

УДК 548.55

## ПОГЛОЩАЮЩИЕ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ КРИСТАЛЛЫ МОНОКЛИННОГО КЛАССА 2

**А.Ф. Константинова, Т.Г. Головина,  
Е.А. Евдищенко, Б.В. Набатов, К.К. Константинов**

*Институт кристаллографии им. В.А. Шубникова РАН, Москва, Россия*

## MONOCLINIC OPTICALLY ACTIVE ABSORBING CRYSTALS OF CLASS 2

**A.F. Konstantinova, T.G. Golovina,  
E.A. Evdischenko, B.V. Nabatov, K.K. Konstantinov**

*A.V. Shubnikov Institute of Crystallography, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

В статье содержится описание исследований, основанных на научных идеях и результатах академика Б.В. Бокутя, полученных с использованием ковариантных методов Ф.И. Федорова. Представлены результаты изучения моноклиных оптически активных поглощающих кристаллов класса 2. Проведено сравнение с ромбическими кристаллами класса 222. Последовательно рассмотрены особенности поляризации собственных волн в кристаллах вблизи оптических осей – в прозрачных оптически активных, поглощающих, в оптически активных и поглощающих кристаллах. Для этих же случаев приведены зависимости азимута поляризации света, прошедшего через пластинку при нормальном падении. В моноклиных кристаллах рассмотрено два случая, когда при отсутствии поглощения ось симметрии второго порядка (2) лежит в одной плоскости с оптическими осями и ось 2 перпендикулярна оптическим осям. Основные особенности заметны в случае, когда ось 2 перпендикулярна оптическим осям.

**Ключевые слова:** ковариантные методы, прозрачные и поглощающие кристаллы, двуосные кристаллы, моноклинные кристаллы класса 2, гиротропия, азимут поляризации, тензор гирации, собственные волны.

The article contains results of the research based on the scientific ideas and results of academician B.V. Bokut which were obtained using covariant methods of F.I. Fedorov. Results of the study of monoclinic optically active absorbing crystals of class 2 are presented. Comparison with rhombic crystals of class 222 is made. Peculiarities of polarization of eigenwaves near optical axes in crystals such as transparent optically active, absorbing, optically active and absorbing are consecutively considered. Dependencies of the azimuth of polarization of transmitted light with the incidence angle equal to zero are presented for these cases. Two cases for monoclinic crystals are considered. The first case is when there is absorption and symmetric axis number 2 lies in the same plane as optical axes and the second case is when axis number 2 is perpendicular to the optical axes. The main peculiarities are noticed when axis number 2 is perpendicular to the optical axes.

**Keywords:** covariant methods, transparent and absorbing crystals, biaxial crystals, monoclinic crystals of class 2, gyrotropy, azimuth of polarization, gyration tensor, eigen wave.

### **Введение**

После лекций о ковариантных методах, прочитанных Ф.И. Фёдоровым на физическом факультете МГУ им. М.В. Ломоносова [1], многие исследователи стали применять их для решения задач кристаллооптики. В результате появились работы, выполненные в сотрудничестве не только с Ф.И. Фёдоровым, но и с его учениками – в первую очередь с его аспирантом Б.В. Бокутем. После совместно выполненной с Б.В. Бокутем работы [2] по исследованию поглощающих оптически активных (гиротропных) кристаллов началось систематическое экспериментальное и теоретическое изучение таких кристаллов; подробный обзор работ Ф.И. Фёдорова и его учеников по этой проблеме содержится в [3]. Наши исследования, совместно выполненные с Б.В. Бокутем, завершились написанием книги [4], изданной в Беларуси.

Тем не менее, в большинстве экспериментальных и теоретических работ исследовались свойства одноосных кристаллов и были

предложены методы определения показателей преломления и поглощения, а также параметров гирации [5]. Что касается двуосных кристаллов, то проводились только исследования кристаллов ромбической сингонии аксиального класса 222 [6], [7]. Б.В. Бокуть много внимания уделял исследованию оптически активных кристаллов – свойства именно таких кристаллов были изучены в его докторской диссертации [8]. Нам показалось интересным рассмотреть более сложный случай – когда кристалл относится не к ромбической, а к моноклиной сингонии (класса 2) и является одновременно поглощающим и оптически активным. Настоящая обзорная статья написана на основе результатов исследования именно таких кристаллов, которое было непросто.

Прежде чем описать свойства кристаллов класса 2, сначала сделаем обзор результатов исследования прозрачных активных кристаллов этого класса, затем – результатов изучения поглощающих неактивных кристаллов, и только после этого рассмотрим распространение

световой волны через моноклинные поглощающие оптически активные кристаллы.

Помимо ковариантного метода при расчетах будем использовать также метод Берремана, описанный нами в [9].

Известно, что в двуосных кристаллах главные показатели преломления обозначаются  $N_g$  – наибольший,  $N_m$  – средний,  $N_p$  – наименьший.

Расчеты для моноклинного кристалла проведены для двух случаев: I – направление, соответствующее наибольшему значению показателя преломления  $N_g$ , параллельно оси симметрии 2; II – направление, соответствующее  $N_g$ , ортогонально оси 2 [8].

### 1 Прозрачный гиротропный кристалл класса 2

В моноклинных прозрачных гиротропных кристаллах класса 2 направление одной из главных осей тензоров  $\varepsilon$  и  $\alpha$  совпадает с осью симметрии второго порядка (осью 2). Направления двух других главных осей тензоров  $\varepsilon$  и  $\alpha$  в общем случае по-разному ориентированы в плоскости, перпендикулярной оси 2 [10].

В случае I ось Z параллельна оси 2, тензоры  $\varepsilon$  и  $\alpha$  записываются в виде [10]

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

После поворота кристалла вокруг оси Z на угол

$$\varphi_0 = \arctg(2\varepsilon_{12}/(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}))/2$$

тензор  $\varepsilon$  принимает диагональный вид, т. к. все его главные направления теперь совпадают с направлениями осей X, Y, Z. После поворота на угол  $\varphi_0$  тензора  $\alpha$  его компоненты изменятся, но вид останется тем же, что и в (1.1).

В случае II ось Y параллельна оси 2,  $\varepsilon$  и  $\alpha$  имеют вид

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & \varepsilon_{13} \\ 0 & \varepsilon_{22} & 0 \\ \varepsilon_{31} & 0 & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & \alpha_{13} \\ 0 & \alpha_{22} & 0 \\ \alpha_{31} & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

После поворота кристалла вокруг оси Y на угол

$$\theta_0 = \arctg(2\varepsilon_{13}/(\varepsilon_{11} - \varepsilon_{33}))/2$$

тензор  $\varepsilon$  принимает диагональный вид, т. к. теперь все его главные направления совпадают с направлениями осей X, Y, Z. После поворота на угол  $\theta_0$  тензора  $\alpha$  его компоненты изменятся, но вид останется тем же, что и в (1.3).

Рассмотрим теперь, как изменяется эллиптичность собственных волн вблизи оптических осей кристалла класса 2. Определим также, как изменяется азимут поляризации прошедшего света  $\chi_i$  в зависимости от ориентации оптических осей кристалла относительно нормали к поверхности.

При прохождении световой волны вдоль оптической оси рассматриваемой кристаллической пластинки толщины  $d$  имеет место вращение плоскости поляризации, т. е. изменение азимута прошедшей волны при сохранении ее эллиптичности. Угол поворота плоскости поляризации  $\chi_{\max} = \rho d$  ( $\rho$ , (град/мм) – удельное вращение вдоль оптической оси кристалла), при этом

$$\rho d = \chi_{\max} = \pi G d / (\lambda \bar{n}), \quad (1.3)$$

$$G = [(\alpha_c - \tilde{\alpha}) \mathbf{m}] \mathbf{n}, \quad (1.4)$$

где  $G$  – скалярный параметр гирации [8],  $\bar{n} = (n_1 + n_2 + n_3)/3$ ,  $n_1, n_2, n_3$  – главные значения показателей преломления кристалла,  $\lambda$  – длина волны излучения,  $\mathbf{m} = \bar{n} \mathbf{n}$  – вектор рефракции,  $\mathbf{n}$  – единичный вектор волновой нормали,  $\tilde{\alpha}$  – транспонированный тензор  $\alpha$ ,  $\alpha_c$  – след тензора  $\alpha$ .

Приближённо можно записать:

$$G = \bar{n}[(\alpha_{22} + \alpha_{33}) \cdot \theta_1^2 + (\alpha_{11} + \alpha_{33}) \cdot \theta_2^2 + (\alpha_{11} + \alpha_{22}) \cdot \theta_3^2 - (\alpha_{12} + \alpha_{21}) \cdot \theta_1 \cdot \theta_2], \quad (1.5)$$

где  $\theta_1 = \mathbf{n} \mathbf{c}_1$ ,  $\theta_2 = \mathbf{n} \mathbf{c}_2$ ,  $\theta_3 = \mathbf{n} \mathbf{c}_3$ ,  $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3$  – орты координатных осей.

Рассмотрим две частные ориентации главных осей оптической индикатрисы относительно оси 2 кристалла.

**Случай I.** Главные значения тензора  $\varepsilon$  удовлетворяют условию  $\varepsilon_{11} < \varepsilon_{22} < \varepsilon_{33}$ , т.е. орты  $\mathbf{c}_1$  и  $\mathbf{c}_2$  его оптических осей лежат в плоскости XZ:

$$\mathbf{c}_1 = \{-\sin V, 0, \cos V\}, \quad \mathbf{c}_2 = \{\sin V, 0, \cos V\}, \quad (1.6)$$

где  $V = \arctg \sqrt{\frac{\varepsilon_{33}(\varepsilon_{22} - \varepsilon_{11})}{\varepsilon_{11}(\varepsilon_{33} - \varepsilon_{22})}}$  – угол между оптической осью кристалла и осью Z.

При ориентации оптических осей, определённой в (1.6), скалярный параметр гирации (1.5) принимает вид:

$$G = \bar{n}[(\alpha_{22} + \alpha_{33}) \sin^2 V + (\alpha_{11} + \alpha_{22}) \cos^2 V], \quad (1.7)$$

одинаковый для волн, распространяющихся вдоль оптических осей (рисунок 1, а).

**Случай II.** Главные значения тензора  $\varepsilon$  удовлетворяют условию  $\varepsilon_{11} < \varepsilon_{22} < \varepsilon_{33}$ , и направление, соответствующее наибольшему значению показателя преломления  $N_g$ , ортогонально направлению оси 2 кристалла.

В этом случае тензоры  $\varepsilon$  и  $\alpha$  имеют вид (1.2). Тензор гирации имеет вид:

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & \alpha_{13} \\ 0 & \alpha_{22} & 0 \\ \alpha_{31} & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

$$\mathbf{c}_1 = \{-\sin V, 0, \cos V\}, \quad \mathbf{c}_2 = \{\sin V, 0, \cos V\}.$$

В этом случае удельное вращение плоскости поляризации при распространении излучения вдоль разных оптических осей разное:

$$\rho_1 = \pi G_1 / (\lambda \bar{n}),$$

$$G_1 = [(\alpha_{22} + \alpha_{33}) \sin^2 V + (\alpha_{11} + \alpha_{22}) \cos^2 V + (\alpha_{13} + \alpha_{31}) \sin V \cos V] \bar{n},$$

$$\rho_2 = \pi G_2 / (\lambda \bar{n}),$$

$$G_2 = [(\alpha_{22} + \alpha_{33}) \sin^2 V + (\alpha_{11} + \alpha_{22}) \cos^2 V - (\alpha_{13} + \alpha_{31}) \sin V \cos V] \bar{n}. \quad (1.9)$$

Следовательно, могут быть разными и эллиптичности  $k_1, k_2$  собственных волн, и азимут

поляризации  $\chi_i$  света, прошедшего вдоль двух разных оптических осей (рисунок 2.1, а – 2.4, а).

В случае I из (1.7) и рисунков 1.1, а – 1.3, а видно, что для прозрачных гиротропных кристаллов класса 2 характер изменения эллиптичностей обеих собственных волн в окрестности оптических осей одинаков, вдоль каждой из осей эллиптичности равны  $k_{1,2} = \pm 1$ . Видно также, что в этом случае максимумы азимута поляризации прошедшего света  $\chi_{\max}$  одинаковы (рисунок 1.4, а).

**Моноклинный кристалл класса 2 (случай I)**

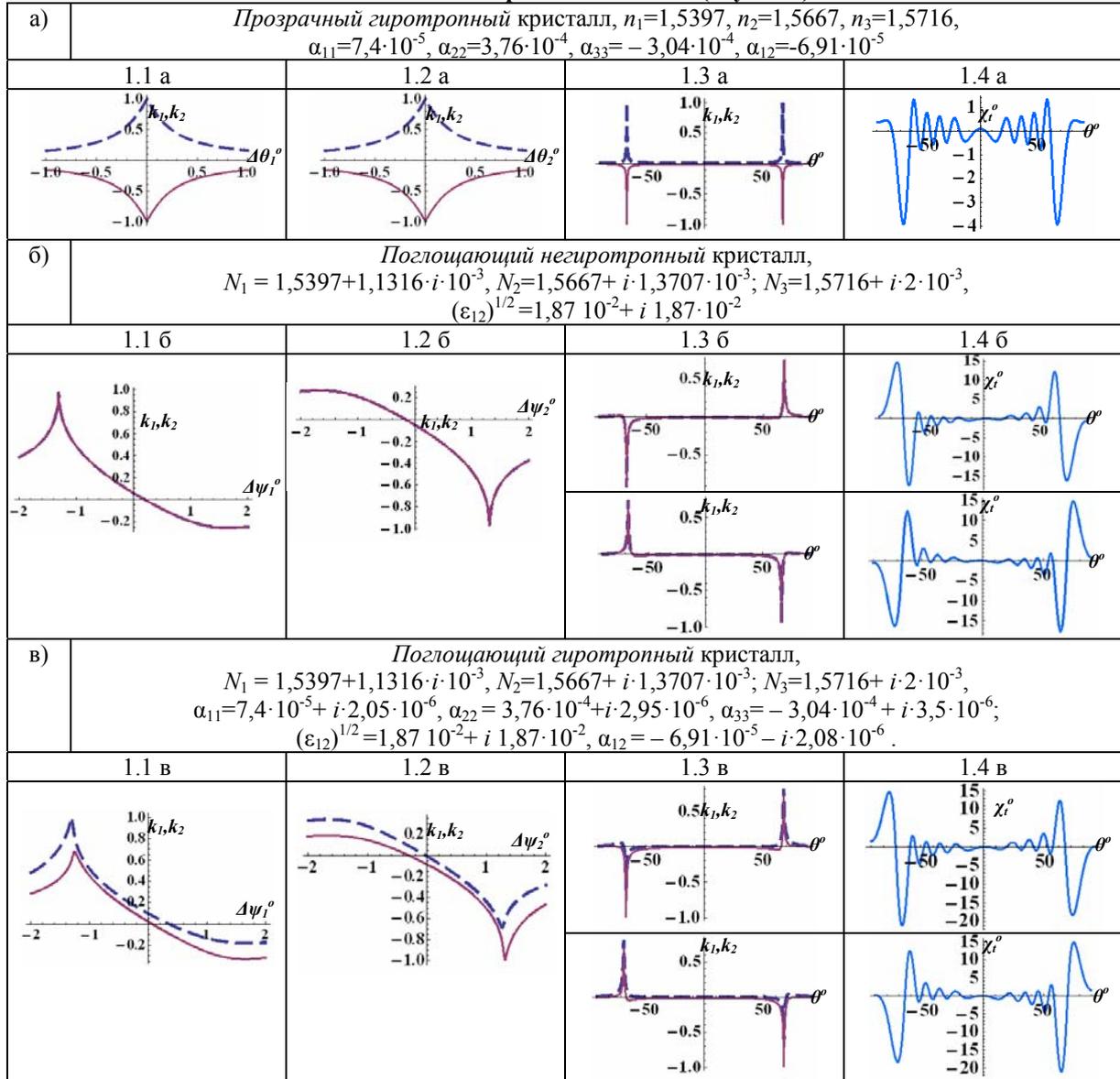


Рисунок 1 – Зависимости эллиптичностей  $k_1, k_2$  собственных волн от угла  $\Delta\theta$  вблизи каждой из оптических осей (положение оптической оси – вертикаль), и для двух оптических осей – зависимости  $k_1, k_2$  и азимута поляризации излучения, прошедшего пластинку из моноклинного кристалла класса 2, (случай I) от  $\theta$

а – прозрачный гиротропный кристалл; б – поглощающий негиротропный кристалл;

в – поглощающий гиротропный кристалл;

— — правая собственная волна; - - - - левая собственная волна.

Подробности смотри в тексте.

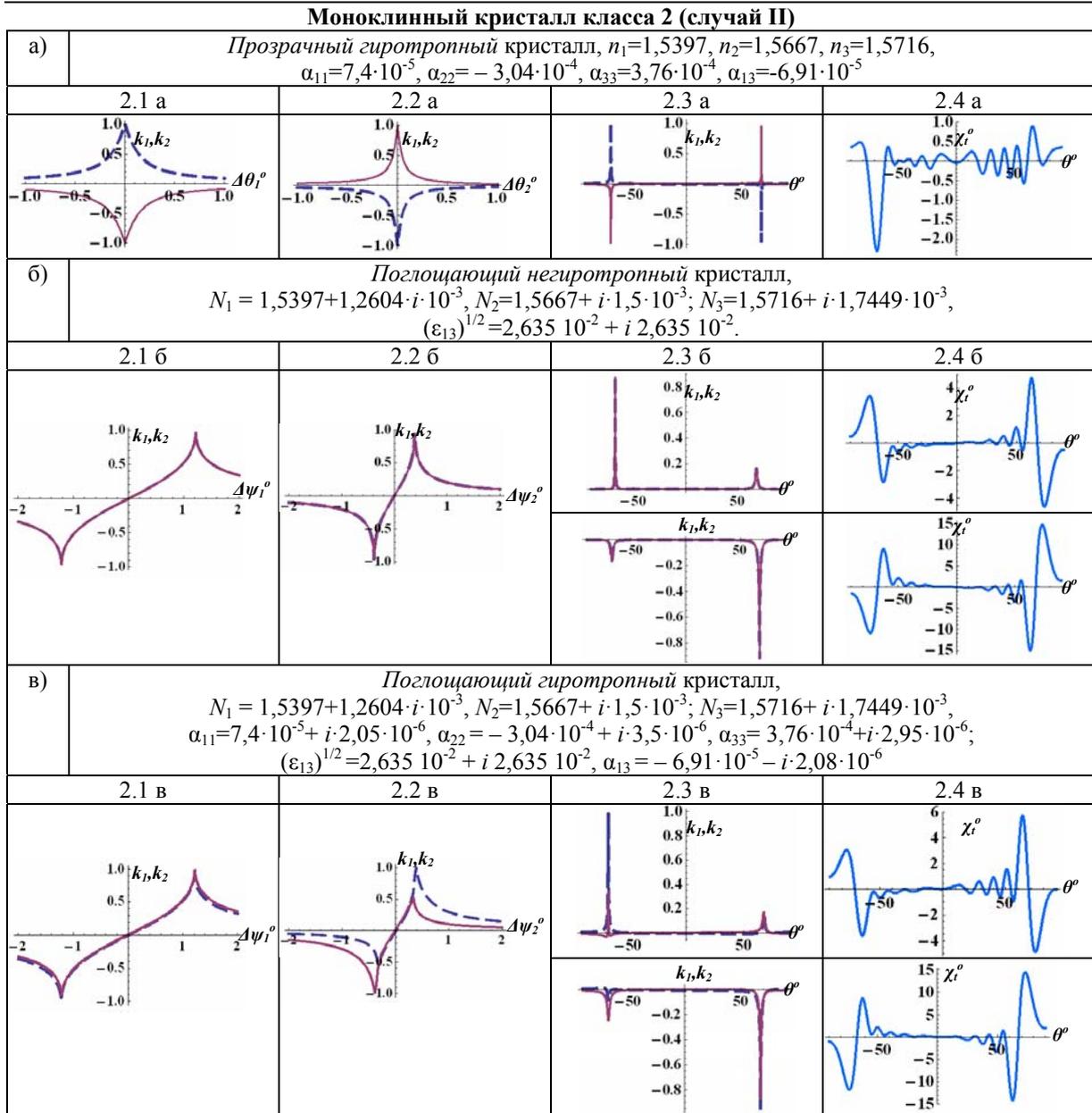


Рисунок 2 – Зависимости эллиптичностей  $k_1, k_2$  собственных волн от угла  $\Delta\theta$  вблизи каждой из оптических осей (положение оптической оси – вертикаль), и для двух оптических осей – зависимости  $k_1, k_2$  и азимута поляризации излучения, прошедшего пластинку из моноклинного кристалла класса 2, (случай II) от  $\theta$ .

а – прозрачный гиротропный кристалл; б – поглощающий негиротропный кристалл;

в – поглощающий гиротропный кристалл;

— — правая собственная волна; - - - - левая собственная волна.

Подробности смотри в тексте.

В случае II из (1.9) и рисунков 2.1, а – 2.3, а видно, что для прозрачных гиротропных кристаллов эллиптичность собственных волн по-разному изменяется в окрестности разных оптических осей. Максимумы азимута  $\chi_{\max}$  прошедшего света имеют разные значения (рисунок 2.4, а) при распространении вдоль разных оптических осей и могут иметь одинаковые или разные знаки в зависимости от знаков компонент  $\alpha$ .

## 2 Поглощающий кристалл класса 2

Рассмотрим теперь зависимости тех же величин для поглощающего кристалла. Тензор диэлектрической проницаемости такого кристалла имеет действительную и мнимую части [1]:

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & 0 \\ \epsilon_{12} & \epsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{pmatrix}, \quad \epsilon_{ik} = \epsilon'_{ik} + i \cdot \epsilon''_{ik}. \quad (2.1)$$

Обратный тензор  $\varepsilon^{-1}$  можно записать в ковариантном виде [1]:

$$\varepsilon^{-1} = a + b(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}'' + \mathbf{c}'' \cdot \mathbf{c}'), \quad (2.2)$$

где  $\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}''$  – диада [11].

Направляющие вектора оптических осей  $\mathbf{n}_{\pm}$  определяются в соответствии с формулой

$$\mathbf{n}_{\pm} = \frac{\sqrt{(\mathbf{c}^*)^2 \mathbf{c} + \sqrt{\mathbf{c}^2 \mathbf{c}^* \pm i \cdot [\mathbf{c} \mathbf{c}^*]}}}{|\mathbf{c}'|^2 + |\mathbf{c}''|^2}, \quad (2.3)$$

где  $\mathbf{c} = \mathbf{c}'$  или  $\mathbf{c} = \mathbf{c}''$ .

Обсудим общий случай, когда имеются четыре круговые оси. Те ситуации, когда  $\mathbf{c}'^2 = 0$  или  $\mathbf{c}''^2 = 0$ , здесь рассматривать не будем.

Обозначим  $\varepsilon^{-1} = \beta$  и запишем

$$\begin{aligned} a &= \beta_{33}, \quad \mathbf{c}' = \{c'_1, c'_2, 0\}, \quad \mathbf{c}'' = \{c''_1, c''_2, 0\}; \\ \beta_{12} &= b(c'_1 c''_2 + c''_1 c'_2), \quad \beta_{11} - \beta_{33} = 2bc'_1 c''_1, \\ \beta_{22} - \beta_{33} &= 2bc'_2 c''_2, \quad \mathbf{c}'^2 = 1, \quad \mathbf{c}''^2 = 1. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Из системы уравнений (2.4) найдём  $\mathbf{c}'$  и  $\mathbf{c}''$  (можно использовать любое из получаемых решений).

Расчёты были проведены для тех же случаев I и II ( $N_g \parallel$  оси 2 и  $N_g \perp$  оси 2, соответственно), что и для оптически активных кристаллов. Результаты расчетов проиллюстрированы на рисунках 1, б и 2, б.

Как и следует из результатов, полученных в [1], [9], [12], каждая из оптических осей, характерных для непоглощающего кристалла, в поглощающем кристалле распадается на две, при этом углы между компонентами расщепления каждой из исходных осей (углы между «новыми» осями) разные, и расположены «новые» оси несимметрично относительно плоскости, содержащей исходные оси. В обоих рассматриваемых случаях эллиптичности двух собственных волн совпадают и в направлении осей близки к  $\pm 1$  (рисунки 1.1, б; 1.2, б и 2.1, б; 2.2, б). На рисунках 1.1, б и 1.2, б для поглощающих кристаллов виден выход только одной из оптических осей. На верхних и нижних рисунках 1.3, б и 1.4, б показаны изменения эллиптичностей собственных волн и азимута поляризации прошедшего света в двух плоскостях, каждая из которых отклонена от плоскости оптических осей прозрачного кристалла так, что полностью содержит одну из оптических осей поглощающего кристалла, «отошедшую» от одной из осей прозрачного кристалла. Эллиптичность собственной волны для нее равна 1. При этом в каждой плоскости видна проекция другой оптической оси.

### 3 Поглощающий гиротропный кристалл класса 2

Рассмотрим кристалл класса 2, которому одновременно свойственны поглощение и оптическая активность.

Расчёты для поглощающего гиротропного кристалла проведены для тех же частных случаев I и II (соответственно  $N_g \parallel$  оси 2 и  $N_g \perp$  оси 2), что и для оптически активных кристаллов (рисунки 1, в и 2, в). Расположение осей аналогично тому, которое свойственно поглощающим кристаллам.

На рисунках 1.1, в, 1.2, в и 2.1, в, 2.2, в, хорошо видно, что при наличии оптической активности вдоль каждой из оптических осей поглощающего кристалла распространяется уже две волны. В отличие от ситуации, реализуемой для прозрачного оптически активного кристалла, эллиптичности волн, распространяющихся вдоль разных осей, различны. В силу этих обстоятельств, как и следовало ожидать, азимуты поляризации волн, распространяющихся вдоль каждой из оптических осей различны.

### 4 Ромбический кристалл класса 222

Чтобы сравнить особенности изменения эллиптичностей и азимутов поляризации прошедшего света вблизи оптических осей в кристаллах аксиальных классов, приведём теперь на рисунке 3 соответствующие зависимости для ромбических кристаллов класса 222 [7], [8]. Видно, что все зависимости, характерные для этого кристалла, более симметричны, чем те, которые соответствуют кристаллам моноклинной сингонии.

### Заключение

Если оптические оси прозрачного гиротропного моноклинного кристалла класса 2 лежат в одной плоскости с осью симметрии второго порядка, эллиптичность собственных волн изменяется вблизи оптических осей так же, как и в ромбическом кристалле класса 222, и удельное вращение плоскости поляризации одинаково вдоль обеих оптических осей. В моноклинном поглощающем кристалле в указанной ситуации оптические оси расположены несимметрично относительно плоскости оптических осей прозрачного кристалла.

Если оптические оси прозрачного гиротропного моноклинного кристалла класса 2 перпендикулярны оси симметрии второго порядка, эллиптичность собственных волн изменяется вдоль разных оптических осей неодинаково, и удельное вращение плоскости поляризации вдоль разных осей различно. Величина этого различия зависит от параметров гирации кристалла. Оптические оси моноклинного поглощающего кристалла при указанных условиях отклоняются на разные углы от плоскости оптических осей прозрачного кристалла, оставаясь симметричными относительно этой плоскости.

В гиротропном поглощающем моноклинном кристалле оптические оси расположены так же, как и в поглощающем кристалле такой же сингонии.

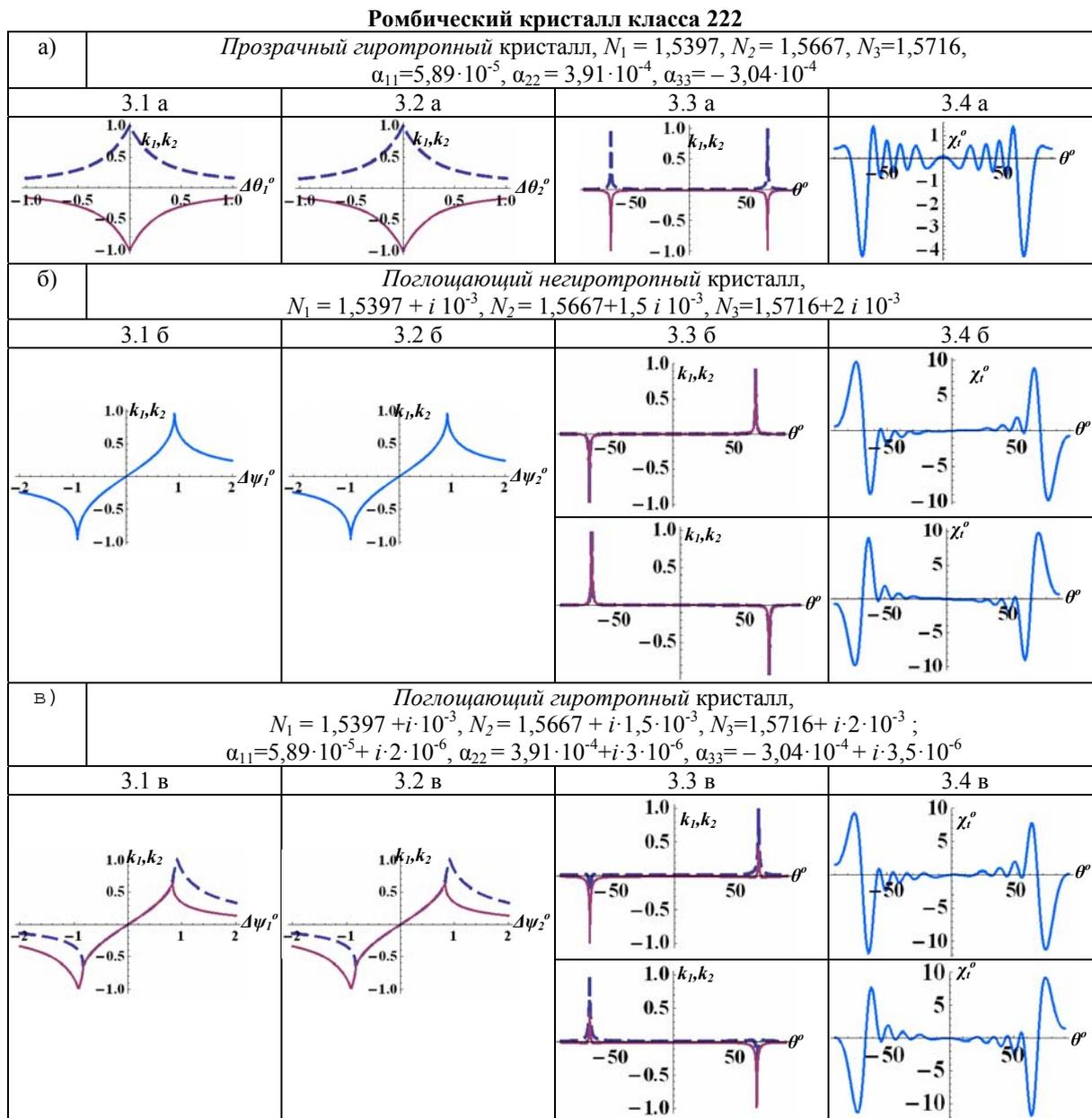


Рисунок 3 – Зависимости эллиптичностей  $k_1, k_2$  собственных волн от угла  $\Delta\theta$  вблизи каждой из оптических осей (положение оптической оси – вертикаль), и для двух оптических осей – зависимости  $k_1, k_2$  и азимута поляризации излучения, прошедшего пластинку из ромбического кристалла класса 222, от  $\theta$ .

а – прозрачный гиротропный кристалл; б – поглощающий негиротропный кристалл;

в – поглощающий гиротропный кристалл;

— — правая собственная волна; - - - - левая собственная волна.

Подробности смотри в тексте.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Фёдоров, Ф.И. Оптика анизотропных сред / Ф.И. Фёдоров. – Минск : Изд-во АН БССР, 1958. – 380 с.

2. Особенности проявления оптической активности в поглощающих кристаллах / А.Ф. Константинова [и др.] // Кристаллография. – 1976. – Т. 21, № 6. – С. 1108–1112.

3. Константинова, А.Ф. Развитие исследований оптической активности кристаллов в Институте кристаллографии РАН / А.Ф. Константинова // Проблемы физики, математики и техники. – 2011. – № 2 (7). – С. 75–89.

4. Оптические свойства кристаллов / А.Ф. Константинова [и др.] – Минск : Наука и техника, 1995. – 304 с.

5. Калдыбаев, К.А. Гиротропия одноосных поглощающих кристаллов / К.А. Калдыбаев, А.Ф. Константинова, З.Б. Перекалина. – М. : Изд-во «Институт социально-экономических и производственно-экологических проблем инвестирования», 2000. – 294 с.

6. Окорочков, А.И. Собственные волны в гиротропных поглощающих кристаллах ромбической сингонии / А.И. Окорочков, А.Ф. Константинова // Кристаллография. – 1984. – Т. 29, № 5. – С. 841–848.

7. Особенности распространения света в оптически активных поглощающих кристаллах ромбической сингонии / А.Ф. Константинова [и др.] // Кристаллография. – 2011. – Т. 56, № 3. – С. 412–417.

8. Бокуть, Б.В. Электромагнитные волны в оптически активных и нелинейных кристаллах :

дис. ... д-ра физ.-мат. наук / Б.В. Бокуть. – Минск, 1972. – 270 л.

9. Использование современных математических пакетов для точного решения задач о распространении света в анизотропных слоистых средах. II. Оптически активные кристаллы / А.Ф. Константинова [и др.] // Кристаллография. – 2002. – Т. 47, № 5. – С. 879–887.

10. Федоров, Ф.И. Теория гиротропии. – Минск : Наука и техника, 1976. – 456 с.

11. Кочин, Н.Е. Векторное исчисление и начала тензорного исчисления. – М. : Наука, 1965. – 428 с.

12. Гончаренко, А.М. Исследование оптических свойств поглощающих кристаллов на основе инвариантного метода : дис. ... канд. физ.-мат. наук / А.М. Гончаренко. – Минск, 1960. – 159 л.

*Поступила в редакцию 28.10.11.*