta\alpha})$$

$$C_i = D_{2h} + \omega^{ij} e_i e_j = C^{\alpha\beta} \partial_{\alpha} \partial_{\beta}; \quad \omega^{ij} = -\omega^{ji} \neq 0$$

Тригональная сингония	Ромбическая сингония	Моноклинная сингония	Триклинная сингония
$\bar{6} \cdot m$ 	$m \cdot 2 : m$  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$		
$3 : 2$ 	$2 : 2$ 		
$\bar{6}$ 		$2 : m$  $\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma \neq 90^\circ$	$\bar{2}$  $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \alpha$ $\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$
$3 \cdot m$ 	$2 \cdot m$ 		
$3$ 		$2$  $m$ 	$1$ 

могут иметь следующий вид:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Получилась система, состоящая только из шести матриц. Если согласно (3.4) учесть возможности в различии знаков для  $a^p_q$ , то каждая из шести матриц (3.5) порождает 8 матриц для  $\|a^p_q\|$ , например, первой из матриц (3.5) соответствуют матрицы:

$$\begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Как известно, по определению группы симметрии куба  $\bar{6}/4$  полная система матриц типа (3.6) для каждой из матриц системы (3.5) образует полную группу матриц преобразований симметрии куба для группы  $\bar{6}/4$ , состоящей из  $6 \times 8 = 48$  матриц, которые ортогональны.

Таким образом, всякая матрица, соответствующая решению системы уравнений (3.1), может быть только одной из матриц системы (3.6), состоящей из 48 матриц. С другой стороны, легко убедиться в том, что верно и обратное предложение: каждая матрица из найденной системы 48 матриц дает решение системы уравнений (3.1).

Найдем теперь матрицы групп преобразований, сохраняющие инвариантным тензор  $T_a$ .

Условия инвариантности контравариантных компонент тензора  $T_a$  равносильны следующей системе нелинейных алгебраических уравнений для девяти элементов матрицы преобразования  $a^i_j$ :

$$a^\alpha_1 a^\beta_2 a^\gamma_3 + a^\alpha_2 a^\beta_1 a^\gamma_3 + a^\alpha_3 a^\beta_2 a^\gamma_1 + a^\alpha_1 a^\beta_3 a^\gamma_2 + a^\alpha_2 a^\beta_3 a^\gamma_1 + a^\alpha_3 a^\beta_1 a^\gamma_2 = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

В правой части (3.7) нужно поставить единицу, если  $\alpha, \beta, \gamma$  различны, и поставить нуль, если одинакова хотя бы одна пара индексов из  $\alpha, \beta, \gamma$ .

Возьмем из (3.7) уравнения, для которых  $\gamma = \beta$ . Эти уравнения имеют вид

$$a^\alpha_1 a^\beta_2 a^\beta_3 + a^\alpha_2 a^\beta_1 a^\beta_3 + a^\alpha_3 a^\beta_1 a^\beta_2 = 0 \quad \begin{matrix} (\alpha = 1, 2, 3) \\ (\beta = 1, 2, 3) \end{matrix} \quad (3.8)$$

Так как  $|a^i_j| \neq 0$ , то из системы уравнений (3.8) следует, что

$$a^\beta_i a^\beta_j = 0 \quad (3.9)$$

Здесь  $\beta$  — любой фиксированный индекс.

Отсюда и из условия  $|a^i_j| \neq 0$  следует, что в каждой строке и в каждом столбце матрицы  $\|a^i_j\|$  имеется только один элемент, отличный от нуля. Таких матриц с разным строением индексов у элементов, отличных от нуля, имеется только шесть:

$$\begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & b_1 & 0 \\ 0 & 0 & c_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} a_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_2 \\ 0 & c_2 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & a_3 & 0 \\ b_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & a_4 & 0 \\ 0 & 0 & b_4 \\ c_4 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & a_5 \\ 0 & b_5 & 0 \\ c_5 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & a_6 \\ b_6 & 0 & 0 \\ 0 & c_6 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Уравнения (3.7) с различными индексами  $\alpha, \beta, \gamma$  дают:

$$a_i b_i c_i = 1 \quad (i = 1, \dots, 6) \quad (3.11)$$

Легко видеть, что для ортогональных преобразований, когда выполнены условия

$$\sum_{\alpha=1}^3 a^i_{\alpha} a^j_{\alpha} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j \\ 0 & \text{при } i \neq j \end{cases} \quad (3.12)$$

верны равенства:

$$a_i = \pm 1, \quad b_i = \pm 1, \quad c_i = \pm 1 \quad (3.13)$$

В общем случае для получения представления группы симметрии  $3/\bar{4}$  требование об инвариантности тензора  $T_d$  необходимо дополнить условием инвариантности тензора  $g$ , так как только в этом случае условия (3.12), входящие в определение кристаллических групп симметрии, будут выполнены<sup>1</sup>.

Система матриц (3.10) вместе с условиями (3.13) определяет 48 матриц группы симметрии  $6/\bar{4}$ , однако добавочные равенства (3.11) выделяют подгруппу из 24 матриц, у которых либо  $a_i = b_i = c_i = 1$ , либо сразу два элемента из трех чисел  $a_i, b_i, c_i$  равны  $-1$ .

Например, из первой матрицы (3.10) получим только четыре матрицы

$$\begin{vmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{vmatrix}, \quad \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \quad (3.14)$$

Легко проверить, что найденная система 24 матриц, представляющая группу  $3/\bar{4}$ , является решением полной системы уравнений (3.7). Причем эта система матриц при  $|a^i_j| \neq 0$  образует систему всех действительных решений уравнений (3.7), при условии, что искомые матрицы ортогональны. Рассмотрим теперь условия инвариантности тензора  $T_h$ .

Система уравнений для  $a^i_j$ , элементов матрицы преобразования, равносильная условиям инвариантности контравариантных компонент тензора  $T_h$ , имеет вид:

$$a^{\alpha}_2 a^{\beta}_2 a^{\gamma}_3 a^{\delta}_3 + a^{\alpha}_3 a^{\beta}_3 a^{\gamma}_1 a^{\delta}_1 + a^{\alpha}_1 a^{\beta}_1 a^{\gamma}_2 a^{\delta}_2 = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

причем справа нужно поставить 1 при  $\alpha = \beta = 2, \gamma = \delta = 3; \alpha = \beta = 3, \gamma = \delta = 1; \alpha = \beta = 1, \gamma = \delta = 2$  и положить правую часть равной нулю во всех остальных случаях. Из (3.15) имеем

$$\text{при } \alpha = \beta = 1, \gamma = \delta = 1, 3 \quad (3.16)$$

$$a^1_2 a^1_3 = 0, \quad a^1_2 a^3_3 = 0, \quad a^1_3 a^1_1 = 0, \quad a^1_3 a^3_1 = 0, \quad a^1_1 a^1_2 = 0, \quad a^1_1 a^3_2 = 0$$

$$\text{при } \alpha = \beta = 2, \gamma = \delta = 1, 2 \quad (3.17)$$

$$a^2_2 a^1_3 = 0, \quad a^2_2 a^2_3 = 0, \quad a^2_3 a^1_1 = 0, \quad a^2_3 a^2_1 = 0, \quad a^2_1 a^1_2 = 0, \quad a^2_1 a^2_2 = 0$$

$$\text{при } \alpha = \beta = 3, \gamma = \delta = 2, 3 \quad (3.18)$$

$$a^3_2 a^2_3 = 0, \quad a^3_2 a^3_3 = 0, \quad a^3_3 a^2_1 = 0, \quad a^3_3 a^3_1 = 0, \quad a^3_1 a^2_2 = 0, \quad a^3_1 a^3_2 = 0$$

<sup>1</sup> Легко проверить, что при  $|e_i| = 1$  верно равенство  $2g = T_d : T_d$ , где свертка производится по двум одинаково расположенным индексам; однако из этого равенства не следует инвариантность  $g$  относительно преобразований (3.10) с учетом (3.11).

Из 18 уравнений (3.16) — (3.18) и из условия  $|a^i_j| \neq 0$  следует, что в каждой строке и в каждом столбце матрицы  $\|a^i_j\|$  только один элемент может отличаться от нуля; так, если

$$a^1_1 \neq 0, \text{ то } a^1_2 = a^1_3 = a^2_2 = a^2_3 = a^2_1 = a^3_1 = 0$$

Таким образом, получаем матрицы

$$\begin{array}{ccc} \text{при } a^1_1 \neq 0 & \text{при } a^1_2 \neq 0 & \text{при } a^1_3 \neq 0 \\ \left\| \begin{array}{ccc} a^1_1 & 0 & 0 \\ 0 & a^2_2 & 0 \\ 0 & 0 & a^3_3 \end{array} \right\| & \left\| \begin{array}{ccc} 0 & a^1_2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2_3 \\ a^3_1 & 0 & 0 \end{array} \right\| & \left\| \begin{array}{ccc} 0 & 0 & a^1_3 \\ a^2_1 & 0 & 0 \\ 0 & a^3_2 & 0 \end{array} \right\| \end{array} \quad (3.19)$$

Три уравнения (3.15), когда правая часть равна единице при  $a^1_1 \neq 0$ , дают

$$(a^2_2)^2 (a^3_3)^2 = 1, \quad (a^3_3)^2 (a^1_1)^2 = 1, \quad (a^1_1)^2 (a^2_2)^2 = 1 \quad (3.20)$$

Вещественные решения этих уравнений и уравнений, которые получаются аналогично, при  $a^1_2 \neq 0$  и  $a^1_3 \neq 0$  даются равенствами

$$\begin{array}{ccc} a^1_1 = \pm 1, & a^2_2 = \pm 1, & a^3_3 = \pm 1 \\ a^1_2 = \pm 1, & a^2_3 = \pm 1, & a^3_1 = \pm 1 \\ a^1_3 = \pm 1, & a^2_1 = \pm 1, & a^3_2 = \pm 1 \end{array} \quad (3.21)$$

Из найденных значений для  $a^i_j$  следует, что каждая из матриц (3.19) расщепляется на 8 матриц, всего получим подгруппу группы матриц для  $\bar{6}/4$ , состоящую из  $3 \times 8 = 24$  ортогональных матриц.

Ясно, что полученные решения удовлетворяют полной системе уравнений (3.15) и всякое вещественное решение содержится в найденном.

Добавление в качестве определяющей величины тензора  $E$ , инвариантного только по отношению к группе собственных вращений, при  $\Delta = +1$  приводит к исключению матриц с  $\Delta = -1$ .

Совокупность двух тензоров  $O_h$  и  $E$  выделяет из найденной для  $O_h$  группы 48 матриц подгруппу, состоящую из 24 матриц с  $\Delta = +1$ .

Совокупность тензоров  $g$ ,  $T_d$  и  $E$  также выделяет из 24 матриц, найденных для группы  $g$ ,  $T_d$ , подгруппу, состоящую из 12 матриц с  $\Delta = +1$ .

Фактическое выделение соответствующих матриц показывает, что группы преобразований, соответствующие системам из 12 матриц для тензоров  $g$ ,  $T_d$ ,  $E$  и тензоров  $T_h$ ,  $E$ , совпадают между собой.

Эквивалентность отмеченных в таблице тензоров и соответствующих групп симметрии для тетрагональной сингонии вытекает из следующих соображений.

Группы симметрий тетрагональной сингонии можно получить как пересечение соответствующих групп симметрии кристаллов кубической сингонии и групп симметрии текстур.

Поэтому выделение соответствующих подгрупп из групп кубической сингонии и из групп текстур можно осуществить путем образования совокупности тензоров из тензоров, задающих соответствующие группы кубической симметрии, и тензоров, задающих группы текстур. Легко

усмотреть непосредственно, что условие инвариантности отмеченных совокупностей тензоров для каждого из 7 классов тетрагональной сингонии определяет группы матриц преобразований, соответствующих группам симметрии именно этих кристаллических классов.

Для обоснования выбора тензоров, задающих симметрию гексагональной и тригональной сингоний, необходимо рассмотреть условия инвариантности компонент следующих пар тензоров  $D_{6h}$  и  $e_3^2$ ,  $D_{3h}$  и  $e_3^2$ ,  $D_{3d}$  и  $e_3^2$ . Условие инвариантности диады  $e_3^2$  выделяет в качестве допустимых матриц преобразования координат только матрицы следующего вида:

$$\begin{vmatrix} a^1_1 & a^1_2 & a^1_3 \\ a^2_1 & a^2_2 & a^2_3 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{vmatrix} \quad (3.22)$$

Из инвариантности  $D_{6h}$  или  $D_{3h}$  или  $D_{3d}$  следует, что  $a^1_3 = a^2_3 = 0$ . Если вместо  $e_3^2$  потребовать инвариантность вектора  $e_3$ , то это приведет к матрицам преобразования вида:

$$\begin{vmatrix} a^1_1 & a^1_2 & 0 \\ a^2_1 & a^2_2 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{vmatrix} \quad (3.23)$$

Так как  $D_{6h}$ ,  $D_{3h}$  и  $D_{3d}$  выражаются только через векторы базиса  $e_1$  и  $e_2$ , то инвариантность этих тензоров связана со строением матриц второго ранга:

$$D = \begin{vmatrix} a^1_1 & a^1_2 \\ a^2_1 & a^2_2 \end{vmatrix} \quad (3.24)$$

Для выяснения структуры матриц  $D$  удобно ввести комплексный базис по формулам:

$$j_1 = e_1 + ie_2, \quad j_2 = e_1 - ie_2$$

В этом базисе тензоры  $D_{3h}$ ,  $D_{6h}$  и  $D_{3d}$  приобретают вид:

$$2D_{3h} = j_1^3 + j_2^3, \quad 4D_{6h} = (j_1^3 + j_2^3)^2, \quad 2D_{3d} = e_3(j_1^3 + j_2^3)$$

Условия инвариантности этих тензоров в вещественном базисе можно переписать в условия инвариантности в комплексном базисе. Если формулы преобразования комплексного базиса имеют вид

$$j_i = b^\alpha_i j'_\alpha$$

то связь между матрицами  $\|a^i_j\|$  и  $\|b^i_j\|$  определена равенством

$$\begin{vmatrix} a^1_1 & a^1_2 \\ a^2_1 & a^2_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{i}{2} & \frac{i}{2} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} b^1_1 & b^1_2 \\ b^2_1 & b^2_2 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{vmatrix} \quad (3.25)$$

Условие инвариантности тензора  $D_{3d}$  приводит к следующей системе уравнений для  $b^i_j$ :

$$b^\alpha_1 b^\beta_1 b^\gamma_1 + b^\alpha_2 b^\beta_2 b^\gamma_2 = \begin{cases} 1 & \text{при } \alpha = \beta = \gamma \\ 0 & \text{в остальных случаях} \end{cases}$$

которая в раскрытом виде равносильна уравнениям:

$$\begin{aligned} (b^1_1)^3 + (b^1_2)^3 &= 1, & b^1_1 (b^2_1)^2 + b^1_2 (b^2_2)^2 &= 0 \\ (b^2_1)^3 + (b^2_2)^3 &= 1, & b^2_1 (b^1_1)^2 + b^2_2 (b^1_2)^2 &= 0 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Из этих уравнений легко найти все решения уравнений (3.26), удовлетворяющие условию  $|b_j^i| \neq 0$ . Так как  $a^i_j$  вещественны, то из формулы (3.25) следует, что  $b^1_1 = \bar{b}^2_2$  и  $b^1_2 = \bar{b}^2_1$ .

Учитывая это, получим шесть матриц для  $\|b^i_j\|$ : (3.27)

$$\left\| \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{cc} \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon^2 \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{cc} \varepsilon^2 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{cc} 0 & \varepsilon \\ \varepsilon^2 & 0 \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{cc} 0 & \varepsilon^2 \\ \varepsilon & 0 \end{array} \right\| \quad \left( \varepsilon = \exp \frac{2\pi i}{3} \right)$$

Ортогональность соответствующих матриц (3.22) получается автоматически.

С помощью формул (3.27), (3.25) и (3.22) легко выписать двенадцать матриц, соответствующих инвариантности тензоров  $D_{3h}$ ,  $e_3^2$ , характеризующих класс  $m \cdot 3 : m$  гексагональной сингонии.

Инвариантность комбинации  $D_{3h}$ ,  $e_3$  определяет шесть матриц, получающихся из (3.23), (3.25) и (3.27) и соответствующих классу  $3 \cdot m$  тригональной сингонии.

Условия инвариантности  $D_{3d}$  и  $e_3^2$  несколько видоизменяют уравнения (3.26). Разрешение соответствующих уравнений приводит к системе двенадцати матриц. Первые шесть из них, соответствующие инвариантности  $e_3$ , совпадают с матрицами класса  $3 \cdot m$  ( $D_{3h}$ ,  $e_3$ ), а другие шесть получаются из первых изменением знака всех компонент матриц.

Условия инвариантности  $D_{6h}$  и  $e_3^2$  приводят к матрицам типа (3.22) и в соответствующих уравнениях типа (3.26) необходимо справа вместо  $+1$  написать  $\pm 1$ .

Вследствие этого соответствующее решение содержит двенадцать матриц класса  $m \cdot 3 : m$  и еще следующие двенадцать матриц:

$$\left\| \begin{array}{ccc} \tau^3 & 0 & 0 \\ 0 & \tau^3 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{ccc} \tau & 0 & 0 \\ 0 & \tau^5 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{ccc} \tau^5 & 0 & 0 \\ 0 & \tau & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{array} \right\| \\ \left\| \begin{array}{ccc} 0 & \tau^3 & 0 \\ \tau^3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{ccc} 0 & \tau & 0 \\ \tau^5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{array} \right\|, \quad \left\| \begin{array}{ccc} 0 & \tau^5 & 0 \\ \tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{array} \right\| \quad \left( \tau = \exp \frac{\pi i}{3} \right)$$

Соответствующие действительные матрицы легко выписать с помощью формулы (3.25).

Тензорные параметры для всех остальных классов гексагональной и тригональной сингоний, являющихся подгруппами групп симметрий, изученных выше, легко получить, рассматривая пересечения соответствующих групп, для которых тензорные характеристики уже установлены.

Что касается ромбической, моноклинной и триклинной сингоний, то указанные в таблице тензорные характеристики симметрии очевидны непосредственно. Ясно, что соответствующие совокупности тензоров, задающие группы симметрии, не определяются однозначно.

В каждом из случаев таблицы вместо указанных тензоров можно взять другую систему тензоров, связанную взаимно однозначно с системой тензоров, указанной в таблице. В частности, число и порядки тензоров, определяющих симметрию, можно брать различными.

Например, вместо тензоров, указанных в таблице, можно воспользоваться следующим соответствием групп и тензоров: <sup>1</sup>

$m \cdot 2 : m$	$e_1^2, e_2^2, e_3^2,$	$2$	$e_1^2, e_2^2, e_3, E$
$2 : 2$	$e_1^2, e_2^2, e_3^2, E,$	$m$	$e_1, e_2, e_3^2$
$2 \cdot m$	$e_1^2, e_2^2, e_3,$	$\bar{2}$	$e_1e_2, e_1e_3, e_2e_3$
$2 : m$	$e_1^2, e_2^2, e_3^2, \Omega,$		

Легко выразить каждый тензор из этих систем через тензоры, указанные в таблице. Обратные связи очевидны непосредственно.

Выше рассмотрен вопрос об определении тензоров, задающих группы симметрии кристаллов и текстур.

Обратная задача об определении ортогональных групп симметрии, соответствующих данному тензору, была разрешена выше в отдельных важных частных случаях.

4°. Тензорные функции от тензоров, характеризующих геометрические свойства текстур и кристаллов. Ниже даются общие формулы вида (1.3), верные в произвольных координатах для компонент векторов  $A^i$ , компонент тензоров второго ранга  $A^{ij}$ , третьего ранга  $A^{ijk}$  и четвертого ранга  $A^{ijkl}$  для текстур <sup>2</sup> и кристаллов в зависимости от тензорных аргументов, данных в таблице, определяющих соответствующие группы симметрии.

Так как совместные инварианты тензоров, определяющих группы симметрии, являются абсолютными постоянными, то инвариантные коэффициенты  $k_s$  ( $s = 1, \dots, p$ ) представляют собой числовые постоянные или функции каких-либо скаляров, которые, помимо выделенных тензоров, также могут присутствовать в перечне определяющих величин.

В формулах выписаны в каждом случае только  $p$  линейно-независимых слагаемых.

Выбор этих слагаемых можно изменять, однако в каждом другом случае соответствующий набор слагаемых можно представить в виде линейных комбинаций из выписанных в формулах.

Вопрос о выборе линейно-независимых тензоров может оказаться существенным при использовании различных дополнительных гипотез о характере функциональных связей (линейная зависимость от некоторых компонент и т. п.).

Из этих формул легко получить известные данные [2], когда выполнены следующие условия симметрии;

$$A^{ij} = A^{ji}, \quad A^{ijk} = A^{ikj}, \quad A^{ijkl} = A^{ijlk}, \quad A^{ijkl} = A^{jkl i}, \quad A^{ijkl} = A^{klij}$$

Эти условия выполняются при дополнительных ограничениях, которые нужно наложить на инвариантные коэффициенты.

Соответствующие формулы получатся из выписанных при помощи операции симметрирования.

<sup>1</sup> Произведения векторов и их степени понимаются как диадные.

<sup>2</sup> Аналогичные формулы, содержащие неточности, были опубликованы в [28]. Здесь даны исправленные формулы.

## Для текстур

Класс  $\infty/\infty \cdot m$  ( $g$ ) \

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = kg^{ij}, \quad A^{ijk} = 0, \quad A^{ijkl} = k_1g^{ij}g^{kl} + k_2g^{ik}g^{jl} + k_3g^{il}g^{jk}$$

Класс  $\infty/\infty$  ( $g, E$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = kg^{ij}, \quad A^{ijk} = kE^{ijk}, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty/\infty \cdot m)$$

Класс  $m \cdot \infty : m$  ( $g, B = e_3^2$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1g^{ij} + k_2B^{ij}, \quad A^{ijk} = 0, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty/\infty \cdot m) + k_4g^{ij}B^{kl} + \\ + k_5g^{ik}B^{jl} + k_6g^{il}B^{jk} + k_7g^{kl}B^{ij} + k_8g^{jl}B^{ik} + k_9g^{jk}B^{il} + k_{10}B^{ij}B^{kl}$$

Класс  $\infty : 2$  ( $g, B = e_3^2, E$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1g^{ij} + k_2B^{ij} \\ A^{ijk} = k_1E^{ijk} + k_2B^i_{\alpha}E^{\alpha jk} + k_3E^{ija}B^k_{\alpha}, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot \infty : m)$$

Класс  $\infty : m$  ( $g, B = e_3^2, \Omega = e_1e_2 - e_2e_1$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1g^{ij} + k_2B^{ij} + k_3\Omega^{ij}, \quad A^{ijk} = 0 \\ A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot \infty : m) + k_{11}g^{ij}\Omega^{kl} + k_{12}g^{ik}\Omega^{jl} + k_{13}g^{il}\Omega^{jk} + k_{14}g^{kl}\Omega^{ij} + \\ + k_{15}g^{jl}\Omega^{ik} + k_{16}g^{jk}\Omega^{il} + k_{17}B^{ij}\Omega^{kl} + k_{18}B^{ik}\Omega^{jl} + k_{19}\Omega^{ij}B^{kl}$$

Класс  $\infty \cdot m$  ( $g, b = e_3$ )

$$A^i = kb^i, \quad A^{ij} = k_1g^{ij} + k_2b^ib^j, \\ A^{ijk} = k_1g^{ij}b^k + k_2g^{ik}b^j + k_3g^{jk}b^i + k_4b^ib^jb^k \\ A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty/\infty \cdot m) + k_4g^{ij}b^kb^l + k_5g^{ik}b^jb^l + k_6g^{il}b^jb^k + k_7g^{kl}b^ib^j + \\ + k_8g^{jl}b^ib^k + k_9g^{jk}b^ib^l + k_{10}b^ib^jb^kb^l$$

Класс  $\infty$  ( $g, b = e_3, E$ )

$$A^i = kb^i, \quad A^{ij} = k_1g^{ij} + k_2b^ib^j + k_3E^{ija}b_{\alpha} \\ A^{ijk} = k_1g^{ij}b^k + k_2g^{ik}b^j + k_3g^{jk}b^i + k_4b^ib^jb^k + k_5\Omega^{ij}b^k + k_6\Omega^{ik}b^j + k_7\Omega^{jk}b^i \\ A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty \cdot m) + k_{11}g^{ij}\Omega^{kl} + k_{12}g^{ik}\Omega^{jl} + k_{13}g^{il}\Omega^{jk} + k_{14}g^{kl}\Omega^{ji} + k_{15}g^{jl}\Omega^{ik} + \\ + k_{16}g^{jk}\Omega^{il} + k_{17}b^ib^jb^k\Omega^{kl} + k_{18}b^ib^kb^j\Omega^{jl} + k_{19}\Omega^{ij}b^kb^l \quad (\Omega^{ij} = E^{ija}b_{\alpha})$$

## Для кубической сингонии

Класс  $\bar{6}/4$  ( $O_h$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = kg^{ij}, \quad A^{ijk} = 0, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty/\infty \cdot m) + k_4O_h^{ijkl}$$

Класс  $3/4$  ( $O_h, E$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = kg^{ij}, \quad A^{ijk} = kE^{ijk}, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\bar{6}/4)$$

Класс  $3/\bar{4}$  ( $g, T_d$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = kg^{ij}, \quad A^{ijk} = kT_d^{ijk}, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\bar{6}/4)$$

Класс  $3/2$  ( $g, E, T_d$ ) или ( $T_h, E$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = kg^{ij}, \quad A^{ijk} = k_1E^{ijk} + k_2T_d^{ijk} \\ A^{ijkl} = A^{ijkl} (\bar{6}/4) + k_3T_h^{ijkl} + k_4T_h^{iljk} + k_5T_h^{ikjl}$$

Класс  $\bar{6}/2$  ( $T_h$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = kg^{ij}, \quad A^{ijk} = 0, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (3/2)$$

## Тетрагональная сингония

Класс  $m \cdot 4 : m$  ( $O_h, B = e_3^2$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = A^{ij} (m \cdot \infty : m) = k_1 g^{ij} + k_2 B^{ij}$$

$$A^{ijk} = 0, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot \infty : m) + k_{11} O_h^{ijkl}$$

Класс  $\bar{4} \cdot m$  ( $g, T_d, B = e_3^2$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 B^{ij}$$

$$A^{ijk} = k_1 T_d^{ijk} + k_2 T_d^{ija} B^k \cdot \alpha + k_3 T_d^{ika} B^j \cdot \alpha, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot 4 : m)$$

Класс  $4 : 2$  ( $O_h, B = e_3^2, E$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 B^{ij}, \quad A^{ijk} = A^{ijk} (\infty : 2), \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot 4 : m)$$

Класс  $4 : m$  ( $O_h, \Omega = e_1 e_2 - e_2 e_1, B = e_3^2$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = A^{ij} (\infty : m), \quad A^{ijk} = 0$$

$$A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty : m) + k_{20} O_h^{ijkl} + k_{21} O_h^{jkla} \Omega^i \cdot \alpha$$

Класс  $\bar{4}$  ( $g, T_d, \Omega = e_1 e_2 - e_2 e_1, B = e_3^2$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = A^{ij} (\infty : m), \quad A^{ijk} = A^{ijk} (\bar{4} \cdot m) + k_4 T_d^{ija} \Omega^k \cdot \alpha +$$

$$+ k_5 \Omega^i \cdot \alpha T_d^{\alpha jk} + k_6 \Omega^i \cdot \alpha T_d^{\alpha j\beta} B^k \cdot \beta, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (4 : m)$$

Класс  $4 \cdot m$  ( $O_h, b = e_3$ )

$$A^i = k b^i, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 b^i b^j, \quad A^{ijk} = A^{ijk} (\infty \cdot m), \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot 4 : m)$$

Класс  $4$  ( $O_h, b = e_3, E$ )

$$A^i = k b^i, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 b^i b^j + k_3 \Omega^{ij} \quad (\Omega^{ij} = E^{ija} b_a)$$

$$A^{ijk} = A^{ijk} (\infty), \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty) + k_{20} O_h^{ijkl} + k_{21} O_h^{jkla} \Omega^i \cdot \alpha$$

## Гексагональная сингония

Класс  $m \cdot 6 : m$  ( $D_{6h}, B = e_3^2$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 B^{ij}, \quad A^{ijk} = 0, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot \infty : m)$$

Класс  $m \cdot 3 : m$  ( $D_{3h}, B = e_3^2$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 B^{ij}, \quad A^{ijk} = k D_{3h}^{ijk}, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot \infty : m)$$

Класс  $6 : 2$  ( $D_{6h}, B = e_3^2, E$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 B^{ij}, \quad A^{ijk} = A^{ijk} (\infty : 2), \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot \infty : m)$$

Класс  $6 : m$  ( $D_{6h}, B = e_3^2, \Omega = e_1 e_2 - e_2 e_1$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = A^{ij} (\infty : m), \quad A^{ijk} = 0, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty : m)$$

Класс  $3 : m$  ( $D_{3h}, B = e_3^2, \Omega = e_1 e_2 - e_2 e_1$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = A^{ij} (\infty : m), \quad A^{ijk} = k_1 D_{3h}^{ijk} + k_2 D_{3h}^{ija} \Omega^k \cdot \alpha, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty : m)$$

Класс  $6 \cdot m$  ( $D_{6h}, b = e_3$ )

$$A^i = k b^i, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 b^i b^j, \quad A^{ijk} = A^{ijk} (\infty \cdot m), \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty \cdot m)$$

Класс  $6$  ( $D_{6h}, b = e_3, E$ )

$$A^i = k b^i, \quad A^{ij} = A^{ij} (\infty), \quad A^{ijk} = A^{ijk} (\infty), \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty)$$

## Тригональная сингония

Класс  $\bar{6} \cdot m$  ( $D_{3d}$ ,  $B = e_3^2$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 B^{ij}, \quad A^{ijk} = 0$$

$$A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot \infty : m) + k_{11} D_{3d}^{ijkl} + k_{12} D_{3d}^{jikl} + k_{13} D_{3d}^{kijl} + k_{14} D_{3d}^{lijk}$$

Класс  $3 : 2$  ( $D_{3h}$ ,  $B = e_3^2$ ,  $E$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 B^{ij}, \quad A^{ijk} = A^{ijk} (\infty : 2) + k_4 D_{3h}^{ijk}$$

$$A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot \infty : m) + k_{11} D_{3h}^{ija} E_{\alpha}^{kl} + k_{12} E^{\alpha ij} D_{3h}^{kl \cdot \alpha} + \\ + k_{13} E^{\alpha ik} D_{3h}^{jl \cdot \alpha} + k_{14} E^{kj} D_{3h}^{il \cdot \alpha}$$

Класс  $\bar{6}$  ( $D_{3d}$ ,  $B = e_3^2$ ,  $\Omega = e_1 e_2 - e_2 e_1$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = A^{ij} (\infty : m), \quad A^{ijk} = 0$$

$$A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty : m) + k_{20} D_{3d}^{ijkl} + k_{21} D_{3d}^{jikl} + k_{22} D_{3d}^{kijl} + k_{23} D_{3d}^{lijk} + \\ + k_{24} D_{3d}^{ijk\alpha} \Omega_{\alpha}^{l \cdot} + k_{25} D_{3d}^{jika} \Omega_{\alpha}^{l \cdot} + k_{26} D_{3d}^{kija} \Omega_{\alpha}^{l \cdot} + k_{27} D_{3d}^{lija} \Omega_{\alpha}^{k \cdot}$$

Класс  $3 \cdot m$  ( $D_{3h}$ ,  $b = e_3$ )

$$A^i = k b^i, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 b^i b^j, \quad A^{ijk} = A^{ijk} (\infty \cdot m) + k_5 D_{3h}^{ijk}$$

$$A^{ijkl} = A^{ijkl} (\infty \cdot m) + k_{11} D_{3h}^{ijk} b^l + k_{12} D_{3h}^{ijl} b^k + k_{13} D_{3h}^{ikl} b^j + k_{14} D_{3h}^{klj} b^i$$

Класс  $3$  ( $D_{3h}$ ,  $b = e_3$ ,  $E$ )

$$A^i = k b^i, \quad A^{ij} = A^{ij} (\infty)$$

$$A^{ijk} = A^{ijk} (\infty) + k_8 D_{3h}^{ijk} + k_9 D_{3h}^{ija} \Omega_{\alpha}^{k \cdot}, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (\bar{6})$$

## Ромбическая сингония

Класс  $m \cdot 2 : m$  ( $D_{2h}$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 D_{2h}^{ij} + k_3 D_{2h}^{i\alpha} D_{2h\alpha}^{\cdot j} \quad (\text{Формула Гамильтона — Кэли})$$

$$A^{ijk} = 0, \quad A^{ijkl} = k_1 g^{ij} g^{kl} + k_2 g^{ik} g^{jl} + k_3 g^{il} g^{jk} + k_4 g^{ij} D_{2h}^{kl} + k_5 g^{ik} D_{2h}^{jl} + \\ + k_6 g^{il} D_{2h}^{jk} + k_7 D_{2h}^{ij} g^{kl} + k_8 D_{2h}^{ik} g^{jl} + k_9 D_{2h}^{il} g^{jk} + k_{10} g^{ij} M^{kl} + \\ + k_{11} g^{ik} M^{jl} + k_{12} g^{il} M^{jk} + k_{13} M^{ij} g^{kl} + k_{14} M^{ik} g^{jl} + k_{15} M^{il} g^{jk} + k_{16} D_{2h}^{ij} D_{2h}^{kl} + \\ + k_{17} D_{2h}^{il} M^{jk} + k_{18} D_{2h}^{ij} M^{kl} + k_{19} D_{2h}^{ik} M^{jl} + k_{20} M^{ij} D_{2h}^{kl} + k_{21} M^{ij} M^{kl} \\ (M^{ij} = D_{2h}^{i\alpha} D_{2h\alpha}^{\cdot j})$$

Класс  $2 : 2$  ( $D_{2h}$ ,  $E$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = A^{ij} (m \cdot 2 : m)$$

$$A^{ijk} = k_1 E^{ijk} + k_2 E^{ija} D_{2h\alpha}^{\cdot k} + k_3 E^{ika} D_{2h\alpha}^{\cdot j} + k_4 E^{ija} M_{\alpha}^{k \cdot} + \\ + k_5 E^{ika} M_{\alpha}^{j \cdot} + k_6 D_{2h}^{i\alpha} E_{\alpha \cdot \beta}^{j \cdot} M^{\beta k}, \quad A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot 2 : m)$$

Класс  $2 \cdot m$  ( $D_{2h}$ ,  $b = e_3$ )

$$A^i = k b^i, \quad A^{ij} = A^{ij} (m \cdot 2 : m) = k_1 g^{ij} + k_2 b^i b^j + k_3 D_{2h}^{ij}$$

$$A^{ijk} = k_1 g^{ij} b^k + k_2 g^{ik} b^j + k_3 g^{kj} b^i + k_4 b^i b^j b^k + k_5 D_{2h}^{ij} b^k + k_6 D_{2h}^{ik} b^j + k_7 D_{2h}^{kj} b^i$$

$$A^{ijkl} = A^{ijkl} (m \cdot 2 : m)$$

## Моноклидная сингония

Класс  $2 : m$  ( $D_{2h}$ ,  $\Omega = e_1 e_2 - e_2 e_1$ )

$$A^i = 0, \quad A^{ij} = A^{ij} (m \cdot 2 : m) + k_4 \Omega^{ij} + k_5 \Omega^{i\alpha} D_{2h}^{j \cdot \alpha}, \quad A^{ijk} = 0$$

$$\begin{aligned} A^{ijkl} = & A^{ijkl} (m \cdot 2 : m) + k_{22} g^{ij} \Omega^{kl} + k_{23} g^{ik} \Omega^{jl} + k_{24} g^{il} \Omega^{jk} + k_{25} g^{kl} \Omega^{ij} + k_{26} g^{jl} \Omega^{ik} + \\ & + k_{27} g^{jk} \Omega^{il} + k_{28} g^{ij} \Omega^{k\alpha} D_{2h\alpha}^{l \cdot} + k_{29} g^{ik} \Omega^{j\alpha} D_{2h\alpha}^{l \cdot} + k_{30} g^{il} \Omega^{j\alpha} D_{2h\alpha}^{k \cdot} + k_{31} g^{kl} \Omega^{i\alpha} D_{2h\alpha}^{j \cdot} + \\ & + k_{32} g^{jl} \Omega^{i\alpha} D_{2h\alpha}^{k \cdot} + k_{33} g^{jk} \Omega^{i\alpha} D_{2h\alpha}^{l \cdot} + k_{34} D_{2h}^{ij} \Omega^{kl} + k_{35} D_{2h}^{ik} \Omega^{jl} + k_{36} D_{2h}^{kl} \Omega^{ij} + \\ & + k_{37} D_{2h}^{ij} \Omega^{k\alpha} D_{2h\alpha}^{l \cdot} + k_{38} D_{2h}^{il} \Omega^{j\alpha} D_{2h\alpha}^{k \cdot} + k_{39} D_{2h}^{kl} \Omega^{i\alpha} D_{2h\alpha}^{j \cdot} + \\ & + k_{40} M^{kl} \Omega^{ij} + k_{41} M^{ij} \Omega^{k\alpha} D_{2h\alpha}^{l \cdot} \end{aligned}$$

Класс  $2$  ( $D_{2h}$ ,  $E$ ,  $b = e_3$ )

$$A^i = k b^i, \quad A^{ij} = A^{ij} (2 : m)$$

$$\begin{aligned} A^{ijk} = & k_1 g^{ij} b^k + k_2 g^{ik} b^j + k_3 g^{jk} b^i + k_4 b^i b^j b^k + k_5 D_{2h}^{ij} b^k + k_6 D_{2h}^{ik} b^j + k_7 D_{2h}^{kj} b^i + \\ & + k_8 \Omega^{ij} b^k + k_9 \Omega^{ik} b^j + k_{10} \Omega^{kj} b^i + k_{11} \Omega^{i\alpha} D_{2h\alpha}^{j \cdot} b^k + k_{12} \Omega^{i\alpha} D_{2h\alpha}^{k \cdot} b^j + k_{13} \Omega^{k\alpha} D_{2h\alpha}^{j \cdot} b^i \\ & A^{ijkl} = A^{ijkl} (2 : m) \end{aligned}$$

Класс  $m$  ( $D_{2h}$ ,  $b = e_1$ ,  $c = e_2$ )

$$A^i = k_1 b^i + k_2 c^i, \quad A^{ij} = k_1 g^{ij} + k_2 b^i b^j + k_3 c^i c^j + k_4 b^i c^j + k_5 c^i b^j$$

$$\begin{aligned} A^{ijk} = & k_1 g^{ij} b^k + k_2 g^{ik} b^j + k_3 g^{jk} b^i + k_4 b^i b^j b^k + k_5 g^{ij} c^k + k_6 g^{ik} c^j + k_7 g^{jk} c^i + \\ & + k_8 c^i b^j b^k + k_9 b^i c^j b^k + k_{10} b^i b^j c^k + k_{11} b^i c^j c^k + k_{12} c^i b^j c^k + k_{13} c^i c^j b^k + k_{14} c^i c^j c^k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A^{ijkl} = & A^{ijkl} (2 : m) = k_1 g^{ij} g^{kl} + k_2 g^{ik} g^{jl} + k_3 g^{il} g^{jk} + k_4 g^{ij} b^k b^l + k_5 g^{ik} b^j b^l + \\ & + k_6 g^{il} b^j b^k + k_7 b^i b^j g^{kl} + k_8 b^i b^k g^{jl} + k_9 b^i b^l g^{jk} + k_{10} g^{ij} b^k c^l + k_{11} g^{ik} b^j c^l + \\ & + k_{12} g^{il} b^j c^k + k_{13} g^{kl} b^i c^j + k_{14} g^{jl} b^i c^k + k_{15} g^{jk} b^i c^l + k_{16} g^{ij} c^k b^l + k_{17} g^{ik} c^j b^l + \\ & + k_{18} g^{il} c^j b^k + k_{19} g^{kl} c^i b^j + k_{20} g^{jl} c^i b^k + k_{21} g^{jk} c^i b^l + k_{22} c^i b^j b^k b^l + k_{23} b^i c^j b^k b^l + \\ & + k_{24} b^i b^j c^k b^l + k_{25} b^i b^j b^k c^l + k_{26} g^{ij} c^k c^l + k_{27} g^{ik} c^j c^l + k_{28} g^{il} c^j c^k + k_{29} c^k c^l c^i c^j + \\ & + k_{30} b^i b^j b^k b^l + k_{31} g^{jk} c^i c^l + k_{32} b^i b^j c^k c^l + k_{33} b^i b^k c^j c^l + k_{34} b^i b^l c^j c^k + k_{35} c^i c^j b^k b^l + \\ & + k_{36} c^i c^k b^j b^l + k_{37} c^i c^l b^j b^k + k_{38} b^i c^j c^k c^l + k_{39} c^i b^j c^k c^l + k_{40} c^j c^i b^k c^l + k_{41} c^i c^j c^k b^l \end{aligned}$$

Если вместо  $D_{2h}$ ,  $e_1$ ,  $e_2$  в качестве определяющих тензоров взять  $e_1$ ,  $e_2$  и  $e_3^2$ , то последнюю формулу для тензоров четвертого ранга можно заменять формулой:

$$\begin{aligned} A_4 = & k^{ijkl} e_i e_j e_k e_l + k^{\alpha\beta\gamma\delta} e_\alpha e_\beta e_\gamma e_\delta + k^{\alpha\beta\gamma\delta} e_\alpha e_\beta e_\gamma e_\delta + k^{3\alpha\beta} e_\alpha e_\beta e_\alpha e_\beta + \\ & + k^{3\alpha\beta} e_\alpha e_\beta e_\alpha e_\beta + k^{3\alpha\beta\gamma} e_\alpha e_\beta e_\gamma e_\delta + k^{\alpha\beta\gamma\delta} e_\alpha e_\beta e_\gamma e_\delta + k^{3333} e_\alpha e_\beta e_\gamma e_\delta \end{aligned} \quad (*)$$

где суммирование производится по индексам  $i, j, k, l, \alpha, \beta$ , принимающим только два значения 1 и 2. Простой подсчет показывает, что в этой формуле имеется 41 слагаемое, причем их линейная независимость очевидна непосредственно.

Нетрудно видеть, что для тензоров четного ранга и, в частности, для тензоров четвертого ранга для классов моноклидной сингонии  $2 : m$ ,  $2$  и  $m$  соответствующие опреде-

ляющие параметры могут быть заменены одной и той же системой тензоров  $e_1, e_2$  и  $e_3^2$ , поэтому можно пользоваться одинаковыми формулами. Таким образом, для всех классов моноклинной сингонии для тензоров четвертого ранга применима формула (\*).

Легко также усмотреть, что тензоры четвертого ранга для ромбической сингонии с 21 линейно-независимым членом получаются из формулы (\*), в которой надо взять члены с  $i = j, k = l; i = k, j = l$  и  $i = l, j = k$  и  $\alpha = \beta$ .

Таким образом, ясно, что при построении общих формул для тензорных функций первоначальный базис аргументов иногда выгодно видоизменять применительно к рассматриваемым отдельным случаям.

#### Триклинная сингония

Класс  $\bar{2}$  ( $C_2$ )

$A^i = 0, A^{ij}$  — общий случай с 9 компонентами

$A^{ijk} = 0, A^{ijkl}$  — общий случай с 81 компонентой.

Класс 1 ( $e_1, e_2, e_3$ )

Все тензоры имеют самый общий вид с отсутствием симметрии

5°. Тензорные функции для текстур и кристаллов при наличии дополнительных тензорных аргументов. Допустим теперь, что кроме тензоров, задающих геометрические свойства текстур и кристаллов, среди определяющих величин — независимых аргументов — имеются еще другие тензоры. Очевидно, что в этом случае группы симметрии совокупности определяющих параметров являются соответствующими группами или подгруппами текстур или кристаллов. Подгруппы, отличные от кристаллографических групп, могут возникнуть только при рассмотрении текстур. При добавлении других тензоров к тензорам, определяющим кристаллическую симметрию, будут получаться опять группы кристаллической симметрии, либо группа симметрии сведется к тождественному преобразованию.

Все подгруппы данной группы кристаллической симметрии содержатся среди 32 кристаллических групп. поэтому при добавлении других тензоров к тензорам, задающим симметрию кристаллов, группы симметрии совокупности аргументов будут принадлежать также к одной из 32 кристаллических групп.

Сокращение числа линейно-независимых компонент у определяемого тензора в общем случае может возникнуть только при наличии соответствующей симметрии. Очевидно, что упрощения в случаях кристаллов возникают, когда совокупность определяющих параметров допускает нетривиальную группу симметрии.

После выяснения типа кристаллической группы симметрии для совокупности тензорных аргументов можно воспользоваться одной из формул в 4° для выяснения строения компонент определяемой тензорной функции.

Таким образом, можно воспользоваться формулами из 4° для установления строения тензорных функций в общем случае для кристаллов. Для фактического выяснения природы соответствующих формул необходимо изучить свойства симметрии совокупности заданных аргументов, что для кристаллов равносильно представлению определяющих

тензоров, через совокупность тензоров, характеризующих кристаллические классы, отмеченные в таблице.

Приведенные выше соображения позволяют легко проанализировать большое число разных частных случаев, когда дополнительные тензоры специальные или имеют специальный вид в кристаллофизических осях.

При наличии дополнительных тензоров скаляры  $k_s$  в общем случае являются функциями совместных инвариантов дополнительных тензоров и тензоров, задающих симметрию текстур или кристаллов.

Переменные совместные инварианты возникают за счет дополнительных тензоров. Число функционально независимых инвариантов в общем случае равно числу функционально независимых компонент переменных тензоров. В некоторых частных случаях число функционально независимых компонент может быть меньшим.

Скалярные аргументы  $\omega_i$  в фиксированной системе координат, в функции которых могут быть определены коэффициенты  $k_s$ , в общем случае можно выбрать так, чтобы они сохраняли свое значение для различных переменных тензоров, эквивалентных с точки зрения симметрии текстур или кристаллов соответственно. Такие аргументы, установленные в фиксированной системе координат, могут отличаться от инвариантов  $\Omega_i$  при любых преобразованиях координат и совпадать с ними ( $\omega_i = \Omega_i$ ) в данной фиксированной системе координат.

6°. О тензоре кривизны Римана пространства и обобщение теоремы Шура. Теория, развитая выше, связана непосредственно со всеми закономерностями, рассматриваемыми в математике и физике, которые формулируются в виде векторных и тензорных уравнений и которые в той или иной степени связаны со свойствами геометрической симметрии.

Существующие приложения многообразны; укажем например закон Гука для текстур и кристаллов, пьезоэлектрические и оптические эффекты и т. п.

В качестве одного из примеров рассмотрим тензор кривизны Кристоффеля — Римана  $R_{ijkl}$ .

Как известно [28] этот тензор антисимметричен при перестановке индексов  $i$  и  $j$  или индексов  $k$  и  $l$  и симметричен относительно перестановки пары индексов  $ij$  на  $kl$ .

В случае трехмерного пространства среди компонент  $R_{ijkl}$  имеется только шесть компонент, которые могут принимать независимые произвольные значения. Эти шесть компонент определяют шесть компонент симметричного тензора второго ранга  $K^{mn}$ , который можно ввести по формуле

$$K^{mn} = E^{ijm} E^{kln} R_{ijkl} \quad (6.1)$$

Отсюда

$$R_{ijkl} = \frac{1}{4} E_{ijm} E_{kln} K^{mn} \quad (6.2)$$

Как известно [31], компоненты тензора кривизны удовлетворяют тождеству Бьянки

$$\nabla_r R_{ijmn} + \nabla_m R_{ijnr} + \nabla_n R_{ijrm} = 0$$

где индексы  $m, n, r$  различны между собой, а  $\nabla_x$  — символ ковариантной производной по координате  $x^x$ .

Легко усмотреть, что тождество Бьянки эквивалентно следующему тождеству для компонент тензора  $K^{mn}$ :

$$\nabla_\alpha K^{m\alpha} = 0 \quad (6.3)$$

Если в точках Риманова пространства тензор кривизны допускает симметрию какого-либо типа, то на основании развитой выше теории легко написать общие формулы, определяющие компоненты тензоров  $R_{ijkl}$  и  $K^{mn}$  через компоненты тензоров, задающих соответствующие группы симметрии.

Например, для симметрии типа текстур верны следующие формулы:

для симметрии  $\infty / \infty \cdot m$  и  $\infty / \infty$

$$K^{mn} = kg^{mn} \quad (6.4)$$

для симметрии  $\infty \cdot m, m \cdot \infty : m, \infty : 2, \infty : m, \infty$

$$K^{mn} = kg^{mn} + k_1 b^m b^n \quad (6.5)$$

где  $b^m$  — компоненты единичного вектора, направленного вдоль оси симметрии.

Аналогичные формулы можно написать в любом случае, когда компоненты тензора  $K^{mn}$  допускают какую-либо конечную группу симметрии.

Например, при наличии симметрии, отвечающей любому из пяти классов кубической сингонии, верна формула:

$$K^{mn} = kg^{mn} \quad (6.6)$$

Следовательно, в этом случае тензор  $K^{mn}$  является шаровым, так же как и в случае полной изотропии.

Из (6.2) и (6.4)—(6.6) следуют соответствующие формулы для компонент тензора

$$R_{ijkl}$$

Из формулы (6.4) и из тождества Бьянки (6.2) следует

$$g^{m\alpha} \nabla_\alpha k = 0 \quad (6.7)$$

Равенство (6.7) выражает собой известную теорему Шура. По теореме Шура из изотропии тензора кривизны в каждой точке следует постоянство кривизны во всем пространстве, так как из (6.7) получается:

$$k = \text{const}$$

В данном выше доказательстве теоремы Шура содержится обобщение этой теоремы, заключающееся в том, что для выполнимости теоремы Шура нет необходимости требовать полной изотропии кривизны в каждой точке пространства. Достаточно выполнения в каждой точке условий симметрии группы  $3/2$ , т. е. инвариантности компонент тензоров  $K^{mn}$  или  $R_{ijkl}$  относительно 12 преобразований группы симметрии  $3/2$ .

Если кривизна определена в каждой точке постоянными коллинеарными векторами  $b^i$ , то тождество Бьянки дает:

$$\nabla^\lambda k + b^\lambda b^\mu \nabla_\mu k_1 = 0 \quad (6.8)$$

Уравнения (6.8) представляют собой систему уравнений, наложенных на кривизну для соответствующих римановых пространств.

Авторы выражают свою благодарность Ю. И. Сиротину, беседы с которым помогли им уяснить положение дел в кристаллофизике — области науки новой для них.

Поступила 28 II 1963

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Седов Л. И. Методы подобия и размерности в механике, Изд. 4-е, Гостехиздат, 1957.
2. Най Дж. Физические свойства кристаллов. ИЛ, 1960.
3. Вейль Г. Классические группы. ИЛ, 1947.
4. Döring W. Die Richtungsabhängigkeit der Kristallenergie. Annalen der Physik, 1958, 7 Folge, Bd. 1, Heft 1—3, S. 104—111.
5. Smith G. F., Rivlin R. S. The anisotropic tensors, Quarterly of Applied Mathematics, 1957, vol. 15, № 3, p. p. 308—314.
6. Pipkin A. C., Rivlin R. S. The Formulation of Constitutive Equations in Continuum Physics. Part I, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 1959, vol. 4, № 2, p. p. 129—144.

7. Сиротин Ю. И. Анизотропные тензоры. Докл. АН СССР, 1960, т. 133, № 2, 321—324.
8. Сиротин Ю. И. Целые рациональные базисы тензорных инвариантов кристаллографических групп. Докл. АН СССР 1963, т. 51.
9. Гуревич Г. Б. Основы теории алгебраических инвариантов. Гостехиздат, М.—Л., 1948.
10. Мальцев А. И. Основы линейной алгебры, Гостехтеоретиздат, М., 1956.
11. Smith F. G., Rivlin R. S. The strain-energy function for anisotropic elastic materials. Trans. Amer. Math. Soc., 1958, vol. 88, № 1, p. p. 175—193.
12. Smith F. G. Further Results on the Stain-Energy Function for Anisotropic Elastic Materials. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 1962, vol. 10, № 2, p.p. 108—118.
13. Багавантам С., Венкатарайуду Т. Теория групп и ее применение к физическим проблемам, ИЛ, 1959.
14. Jahn H. A. Note on the Bhagavantam Suryanarayana Method of Enumerating the Physical Constants of Crystals. Acta Crystallographica, 1949, vol. 2, Part 1, p.p. 30—33.
15. Шубников А. В., Флинт Е. Е., Бокый Г. Г. Основы кристаллографии, Изд. АН СССР, 1940.
16. Шубников А. В. Симметрия и антисимметрия конечных фигур. Изд. АН СССР, 1951.
17. Шубников А. В. О симметрии векторов и тензоров, Изв. АН СССР, сер. физ., 1949, т. XIII, № 3, стр. 347—375.
18. Сиротин Ю. И. Групповые тензорные пространства. Кристаллография, 1960, т. 5, вып. 2, стр. 171—179.
19. Сиротин Ю. И. Построение тензоров заданной симметрии. Кристаллография, 1961, т. VI, вып. 3, стр. 331—340.
20. Копчик В. А. Полиморфные фазовые переходы и симметрия кристаллов. Кристаллография, 1960, т. 5, вып. 6, стр. 932—943.
21. Spencer A. J. M., Rivlin R. S. The theory of matrix polynomials and its application to the mechanics of isotropic continua. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 1959, vol 2, № 4, p.p. 309—336.
22. Spencer A. J. M., Rivlin R. S. Finite integrity bases for five or fewer symmetric  $3 \times 3$  matrices. Arch. Rat'l Mech. Anal., 1959, vol. 2, № 5, p.p. 435—446.
23. Spencer A. J. M., Rivlin R. S. Further results in the theory of matrix polynomials. Arch. Rat'l Mech. Anal., 1960, vol. 4, № 3, p.p. 214—230.
24. Spencer A. J. M., Rivlin R. S. Isotropic Integrity Bases for Vectors and Second-Order Tensors. Part I, Arch. Rat'l Mech. Anal., 1962, vol. 9, № 1, p.p. 45—63.
25. Spencer A. J. M. The Invariants of Six Symmetrix  $3 \times 3$  Matrices. Arch. Rat'l Mech. Anal., 1961, vol. 7, № 1, p.p. 64—77.
26. Седов Л. И. Введение в механику сплошной среды. Физматгиз, 1962.
27. Лохин В. В. Система определяющих параметров, характеризующих геометрические свойства анизотропной среды. Докл. АН СССР, 1963, т. 149, № 2, стр. 295—297.
28. Лохин В. В. Общие формы связи между тензорными полями в анизотропной сплошной среде, свойства которой описываются векторами, тензорами второго ранга и антисимметричными тензорами третьего ранга. Докл. АН СССР, 1963, т. 149, № 6, стр. 1282—1285.
29. Седов Л. И., Лохин В. В. Описание с помощью тензоров точечных групп симметрии. Докл. АН СССР, 1963, т. 149, № 4, стр. 796—797.
30. Любарский Г. Я. Теория групп и ее применение в физике, Гостехиздат, М., 1957.
31. Ращевский П. К. Риманова геометрия и тензорный анализ, Гос. изд-во техн. теорет. лит-ры, М., 1953.