

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И ФОТОНИКА» РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»

ИНСТИТУТ КРИСТАЛЛОГРАФИИ ИМ. А.В. ШУБНИКОВА РАН

На правах рукописи

УДК 548.55, 548.736

Головина Татьяна Геннадиевна

**ОСОБЕННОСТИ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
ПОГЛОЩАЮЩИХ И ГИРОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛОВ**

Специальность 01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2017

Работа выполнена в Институте кристаллографии им. А.В.Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

Научный руководитель:

Константинова Алиса Федоровна
доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник
лаборатории кристаллооптики ФНИЦ
«Кристаллография и фотоника» РАН

Официальные оппоненты:

Горелик Владимир Семенович, доктор физико-математических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации, заведующий лабораторией комбинационного рассеяния света Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института имени П.Н. Лебедева Российской академии наук.

Глушкова Татьяна Михайловна, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник кафедры общей физики физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Ведущая организация:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)».

Защита диссертации состоится «___» _____ 2017 г. в ___ ч. ___ мин. на заседании диссертационного совета Д 002.114.01 при ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН по адресу: 119333, г. Москва, Ленинский пр. 59, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН <http://crys.ras.ru/>.

Автореферат разослан: «___» _____ 2017 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 002.114.01
кандидат физико-математических наук

К.В. Фролов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Оптическая активность (гиротропия) занимает особое место среди физических свойств веществ и как теоретическое, так и экспериментальное исследование особенностей распространения света в гиروتропных кристаллах представляет большой интерес.

Определение вклада гиروتропии в характеристики отраженного и прошедшего света, особенно при косом срезе пластинки и наклонном падении световой волны, необходимо при экспериментальных исследованиях оптических свойств. При этом проявление оптической активности не изучено полностью даже для одноосных кристаллов. Еще более сложным является изучение низкосимметричных кристаллов, обладающих и оптической активностью, и поглощением. В таких кристаллах возможно разное расположение оптических осей, и оптическая активность при этом проявляется по-разному. Правильный учет вклада оптической активности необходим, например, для создания многослойных тонкопленочных структур с контролируемой оптической активностью, для конструирования метаматериалов, при изучении фазовых переходов и во многих других случаях. Кроме того, многие выводы, полученные при изучении гиروتропии кристаллов, могут оказаться применимыми и при исследовании всех других гиروتропных объектов, в том числе биологических структур.

Настоящую работу можно разделить на две части. Первая часть посвящена еще нерешенным теоретическим вопросам, связанным с оптически активными кристаллами. Вторая часть посвящена изучению конкретных кристаллов, в частности оценке величины оптической активности из структурных данных.

Одним из теоретических вопросов является различие в проявлении оптической активности в примитивных, аксиальных и планальных одноосных кристаллах, связанное с наличием антисимметричной части тензора гирации. Различие между проявлением оптической активности в примитивных кристаллах, для которых тензор гирации имеет и симметричную, и антисимметричную части, и в аксиальных кристаллах, для которых тензор гирации симметричен, нигде не рассматривалось. При этом при наклонном падении света антисимметричная часть тензора гирации оказывает влияние на характеристики отраженного и прошедшего света, поэтому ее необходимо учитывать для правильной оценки указанных характеристик.

В гиروتропных одноосных кристаллах инверсионно-примитивного и инверсионно-планального классов вследствие необычного вида тензора гирации оптическая активность также проявляется необычно. Такие кристаллы имеют интересное свойство – азимуты поляризации и эллиптичности отраженного и прошедшего света, рассчитанные при положительных и отрицательных углах падения, в общем случае различны.

Для того чтобы исследовать распространение света через оптически активные поглощающие низкосимметричные кристаллы, необходимо сначала рассмотреть его особенности, связанные только с поглощением. В частности,

необходимо знать количество и расположение оптических осей. Обычно в поглощающем низкосимметричном кристалле существуют четыре оптические оси, но при определенных условиях может быть другое число оптических осей. Так как показатели преломления и коэффициенты поглощения кристалла меняются в зависимости от различных параметров и внешних воздействий, можно предположить, что материалы с такими нестандартными характеристиками могут существовать или могут быть специально созданы, поэтому представляет интерес изучение особенностей их оптических свойств.

В прозрачных двуосных кристаллах классов 2 , m , $mm2$ оптическая активность проявляется по-разному в зависимости от расположения плоскости оптических осей, и этим они отличаются от ромбических кристаллов класса 222 . Если кристалл поглощающий, в общем случае каждая оптическая ось «расщепляется» на две, при этом оптические оси расположены вблизи той плоскости, в которой находились оптические оси прозрачного кристалла. Различие в проявлении оптической активности в поглощающих низкосимметричных кристаллах, связанное с разными случаями расположения оптических осей, подробно до сих пор не рассматривалось; при этом учет имеющихся особенностей необходим для правильного определения оптических характеристик отраженного и прошедшего через кристалл света.

Вторая часть работы посвящена изучению оптической активности конкретных кристаллов. В настоящее время большое внимание уделяется соотношению между структурой и физическими свойствами кристаллов. Особенно интересен вопрос оценки оптических свойств из структурных данных для групп кристаллов, имеющих сходную структуру. Такими кристаллами являются кристаллы семейства лангасита (класс 32). Неослабевающий интерес к кристаллам семейства лангасита вызван присущим им уникальным набором физических свойств. В настоящее время синтезировано более 200 соединений семейства лангасита, часть из них выращена в виде монокристаллов. Поскольку структуры этих кристаллов имеют одинаковую симметрию и сходные особенности строения, можно провести оценку их оптических свойств, в том числе величины оптической активности, исходя из знания состава и структуры кристаллов.

Таким образом, несмотря на то, что в настоящее время существует много работ, посвященных теоретическим и экспериментальным исследованиям оптически активных кристаллов, изучение таких кристаллов до сих пор является актуальным.

Цели и задачи работы

Цели работы:

Целью работы является изучение особенностей оптических свойств различных оптически активных и поглощающих кристаллов:

1. Анализ влияния вида тензора гирации с учетом его симметричной и антисимметричной частей на параметры поляризации отраженного и прошедшего света при наклонном падении для одноосных кристаллов различных классов симметрии.

2. Изучение особых случаев поглощающих низкосимметричных кристаллов, имеющих меньше четырех оптических осей. Расчет параметров поляризации собственных волн и прошедшего света для таких кристаллов.
3. Изучение различия в проявлении оптической активности в прозрачных и поглощающих низкосимметричных кристаллах разных классов симметрии.
4. Поиск возможностей оценки показателей преломления и величины оптического вращения из структурных данных для кристаллов семейства лангасита.
5. Оценка показателей преломления и величины оптического вращения из структурных данных для прозрачного двуосного кристалла α - HfO_3 .

В работе решались следующие задачи:

1. Получение и анализ аналитических выражений с учетом симметричной и антисимметричной частей тензора гирации для параметров поляризации отраженного и прошедшего света при наклонном падении в различных одноосных кристаллах.
2. Получение аналитических выражений для компонент тензора гирации для поглощающих низкосимметричных кристаллов с разным числом оптических осей. Расчет параметров поляризации собственных волн в таких кристаллах, а также параметров поляризации света, прошедшего через кристалл.
3. Изучение различия в проявлении оптической активности в прозрачных и поглощающих низкосимметричных кристаллах для двух типов ориентации оптических осей относительно элементов симметрии кристалла.
4. Оценка показателей преломления и удельного вращения плоскости поляризации света для кристаллов семейства лангасита на основе структурных данных и состава кристаллов.
5. Расчет величин показателей преломления и удельного вращения плоскости поляризации света из структурных данных для кристалла α - HfO_3 .

Научная новизна

1. Впервые рассмотрено влияние учета антисимметричной части тензора гирации на параметры поляризации отраженного и прошедшего света в оптически активных одноосных кристаллах классов 3 , 4 , 6 , 32 , 422 , 622 , $3m$, $4mm$, $6mm$.
2. Показано, что в кристаллах классов $\bar{4}$ и $\bar{4}2m$ при наклонном падении света азимуты поляризации и эллиптичности отраженного и прошедшего света в общем случае отличаются при положительных и отрицательных углах падения.
3. Получены аналитические выражения для компонент комплексного тензора диэлектрической проницаемости для низкосимметричных поглощающих кристаллов с разным количеством оптических осей. Изучена поляризация собственных волн в таких кристаллах, получены аналитические выражения для эллиптичностей собственных волн.
4. Рассмотрено различие в проявлении оптической активности в прозрачных и поглощающих двуосных кристаллах с разной ориентацией оптических осей относительно элементов симметрии кристалла.
5. Предложен метод прогноза величин показателей преломления и удельного вращения плоскости поляризации света в кристаллах семейства лангасита исходя из параметров структуры.

Практическая значимость

Оптическая активность занимает особое место среди физических свойств веществ и как теоретическое, так и экспериментальное изучение особенностей распространения света в оптически активных кристаллах остается актуальным. В частности, представляет интерес вопрос о принципиальных различиях в проявлении оптической активности в кристаллах разных классов симметрии.

Низкосимметричные кристаллы, особенно поглощающие, мало изучены, хотя таких кристаллов в природе большинство, поэтому их исследование является перспективным для изучения различных оптических свойств. К тому же, так как существует много искусственных материалов, не исключено, что некоторые из них будут обладать необычными оптическими свойствами. Поэтому исследование особенностей таких кристаллов представляет интерес, а полученные результаты могут быть использованы при экспериментальных исследованиях кристаллов с любым набором оптических свойств.

Другим важным вопросом является задача расчета параметров оптической активности, исходя из знания состава и структурных данных кристалла. Проблема оценки оптических характеристик кристаллов семейства лангасита, в том числе показателей преломления и вращения плоскости поляризации света, по данным об их структуре и химическом составе представляется весьма актуальной.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. Результаты исследования влияния антисимметричной части тензора гирации на параметры поляризации отраженного и прошедшего света при наклонном падении для одноосных кристаллов классов 3 , 4 , 6 , 32 , 422 , 622 , $3m$, $4mm$, $6mm$.
2. Результаты изучения параметров поляризации отраженного и прошедшего света для оптически активных кристаллов классов $\bar{4}$ и $\bar{4}2m$ при наклонном падении. Полученные величины в общем случае отличаются при положительных и отрицательных углах падения света, и это различие обусловлено необычным видом тензора гирации.
3. Соотношения между компонентами комплексного тензора диэлектрической проницаемости для низкосимметричных поглощающих кристаллов с разным количеством и типом оптических осей. Расчет эллиптичностей собственных волн в таких кристаллах.
4. Различие в проявлении оптической активности в прозрачных и поглощающих низкосимметричных кристаллах для двух случаев ориентации оптических осей относительно элементов симметрии кристалла.
5. Оценка показателей преломления и удельного вращения плоскости поляризации света в некоторых кристаллах семейства лангасита на основе структурных данных.

Личный вклад автора

Диссертационная работа является результатом работы автора в Институте кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. Используемые в диссертации результаты получены при личном участии автора. Автором проведены все аналитические и численные расчеты, рассматриваемые в работе.

Апробация результатов работы

Основные результаты работы были доложены на Молодежных конкурсах научных работ ИК РАН в 2012, 2014 и 2015 гг., работа 2015 г. была удостоена первой премии.

По теме диссертационной работы опубликовано 13 статей в журналах "Кристаллография" и "Проблемы физики, математики и техники" (Беларусь). Результаты представлены на 15 различных конференциях.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** содержится обоснование актуальности проводимых исследований, изложены цели исследования и положения, выносимые на защиту. Отмечены новизна и практическая значимость работы, представлены сведения об апробации результатов работы.

В **главе 1** даны общие литературные данные, необходимые для рассматриваемых исследований, и представлены темы, обсуждаемые в работе. Кратко описаны используемые методы и представлен план дальнейшей работы.

В **главе 2** изучены особенности проявления оптической активности в одноосных кристаллах, связанные с разным видом тензора гирации (табл. 1) [1, 2].

Первым вопросом, рассмотренным в данной главе, является различие в проявлении оптической активности в кристаллах примитивных 3, 4, 6 (тензор гирации имеет симметричную α_{ii} и антисимметричную ($\alpha_{21} = -\alpha_{12}$) части), аксиальных 32, 422, 622 (тензор гирации симметричен) и планальных классов $3m$, $4mm$, $6mm$ (тензор гирации антисимметричен, $\alpha_{21} = -\alpha_{12}$).

Таблица 1. Вид тензора гирации α для одноосных кристаллов [1]

32, 422, 622	3, 4, 6	$3m$, $4mm$, $6mm$	$\bar{4}$, $\bar{4}2m^*$
$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ -\alpha_{12} & \alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \alpha_{12} & 0 \\ -\alpha_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & 0 \\ \alpha_{12} & -\alpha_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

*В классе $\bar{4}2m$ величина $\alpha_{12} = 0$.

Влияние антисимметричной части тензора гирации на проявление оптической активности изучалось обычно для кристаллов планальных классов, в которых оптическая активность проявляется только при наклонном падении света на кристалл [1, 3, 4]. До сих пор не рассматривалось различие между примитивными и аксиальными кристаллами, связанное с наличием в примитивных классах антисимметричной части тензора гирации, которая может оказывать заметное влияние на характеристики отраженного и прошедшего света при наклонном падении. С целью изучения этого вопроса вычислены азимуты поляризации и эллиптичности отраженного и прошедшего света для кристаллов примитивных, аксиальных и планальных классов.

Проанализируем зависимости от угла падения азимуты поляризации $\chi_{rp,rs}$ и эллиптичностей $K_{rp,rs}$ отраженного света в случае, когда оптическая ось кристалла параллельна поверхности и перпендикулярна плоскости падения света, для

толстой пластинки без учета многократных отражений. Для прозрачных кристаллов рассматриваемых классов получим, если $|n_i \sin\varphi| \leq n_{o,e}$:

$$\chi_{rp,rs} = 0, \quad K_{rp} = \frac{2n_i\eta_i[\alpha_{33}\varepsilon_o + \alpha_{11}(\varepsilon_e\eta_1 - \varepsilon_o\eta_2)/(\eta_1 - \eta_2) - \alpha_{12}(\eta_1 + \eta_2)n_i\sin\varphi]}{(\eta_1 + \eta_2)(\eta_2 + \eta_i)(\varepsilon_o\eta_i - n_i^2\eta_1)}, \quad (1)$$

$$K_{rs} = \frac{2n_i\eta_i[\alpha_{33}\varepsilon_o + \alpha_{11}(\varepsilon_e\eta_1 - \varepsilon_o\eta_2)/(\eta_1 - \eta_2) + \alpha_{12}(\eta_1 + \eta_2)n_i\sin\varphi]}{(\eta_1 + \eta_2)(\eta_2 - \eta_i)(\varepsilon_o\eta_i + n_i^2\eta_1)}, \quad (2)$$

$$\eta_{1,2} = \sqrt{\varepsilon_{o,e} - \xi^2}, \quad \xi = n_i \sin\varphi, \quad \eta_i = n_i \cos\varphi, \quad \varepsilon_o = n_o^2, \quad \varepsilon_e = n_e^2.$$

Индексы p - и s - означают p - и s -поляризацию падающей волны, n_o , n_e – главные показатели преломления кристалла, n_i – показатель преломления внешней среды, φ – угол падения света.

Из (1), (2) видно, что для кристаллов примитивных классов все компоненты тензора гирации (α_{11} , α_{33} , α_{12}) входят в выражения в первой степени и, следовательно, оказывают влияние на результат. При этом вклад α_{12} противоположен при положительных и отрицательных углах падения φ (рис. 1).

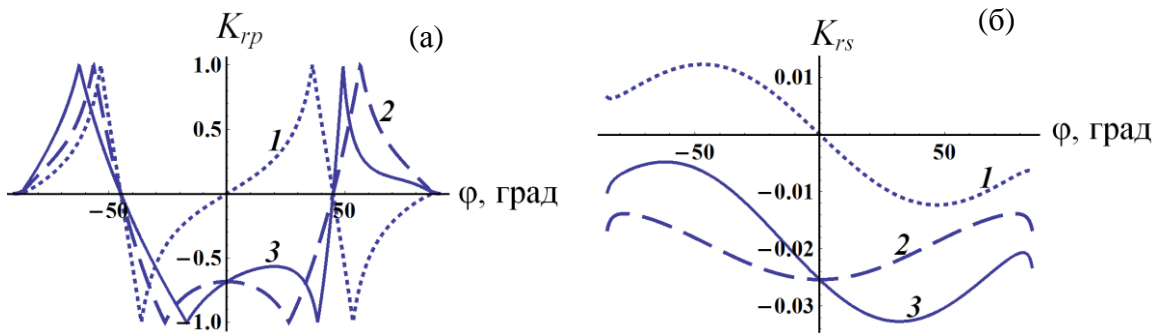


Рис. 1. Зависимости эллиптичностей $K_{rp,rs}$ отраженного света от угла падения φ ; (а) – p -поляризация, (б) – s -поляризации падающего света. Показатели преломления кристалла $n_o = 2.2597$, $n_e = 2.4125$, внешней среды $n_i = 2.265$, длина волны $\lambda = 0.633$ мкм. 1 – планальные кристаллы ($\alpha_{11} = \alpha_{33} = 0$, $\alpha_{12} \neq 0$), 2 – аксиальные ($\alpha_{11}, \alpha_{33} \neq 0$, $\alpha_{12} = 0$), 3 – примитивные ($\alpha_{11}, \alpha_{33}, \alpha_{12} \neq 0$); $\alpha_{11} = 1.9 \times 10^{-3}$, $\alpha_{33} = -5.7 \times 10^{-3}$, $\alpha_{12} = -3.5 \times 10^{-3}$.

Для прозрачных кристаллов примитивных и планальных классов можно найти величину α_{12} по формулам:

$$K_{rp}(\varphi) - K_{rp}(-\varphi) = \frac{-4n_i^2 \eta_i \alpha_{12} \sin\varphi}{(\eta_2 + \eta_i)(\varepsilon_o\eta_i - n_i^2\eta_1)}, \quad K_{rs}(\varphi) - K_{rs}(-\varphi) = \frac{4n_i^2 \eta_i \alpha_{12} \sin\varphi}{(\eta_2 - \eta_i)(\varepsilon_o\eta_i + n_i^2\eta_1)}. \quad (3)$$

Так как $K_{rp,rs} \sim \alpha_{ij}$, в большинстве случаев $|K_{rp,rs}| \ll 1$. Но величины $K_{rp,rs}$ могут принимать большие значения, если знаменатель (1), (2) близок к нулю. Это возможно при p -поляризации падающего света, если угол падения близок к углу Брюстера φ_B ($\text{tg}^2\varphi_B = \varepsilon_o/n_i^2$). В окрестности угла Брюстера, когда $|K_{rp}| > 1$, для вычисления эллиптичности отраженного света заменяем (1) обратным выражением. Также знаменатель (1), (2) может быть малым при любом φ , если показатель преломления внешней среды n_i близок к показателям преломления кристалла (именно этот случай показан на рис. 1). Из рис. 1 видно, что для планальных кристаллов (кривые 1) зависимости $K_{rp}(\varphi)$ и $K_{rs}(\varphi)$ антисимметричны: $K_{rp,rs}(-\varphi) = -K_{rp,rs}(\varphi)$, для аксиальных кристаллов (кривые 2) – симметричны: $K_{rp,rs}(-\varphi) = K_{rp,rs}(\varphi)$. Для примитивных классов (кривые 3) величины $K_{rp}(\varphi)$ и $K_{rs}(\varphi)$ отличаются по модулю при смене знака угла падения: $|K_{rp,rs}(-\varphi)| \neq |K_{rp,rs}(\varphi)|$.

Для поглощающих кристаллов примитивных, аксиальных и планальных классов $\chi_{rp,rs}(\varphi) \neq 0$, зависимости $\chi_{rp,rs}(\varphi)$ и $K_{rp,rs}(\varphi)$ удовлетворяют тем же закономерностям, что и зависимости $K_{rp,rs}(\varphi)$ для прозрачного кристалла.

Рассмотрим поляризацию отраженного и прошедшего света в кристаллах инверсионно-планального ($\bar{4}2m$) и инверсионно-примитивного ($\bar{4}$) классов, в которых тензор гирации имеет необычный вид (табл. 1) и изменяется при повороте системы координат вокруг оптической оси. В классе $\bar{4}2m$ получим $\alpha_{12} = 0$, если оси координат X, Y выбраны параллельно осям симметрии второго порядка (оптическая ось $\parallel Z$); если X, Y выбраны как перпендикуляры к плоскостям симметрии, то $\alpha_{11} = 0$. Вращение плоскости поляризации в направлении оптической оси отсутствует [1]. Оптическая активность таких кристаллов при нормальном падении света достаточно хорошо исследована [5–7]. При наклонном падении света эти кристаллы практически не изучались.

Проведено аналитическое решение граничной задачи отражения и прохождения света для кристаллов классов $\bar{4}2m$ и $\bar{4}$ без учета многократных отражений. Если пластинка вырезана параллельно оптической оси (плоскость падения света перпендикулярна оптической оси), для азимутов поляризации χ_t и эллиптичностей K_t прошедшего света при p -поляризации получим:

$$\chi_{tp} = -\frac{\alpha_{11}p_1 \sin\Delta + \alpha_{12}p_2 \sin\Delta \sin\varphi}{(\varepsilon_e - \varepsilon_o)n_t \varepsilon_o \eta_1(\eta_2 + \eta_i)(\eta_2 + \eta_t)}, \quad K_{tp} = \frac{\alpha_{11}(p_1 \cos\Delta + p_3) + \alpha_{12}(p_2 \cos\Delta + p_4) \sin\varphi}{(\varepsilon_e - \varepsilon_o)n_t \varepsilon_o \eta_1(\eta_2 + \eta_i)(\eta_2 + \eta_t)}, \quad (4)$$

$\eta_t = \sqrt{n_t^2 - \xi^2}$, $\Delta = \frac{2\pi d}{\lambda}(\eta_2 - \eta_1)$, n_t – показатель преломления нижней среды, p_i , $i = 1, \dots, 4$, – функции показателей преломления и $\sin^2\varphi$. При s -поляризации падающего света величины χ_t и K_t записываются аналогично. Видно, что χ_t и K_t в общем случае различны при положительных и отрицательных углах падения.

На рис. 2а показана рассматриваемая ориентация пластинки кристалла класса $\bar{4}2m$. На рис. 2б представлена зависимость азимута поляризации χ_t прошедшего света от угла падения φ и угла ψ' между осью 2-го порядка, параллельной направлению [100], и поверхностью пластинки. Если пластинка вырезана параллельно одной из осей 2-го порядка ($\psi' = 0$ или $\psi' = 90^\circ$), то величины χ_t одинаковы при положительных и отрицательных углах падения: $\chi_t(-\varphi) = \chi_t(\varphi)$, рис. 2в. Если пластинка вырезана параллельно одной из плоскостей симметрии ($\psi' = \pm 45^\circ$), получим $\chi_t(-\varphi) = -\chi_t(\varphi)$, рис. 2г. В случае, когда пластинка не параллельна ни одной из осей 2-го порядка и ни одной из плоскостей симметрии, соответствующие величины отличаются по модулю: $|\chi_t(-\varphi)| \neq |\chi_t(\varphi)|$, рис. 2д. То же самое относится и к эллиптичности прошедшего света K_t .

Для кристалла класса $\bar{4}$ возможны все рассмотренные варианты при разной ориентации пластинки относительно кристаллографических направлений [100] и [010]. Симметричные зависимости $\chi_t(-\varphi) = \chi_t(\varphi)$ и $K_t(-\varphi) = K_t(\varphi)$ получим при $\psi' = \arctg(-\alpha_{12}/\alpha_{11})/2$ (здесь ψ' – угол между направлением [100] и поверхностью пластинки), антисимметричные зависимости $\chi_t(-\varphi) = -\chi_t(\varphi)$ и $K_t(-\varphi) = -K_t(\varphi)$ соответствуют $\psi' = \arctg(\alpha_{11}/\alpha_{12})/2$.

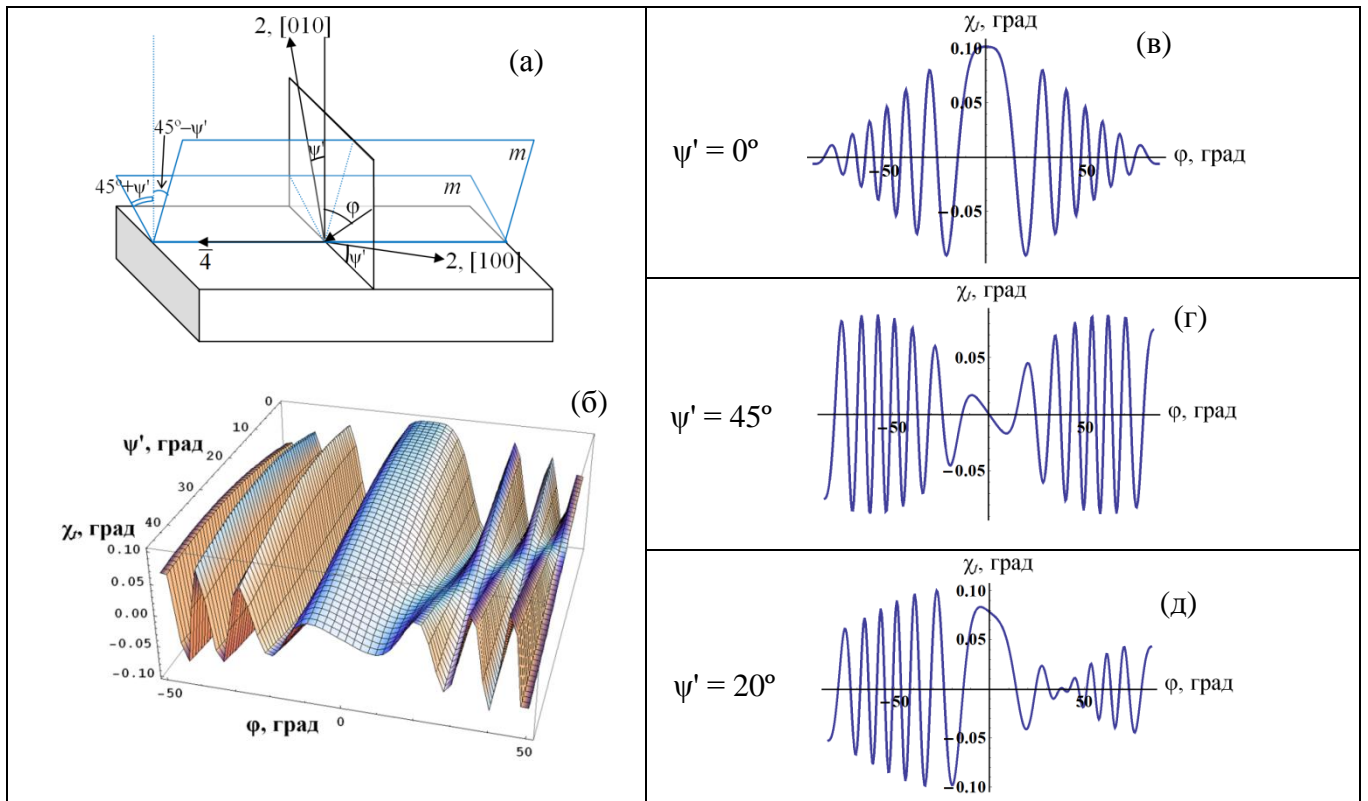


Рис. 2. (а) – Ориентация пластинки кристалла класса $\bar{4}2m$. (б) – Зависимость азимута поляризации χ_t прошедшего света для кристалла KH_2PO_4 (класс $\bar{4}2m$) при р-поляризации падающего света от угла падения φ и угла ψ' между направлением $[100]$ и поверхностью пластинки. (в), (г), (д) – Зависимости $\chi_t(\varphi)$ при разных значениях ψ' . Показатели преломления кристалла $n_o = 1.5095$, $n_e = 1.4684$, верхней и нижней сред $n_i = 1$, $n_t = 1$, толщина $d = 268.7$ мкм, длина волны $\lambda = 0.589$ мкм, компоненты тензора гирации $\alpha_{11} = 1.48 \times 10^{-4}$, $\alpha_{12} = 0$.

В главе 3 рассмотрены разные случаи количества и типа оптических осей в поглощающих ромбических, моноклинных и триклинных кристаллах. В работах Ф.И. Федорова [1, 8] предсказано, что поглощающие низкосимметричные кристаллы могут иметь разное число и тип оптических осей. В общем случае такой кристалл имеет четыре круговые оптические оси, а все остальные варианты возникают при выполнении определенных соотношений между компонентами комплексного тензора диэлектрической проницаемости $\varepsilon = \varepsilon' + i \varepsilon''$.

В низкосимметричном поглощающем кристалле обратный комплексный тензор диэлектрической проницаемости ε^{-1} имеет вид [1, 8]:

$$\varepsilon^{-1} = a + b(\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}'' + \mathbf{c}'' \cdot \mathbf{c}'), \quad \mathbf{c}' = \{c'_1, c'_2, c'_3\}, \quad \mathbf{c}'' = \{c''_1, c''_2, c''_3\}, \quad (5)$$

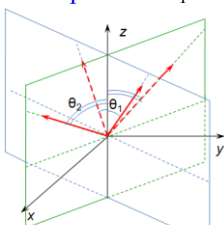
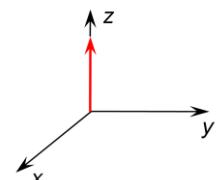
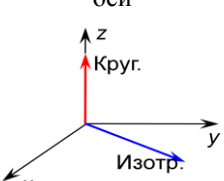
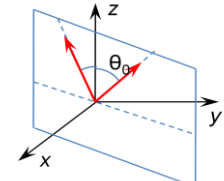
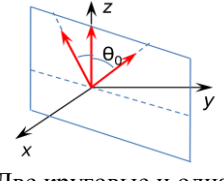
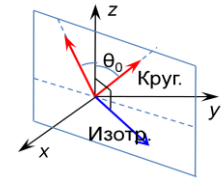
$\mathbf{c}' \cdot \mathbf{c}''$ – диада, \mathbf{c}' , \mathbf{c}'' – комплексные векторы, определяющие положения оптических осей кристалла.

Направляющие векторы \mathbf{n}_{\pm} оптических осей находятся из соотношения:

$$\mathbf{n}_{\pm} = \frac{\sqrt{(\mathbf{c}^*)^2 \mathbf{c} + \sqrt{\mathbf{c}^2 \mathbf{c}^* + i \cdot [\mathbf{c} \mathbf{c}^*]}}}{|\mathbf{c}|^2 + |\mathbf{c}^2|}. \quad (6)$$

Оптическая ось называется круговой, если при распространении света в направлении этой оси имеет место определенная круговая поляризация волны; в направлении изотропной оптической оси может распространяться волна любой поляризации.

Таблица 2. Возможные случаи количества и типа оптических осей и вид тензора ϵ^{-1} для низкосимметричных поглощающих кристаллов

<p>Положение оптических осей в моноклинном кристалле, $Z \parallel 2$ или $Z \perp m$</p> <p>Четыре круговые оптические оси (ромб. кристалл $\theta_1 = \theta_2$)</p>  <p>Одна круговая оптическая ось</p>  <p>Одна круговая и одна изотропная оптические оси</p>  <p>Две круговые оптические оси</p>  <p>Три круговые оптические оси</p>  <p>Две круговые и одна изотропная оптические оси</p> 	Ромбический кристалл	
	Четыре круговые оптические оси $\mathbf{c}', \mathbf{c}''$ – эллиптические	Две изотропные оптические оси $\mathbf{c}', \mathbf{c}''$ – линейные
	$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad \frac{\delta - \alpha}{\alpha - \gamma} \neq \left(\frac{\delta - \alpha}{\alpha - \gamma} \right)^*$	$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad \frac{\delta - \alpha}{\alpha - \gamma} = \left(\frac{\delta - \alpha}{\alpha - \gamma} \right)^*$
Моноклинный кристалл, $Z \parallel 2$ или $Z \perp m$	Триклинный кристалл Ориентация указана для каждого случая	
	Четыре круговые оптические оси $\mathbf{c}', \mathbf{c}''$ – различны и эллиптические	
	Одна круговая оптическая ось $\mathbf{c}' = \mathbf{c}'' = \mathbf{c}$, \mathbf{c} – круговой вектор $Z \parallel$ круговой оптической оси	Одна изотропная оптическая ось \mathbf{c}' – круговой, \mathbf{c}'' – линейный, $\mathbf{c}'\mathbf{c}'' = 0$ $Z \parallel$ изотропной оптической оси
	$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha - \gamma & \pm i\gamma & 0 \\ \pm i\gamma & \alpha + \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}$	$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & \delta \\ 0 & \alpha & \pm i\delta \\ \delta & \pm i\delta & \alpha \end{pmatrix}$
	Одна круговая и одна изотропная оптические оси	
	\mathbf{c}' – круговой, \mathbf{c}'' – линейный	\mathbf{c}' – круговой вектор, \mathbf{c}'' – линейный, или \mathbf{c}'' – эллиптический, $\mathbf{c}'\mathbf{c}'' = 0$.
	$Z \parallel$ круговой, $Y \parallel$ изотропной оптической оси	$Z \parallel$ круговой оси, изотропная ось $\parallel YOZ$
	$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & \pm i\gamma/2 & 0 \\ \pm i\gamma/2 & \alpha + \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}$	$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & i\gamma/2 & i\gamma\eta \\ i\gamma/2 & \alpha + \gamma & \gamma\eta \\ i\gamma\eta & \gamma\eta & \alpha \end{pmatrix}, \quad \eta = \eta^*$
	Две круговые оптические оси	
	$\mathbf{c}' = \mathbf{c}'' = \mathbf{c}$, \mathbf{c} – эллиптический	\mathbf{c}' круговой, \mathbf{c}'' эллиптический, $\mathbf{c}'\mathbf{c}'' = 0$
	Оптические оси расположены в одной плоскости с осью Z .	Оптическая ось, отвечающая круговому вектору \mathbf{c}' , параллельна Z .
	$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha + \delta & \pm \delta\sqrt{\eta} & 0 \\ \pm \delta\sqrt{\eta} & \alpha + \eta\delta & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}$	$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha - \gamma & i\gamma & i\gamma\eta \\ i\gamma & \alpha + \gamma & \gamma\eta \\ i\gamma\eta & \gamma\eta & \alpha \end{pmatrix}$
	Три круговые оптические оси	
	\mathbf{c}' – круговой, \mathbf{c}'' – эллиптический	\mathbf{c}' круговой, \mathbf{c}'' эллиптический, $\mathbf{c}'\mathbf{c}'' \neq 0$
	Все три оптические оси в одной плоскости, одна из них $\parallel Z$.	Оптическая ось, отвечающая круговому вектору \mathbf{c}' , параллельна Z .
	$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha + \delta & \pm i\delta(1 - \eta)/2 & 0 \\ \pm i\delta(1 - \eta)/2 & \alpha + \eta\delta & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}$	$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha - \eta\gamma & i\gamma(\eta + 1)/2 & i\delta \\ i\gamma(\eta + 1)/2 & \alpha + \gamma & \delta \\ i\delta & \delta & \alpha \end{pmatrix}, \quad \eta \neq 1$
	Две круговые и одна изотропная оптические оси	
	\mathbf{c}' – эллиптический, \mathbf{c}'' – линейный	\mathbf{c}' – эллиптический, \mathbf{c}'' – линейный, или $\mathbf{c}', \mathbf{c}''$ – эллиптические, $\mathbf{c}'\mathbf{c}''^* = 0$.
	ϵ^{-1} записывается в общем виде	$Z \parallel$ изотропной оптической оси
		$\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & \delta_1 \\ 0 & \alpha & \delta_2 \\ \delta_1 & \delta_2 & \alpha + 2\delta_3 \end{pmatrix}$

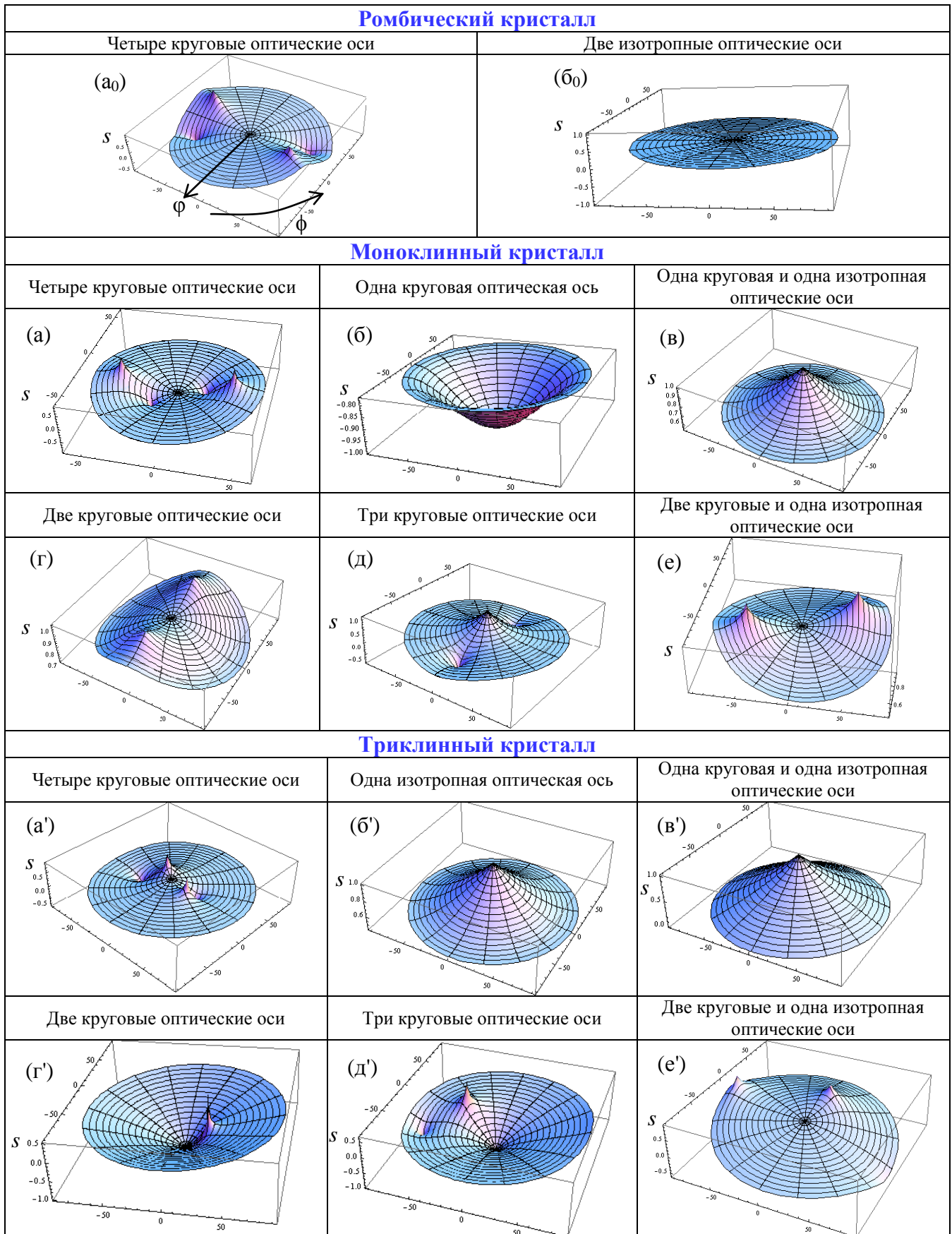


Рис. 3. Зависимость эллиптичностей собственных волн s от угла падения φ и угла поворота ϕ кристалла вокруг оси Z в цилиндрической системе координат. Угол φ отсчитывается вдоль радиуса горизонтального сечения фигуры, ϕ – как поворот этого радиуса, $|\varepsilon_{ij}''| \sim 10^{-2}$.

Вектор \mathbf{A} называется линейным, если $[\mathbf{A}\mathbf{A}^*] = 0$; круговым, если $\mathbf{A}^2 = 0$; эллиптическим, если $[\mathbf{A}\mathbf{A}^*] \neq 0$ и $\mathbf{A}^2 \neq 0$ [8]. В большинстве случаев векторы \mathbf{c}' , \mathbf{c}'' – эллиптические и каждому из них соответствуют две круговые оптические оси. Из (6) следует, что круговому вектору \mathbf{c} соответствует только одна круговая оптическая ось ($\mathbf{n}_+ = -\mathbf{n}_-$ – круговой вектор), а линейному вектору \mathbf{c} – одна изотропная оптическая ось ($\mathbf{n}_+ = \mathbf{n}_-$ – изотропный вектор). В ромбическом поглощающем кристалле возможно существование или четырех круговых, или двух изотропных оптических осей. В моноклинных и триклинных поглощающих кристаллах возможно существование шести разных случаев, отличающихся количеством и типом оптических осей [1, 8]. Все возможные варианты, положение оптических осей для моноклинного кристалла, а также соответствующий вид векторов \mathbf{c}' , \mathbf{c}'' приведены в табл. 2.

Используя систему уравнений (5) и выведенные в [8] ограничения на комплексные векторы \mathbf{c}' , \mathbf{c}'' , можно найти аналитические выражения для компонент комплексных тензоров диэлектрической проницаемости ϵ для тех случаев, когда моноклинный или триклинный поглощающий кристалл имеет меньше четырех оптических осей. Более наглядные соотношения получаются для обратного тензора диэлектрической проницаемости (ϵ^{-1} , табл. 2).

С помощью метода Берремана с использованием программного пакета Wolfram Mathematica 7.0 проведен расчет эллиптичностей собственных волн s при наклонном падении света для низкосимметричных поглощающих кристаллов с разным числом оптических осей. На рис. 3 приведены в цилиндрической системе координат зависимости величины s от угла падения φ и угла поворота ϕ кристалла вокруг оси Z . На рисунках видны точки выхода оптических осей, в которых эллиптичность собственных волн имеет максимум или минимум и равна ± 1 .

Сравним величины эллиптичностей прошедшего света K_t при круговой поляризации падающей волны, вычисленные для одноосного поглощающего кристалла и поглощающего моноклинного и триклинного кристаллов, имеющих только одну оптическую ось (рис. 4).

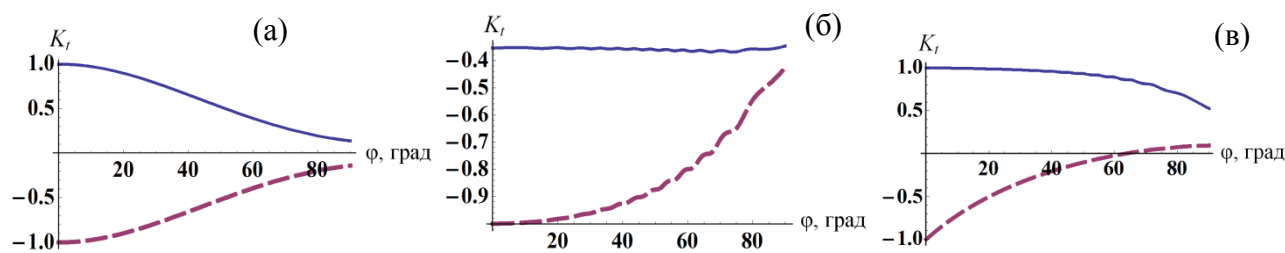


Рис. 4. Зависимости эллиптичностей прошедшего света K_t от угла падения φ ; сплошная линия – правая круговая поляризация падающего света, пунктир – левая; а – одноосный кристалл, б – моноклинный кристалл с одной круговой оптической осью, в – триклинный с одной изотропной оптической осью. Пластика перпендикулярна оптической оси, $|\epsilon_{ij}''| \sim 10^{-2}$, $d \sim 10$ мкм.

В одноосном кристалле эллиптичности прошедшего света при правой и левой круговой поляризации падающего света одинаковы по модулю и противоположны по знаку (рис. 4а). В моноклинном кристалле с одной круговой

оптической осью при распространении света в направлении оптической оси прошедший свет имеет круговую поляризацию только для одной круговой поляризации падающего света; для другой поляризации прошедший свет эллиптически поляризован при любых углах падения (рис. 4б). Для триклинного кристалла с одной изотропной оптической осью при падении света круговой поляризации в направлении оптической оси ($\varphi = 0$) прошедший свет сохраняет поляризацию. При $\varphi \neq 0$ прошедший свет эллиптически поляризован, но, в отличие от одноосного кристалла, ход кривых разный (рис. 4в).

В главе 4 изучено различие в проявлении оптической активности в прозрачных и поглощающих кристаллах классов 1, 2, m , 222 , $mm2$. В [9] подробно изучены эллиптичности собственных волн, а также азимуты поляризации прошедшего света для поглощающих оптически активных кристаллов класса 222 .

В прозрачных кристаллах классов 2, m , $mm2$ возможны два случая ориентации плоскости оптических осей относительно элементов симметрии кристалла [10]. В *I случае* плоскость оптических осей параллельна оси симметрии 2 для класса 2, перпендикулярна плоскости симметрии m для класса m , перпендикулярна обеим плоскостям симметрии для класса $mm2$. Во *II случае* плоскость оптических осей перпендикулярна оси симметрии 2 для класса 2, параллельна плоскости симметрии m для класса m , параллельна одной из плоскостей симметрии для класса $mm2$.

При наличии поглощения каждая оптическая ось прозрачного кристалла «расщепляется» на две, но получившиеся оси при рассматриваемых величинах поглощения ($|\epsilon''_{ij}| \sim 10^{-3}$, ϵ'' – мнимая часть тензора диэлектрической проницаемости ϵ) располагаются вблизи плоскости оптических осей прозрачного кристалла (отклоняются от нее на $1-2^\circ$). Расположение оптических осей в *I* и *II случаях* показано на рис. 5 в системе координат, в которой действительная часть ϵ' тензора ϵ имеет диагональный вид и $\epsilon'_{11} < \epsilon'_{22} < \epsilon'_{33}$.

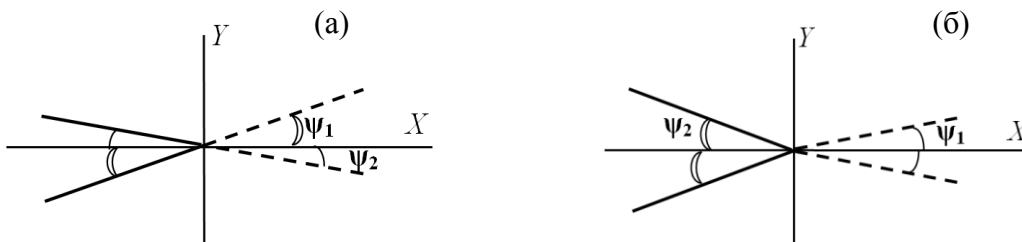


Рис. 5. Проекция ортов оптических осей поглощающего моноклинного кристалла (классы 2, m) на плоскость XOY : а – *I* случай, б – *II* случай.

На рис. 6 приведен вид азимутов поляризации прошедшего света χ_t для прозрачных и поглощающих оптически активных низкосимметричных кристаллов в зависимости от ориентации оптических осей относительно поверхности пластинки. Угол θ показывает положение волновой нормали в плоскости, содержащей оптические оси. Для прозрачного кристалла эта плоскость содержит две оптические оси, для поглощающего кристалла в *I случае* – также две оптические оси, во *II случае* – одну; из рис. 5 видно, что во *II случае* нельзя провести через ось Z плоскость, содержащую две оптические оси.

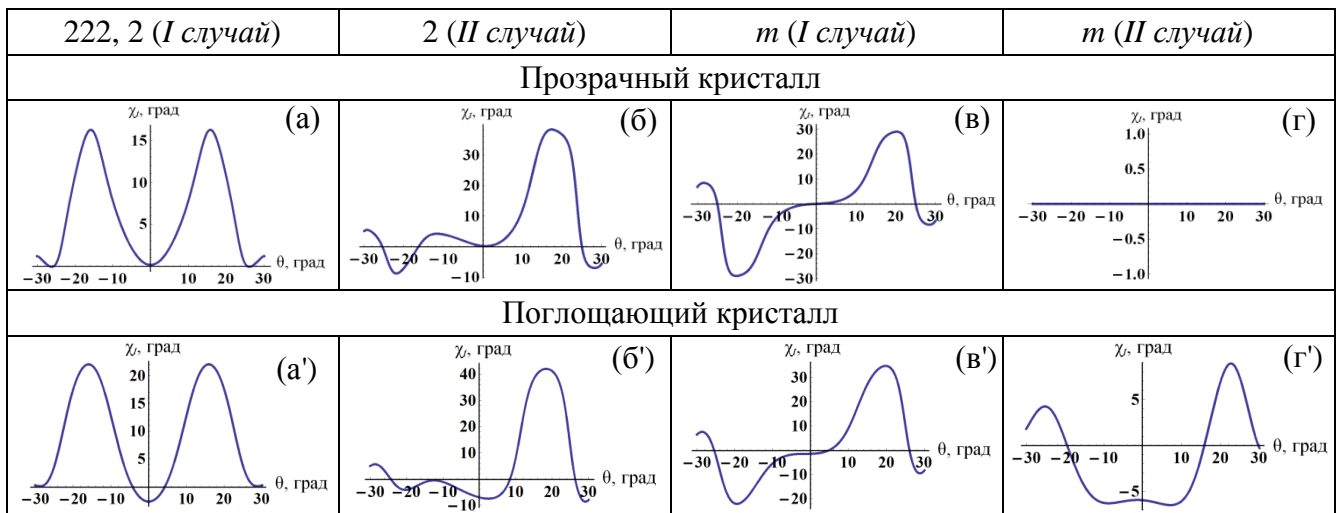


Рис. 6. Азимуты поляризации χ_t света, прошедшего через пластинку толщиной $d = 100$ мкм, для прозрачных (а–г) и поглощающих (а'–г') оптически активных низкосимметричных кристаллов в зависимости от ориентации пластинки, $|\varepsilon_{ij}''| \sim 10^{-3}$, $|\alpha_{ij}| \sim 10^{-3}$.

Для прозрачного кристалла максимумы зависимостей $\chi_t(\theta)$ соответствуют положениям оптических осей. Для кристаллов класса 222, а также класса 2 в I случае величины χ_t в окрестности разных оптических осей одинаковы (рис. 6а). Для класса 2 во II случае данные величины различны (рис. 6б). Для прозрачных кристаллов классов *t* и *tt*2 в I случае зависимости $\chi_t(\theta)$ антисимметричны относительно оси $\theta = 0$, а во II случае $\chi_t(\theta) = 0$ (рис. 6в, 6г). Для поглощающих кристаллов класса 222 и класса 2 в I случае ход кривых $\chi_t(\theta)$ одинаковый в окрестности разных оптических осей, а зависимости симметричны относительно оси $\theta = 0$ (рис. 6а'). В остальных случаях ход кривых разный при положительных и отрицательных значениях θ (рис. 6б'–6г').

Проведено сравнение эллиптичностей собственных волн, вычисленных для поглощающего и поглощающего оптически активного кристаллов с четырьмя круговыми оптическими осями, с соответствующими величинами для кристаллов с другим числом оптических осей (рис. 7).

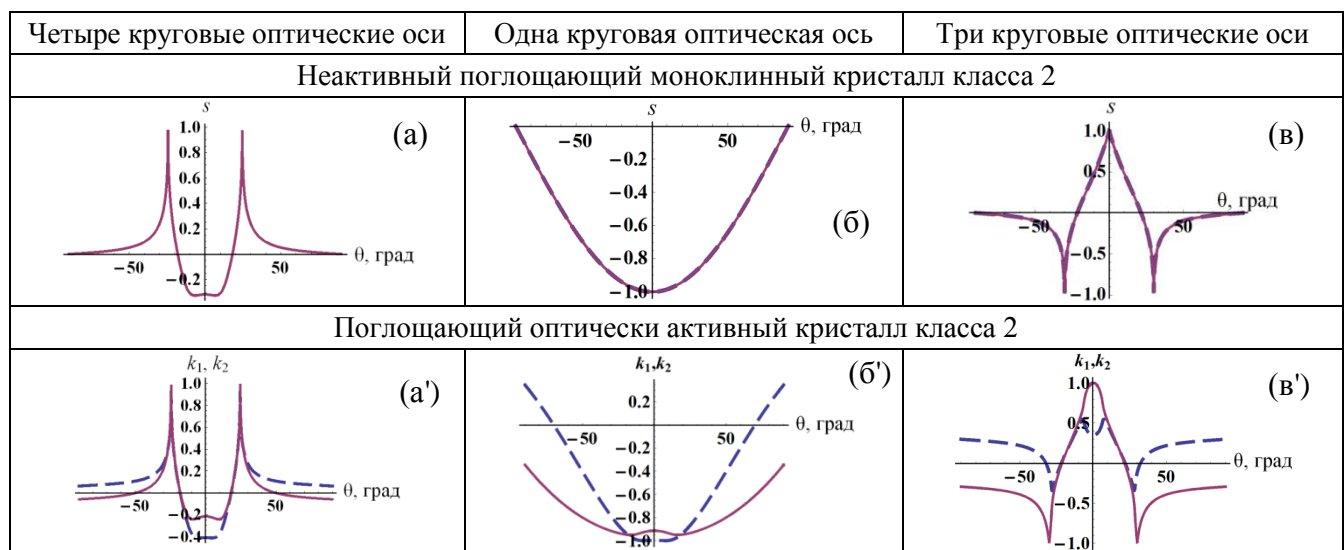


Рис. 7. Эллиптичности собственных волн для поглощающих (а–в) и поглощающих оптически активных (а'–в') кристаллов с разным числом оптических осей, $|\varepsilon_{ij}''| \sim 10^{-2}$, $|\alpha_{ij}| \sim 10^{-3}$.

В поглощающем оптически неактивном кристалле собственные волны имеют одинаковую эллиптичность (рис. 7а–7в), а в направлении каждой из оптических осей распространяется только одна собственная волна с круговой поляризацией. В поглощающем оптически активном кристалле распространяются две собственные волны, как и в прозрачном оптически активном, но при этом эллиптичности собственных волн (k_1 , k_2), распространяющихся в направлении оптических осей, различны. Одна из них имеет круговую поляризацию, а другая – эллиптическую (рис. 7а'–7в').

В главе 5, посвященной второй части работы, рассмотрена связь между оптической активностью кристалла и его структурой. Рассмотрен вопрос оценки показателей преломления n_o , n_e и удельного вращения плоскости поляризации света ρ_z для кристаллов семейства лангасита, исходя из знания состава и структуры кристаллов. Рассматриваемые кристаллы семейства лангасита и их обозначения приведены в табл. 3.

Таблица 3. Используемые в расчетах кристаллы семейства лангасита и их обозначения

Состав	Обозначение	Состав	Обозначение
Известны n_o , n_e и ρ_z [11, 12]		ρ_z измерены в данной работе, n_o , n_e рассчитаны	
$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$	LGS	$\text{La}_3\text{Ta}_{0.25}\text{Ga}_{5.25}\text{Si}_{0.5}\text{O}_{14}$	LTGS
$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{GeO}_{14}$	LGG	$\text{La}_3\text{Ta}_{0.25}\text{Zr}_{0.5}\text{Ga}_{5.25}\text{O}_{14}$	LTZG
$\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$	CGG	$\text{La}_3\text{Zr}_{0.5}\text{Ga}_5\text{Si}_{0.5}\text{O}_{14}$	LZGS
$\text{Sr}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$	SGG	ρ_z и n_o , n_e неизвестны	
$\text{La}_3\text{Nb}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$	LNG	$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{ZrO}_{14}$	LGZr
$\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$	LTG	$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{TiO}_{14}$	LGTi
Известно ρ_z [13], n_o , n_e рассчитаны		$\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SnO}_{14}$	LGSn
		$\text{La}_{2.88}\text{Sr}_{0.12}\text{Ta}_{0.56}\text{Ga}_{5.44}\text{O}_{14}$	LSrTG
$\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	CTGS	$\text{La}_3\text{SnGa}_{3.1}\text{Al}_{1.9}\text{O}_{14}$	LSnGAl
$\text{Ca}_3\text{NbGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	CNGS	$\text{Nd}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$	NGS
$\text{Sr}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	STGS	$\text{Ba}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	BTGS
$\text{Sr}_3\text{NbGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$	SNGS	$\text{Ba}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$	BGG

Используя достижения структурной рефрактометрии, можно оценить показатели преломления n_o , n_e кристаллов семейства лангасита, исходя из структурных данных. В структурной рефрактометрии вещество характеризуется молекулярной рефракцией [14]

$$R_{o,e} = (n_{o,e}^2 - 1)/(n_{o,e}^2 + 2)(M/D), \quad (7)$$

где M – молярная масса вещества, D – плотность, $n_{o,e}$ – показатели преломления.

Согласно принципу аддитивности молекулярная рефракция вещества равна сумме рефракций отдельных структурных единиц. Каждую формулу вещества можно «разбить» на определенные формульные «фрагменты». Учитывая, что в кристаллах семейства лангасита все положительные ионы связаны с ионами кислорода, можно записать, например, $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ в виде $3/2(\text{La}_2\text{O}_3)5/2(\text{Ga}_2\text{O}_3)(\text{SiO}_2)$, тогда

$$R_{\text{LGS}} = 3/2R_{\text{La}_2\text{O}_3} + 5/2R_{\text{Ga}_2\text{O}_3} + R_{\text{SiO}_2}. \quad (8)$$

Аналогичное разложение можно записать для всех кристаллов из табл. 3.

Чтобы найти рефракции, и, соответственно, показатели преломления кристаллов семейства лангасита, сначала вычислим рефракции используемых «фрагментов». По известным значениям n_o , n_e для 6 кристаллов семейства лангасита (табл. 3) рассчитаем их рефракции по (7) отдельно для обыкновенного и необыкновенного показателей преломления. Используя разложение (8) для каждого кристалла, из полученной системы уравнений вычислим рефракции SrO, La₂O₃, Ga₂O₃, Nb₂O₅, Ta₂O₅, GeO₂ (табл. 4). Рефракции остальных «фрагментов», необходимых для дальнейших расчетов (табл. 4), рассчитаны по экспериментальным значениям n_o , n_e соответствующих кристаллов.

Таблица 4. Рассчитанные рефракции «фрагментов», на которые можно «разбить» формулы рассматриваемых кристаллов

Состав	0.436 мкм	0.589 мкм	0.633 мкм
CaO	7.63	7.46	7.45
SrO	9.22	9.01	8.99
BaO	12.22	12.01	12.0
ZrO ₂	$R_o = 12.15$ $R_e = 12.80$	$R_o = 11.82$ $R_e = 12.44$	$R_o = 11.77$ $R_e = 12.39$
SiO ₂	$R_o = 7.26$ $R_e = 7.36$	$R_o = 7.15$ $R_e = 7.25$	$R_o = 7.14$ $R_e = 7.23$
Ga ₂ O ₃	$R_o = 12.08$ $R_e = 12.53$	$R_o = 11.83$ $R_e = 12.26$	$R_o = 11.78$ $R_e = 12.24$
La ₂ O ₃	$R_o = 31.28$ $R_e = 30.93$	$R_o = 30.53$ $R_e = 30.23$	$R_o = 30.43$ $R_e = 30.09$
Nb ₂ O ₅	$R_o = 38.35$ $R_e = 42.99$	$R_o = 36.72$ $R_e = 41.29$	$R_o = 36.45$ $R_e = 40.89$
Ta ₂ O ₅	$R_o = 39.15$ $R_e = 43.22$	$R_o = 38.0$ $R_e = 41.63$	$R_o = 37.75$ $R_e = 41.30$
GeO ₂	$R_o = 9.75$ $R_e = 9.92$	$R_o = 9.52$ $R_e = 9.72$	$R_o = 9.48$ $R_e = 9.67$
Al ₂ O ₃	$R_o = 10.71$ $R_e = 10.63$	$R_o = 10.58$ $R_e = 10.49$	$R_o = 10.56$ $R_e = 10.47$
TiO ₂	$R_o = 13.21$ $R_e = 14.20$	$R_o = 12.47$ $R_e = 13.44$	$R_o = 12.36$ $R_e = 13.33$
SnO ₂	$R_o = 11.13$ $R_e = 11.74$	$R_o = 10.78$ $R_e = 11.45$	$R_o = 10.72$ $R_e = 11.40$

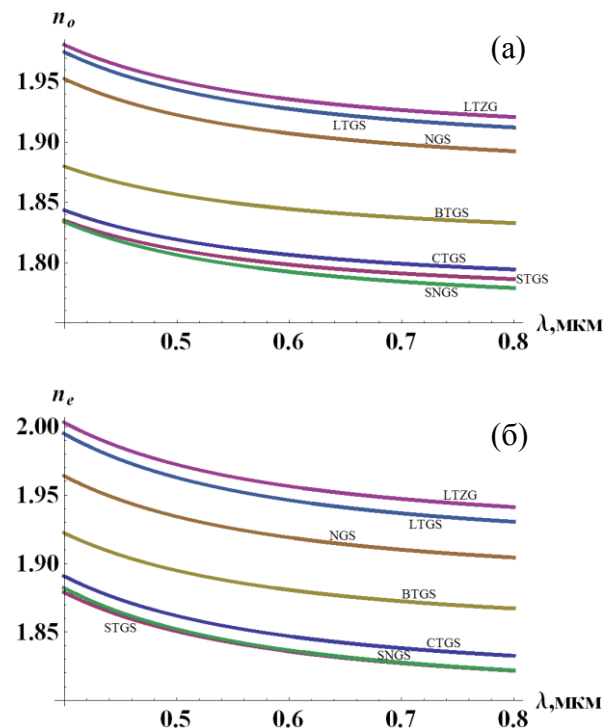


Рис. 8. Рассчитанная дисперсия показателей преломления обыкновенной (а) и необыкновенной (б) волн для некоторых кристаллов семейства лангасита.

Используя разложение (8) для каждого кристалла и данные табл. 4, по формуле (7) проведена оценка показателей преломления для 15 кристаллов семейства лангасита для разных длин волн. На рис. 8 приведена рассчитанная по формуле Зельмейера [10] дисперсия показателей преломления.

Проведено измерение удельного вращения плоскости поляризации света ρ_z для кристаллов La₃Ta_{0.25}Ga_{5.25}Si_{0.5}O₁₄, La₃Ta_{0.25}Zr_{0.5}Ga_{5.25}O₁₄, La₃Zr_{0.5}Ga₅Si_{0.5}O₁₄. Величины ρ_z получены из измеренных спектров пропускания для этих кристаллов (рис. 9а). Полученные дисперсии ρ_z приведены на рис. 9б.

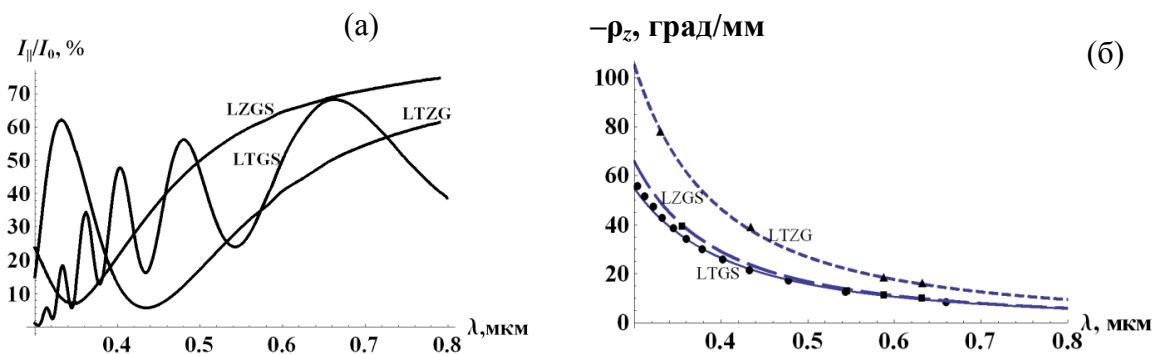


Рис. 9. а – Спектры пропускания кристаллов $La_3Ta_{0.25}Ga_{5.25}Si_{0.5}O_{14}$ (LTGS), $d = 20.97$ мм, $La_3Ta_{0.25}Zr_{0.5}Ga_{5.25}O_{14}$ (LTZG), $d = 2.31$ мм, $La_3Zr_{0.5}Ga_5Si_{0.5}O_{14}$ (LZGS), $d = 2.27$ мм, при параллельных поляризаторах; б – дисперсия удельного вращения плоскости поляризации света ρ_z , рассчитанная по экспериментальным данным.

Используя экспериментальные значения величины ρ_z , экспериментальные и рассчитанные значения двупреломления Δn (табл. 5), построена зависимость ρ_z от Δn , которую можно аппроксимировать прямой линией (рис. 10, ● – экспериментальные Δn , ■ – рассчитанные Δn).

Таблица 5. Величины ρ_z и Δn для кристаллов семейства лангасита при длине волны $\lambda = 0.589$ мкм

Состав	Эксп. или расч. Δn	Эксп. ρ_z , град/мм	Расч. ρ_z , град/мм	Расч. ρ_z , WinOpt Act
ρ измерены в данной работе, n_o, n_e рассчитаны				
LTGS	0.0188	11.0	11.57	10.70
LTZG	0.0227	18.38	15.60	17.0
LZGS	0.0153	11.50	7.95	–
Известны n_o, n_e и ρ_z [11, 12]				
LGS	0.0114	3.55	3.92	3.48
LGG	0.0130	3.64	5.57	3.68
CGG	0.0240	15.56	16.95	15.57
SGG	0.0171	14.52	9.81	14.51
LNG	0.0304	23.0	23.57	22.85
LTG	0.0260	16.0	19.02	16.3
Известно ρ_z [13], n_o, n_e рассчитаны				
CTGS	0.0405	34.59	34.01	34.5
CNGS	0.0477	37.32	41.46	–
STGS	0.0375	33.70	30.91	33.64
SNGS	0.0441	41.09	37.74	42.04
Рассчитаны ρ и n_o, n_e				
LGZr	0.0190	–	11.78	–
LGTi	0.0261	–	19.12	–
LGSn	0.0197	–	12.50	–
LSrTG	0.0280	–	21.09	–
LSnGAl	0.0127	–	5.26	–
NGS	0.0118	–	4.33	3.64
BTGS	0.0363	–	29.67	30.35
BGG	0.0209	–	13.73	–

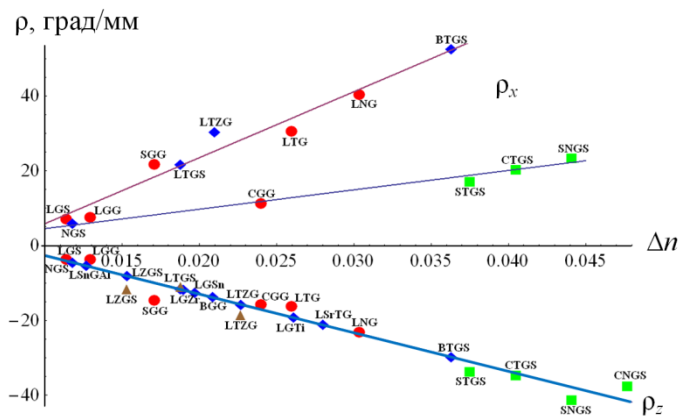


Рис. 10. Зависимость ρ_z и ρ_x от Δn для кристаллов семейства лангасита, $\lambda = 0.589$ мкм.
● измерены ρ_z и Δn ; ■ измерены ρ_z и рассчитаны Δn ; ◆ рассчитанные ρ_z и Δn ; ▲ ρ_z измерены в данной работе, рассчитанные Δn . Величины ρ_x рассчитаны по программе WinOptAct.

Предположим, что для тех кристаллов, для которых нет экспериментальных данных, значения ρ_z также согласуются с указанной зависимостью (рис. 10, \blacklozenge). Измеренные величины ρ_z для кристаллов LTGS, LTZG, LZGS (рис. 10, \blacktriangle) достаточно близки к рассчитанным.

Кроме того, можно провести оценку ρ_z , а также величины ρ в направлении, перпендикулярном к оптической оси (ρ_x), из структурных данных [15] по программе WinOptAct [16]. При этом стоит отметить, что величина ρ в направлениях, отличных от оптической оси, определяет вращение плоскости поляризации, каким оно было бы при отсутствии двупреломления. Чтобы применить программу WinOptAct, нужно знать атомную структуру исследуемого кристалла (сорта атомов, их координаты и анизотропные параметры атомных смещений для соответствующей абсолютной конфигурации), показатели преломления и приблизительные значения поляризуемостей ионов. Экспериментальные и вычисленные двумя способами значения ρ_z для всех кристаллов приведены в табл. 5. На рис. 10 показана полученная зависимость ρ_x от Δn , которую можно приблизительно аппроксимировать двумя прямыми линиями.

Рассчитанные разными способами значения ρ_z в основном приемлемо совпадают с экспериментальными данными (табл. 5). Поэтому можно предположить, что указанные методы пригодны для прогнозирования оптических свойств кристаллов семейства лангасита сходного состава.

Программа WinOptAct обычно использовалась для одноосных кристаллов. Чтобы проверить применимость данной программы для двуосного кристалла, был проведен расчет показателей преломления и удельного вращения плоскости поляризации света для ромбического кристалла α -ННО₃, у которого эти величины известны [17]. Получено удовлетворительное соответствие рассчитанных показателей преломления и вращения плоскости поляризации света с экспериментальными данными. При этом не удалось получить близкие к экспериментальным результаты для всех трех компонент тензора гирации. Можно предположить, что для двуосных кристаллов с помощью программы WinOptAct можно оценить вращение плоскости поляризации, а определение других компонент тензора гирации требует дополнительных расчетов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Впервые показано, что учет антисимметричной части тензора гирации в одноосных кристаллах примитивных, аксиальных и планальных классов вносит существенный вклад в величины азимутов поляризации и эллиптичностей отраженного и прошедшего света. Выявлено, что при наличии антисимметричной части тензора гирации рассматриваемые величины различны при положительных и отрицательных углах падения света; из этого различия можно определить величину антисимметричной части. Наиболее удобно рассматривать углы падения, близкие к углу Брюстера.
2. Исследованы азимуты поляризации и эллиптичности отраженного и прошедшего света в зависимости от угла падения для кристаллов классов $\bar{4}2m$

- и $\bar{4}$. Показано, что рассматриваемые величины в общем случае различны при положительных и отрицательных углах падения света.
3. Получены аналитические выражения для компонент комплексного тензора диэлектрической проницаемости в поглощающих низкосимметричных кристаллах с разным числом и типом оптических осей. Рассчитаны эллиптичности собственных волн для таких кристаллов, а также параметры поляризации прошедшего света при падении на кристалл волны правой или левой круговой поляризации в зависимости от среза пластинки. Показано существенное отличие частных случаев поглощающих моноклинных и триклинных кристаллов от общего случая кристалла с четырьмя круговыми оптическими осями.
 4. Изучено изменение эллиптичностей собственных волн и азимутов поляризации прошедшего света в поглощающих низкосимметричных оптически активных кристаллах разных классов по сравнению с прозрачными низкосимметричными оптически активными кристаллами. В частности, рассмотрены оптически активные поглощающие кристаллы, имеющие меньше четырех оптических осей. Показаны существенные отличия полученных величин, связанные с ориентацией оптических осей.
 5. С помощью метода аддитивных молекулярных рефракций, используя экспериментальные показатели преломления, рассчитаны рефракции веществ, на которые можно условно разбить формулы кристаллов семейства лангасита. Используя полученные рефракции, вычислены показатели преломления n_o , n_e и их дисперсия для некоторых кристаллов семейства лангасита, для которых пока нет экспериментальных данных.
 6. Для некоторых кристаллов семейства лангасита рассмотрена зависимость удельного вращения плоскости поляризации света ρ_z от двупреломления Δn , которая может быть аппроксимирована прямой линией и использована для оценки величин ρ_z других кристаллов. Для тех кристаллов, для которых есть все необходимые структурные данные, проведен расчет по программе WinOptAct величины ρ_z , а также удельного вращения плоскости поляризации света ρ_x (которое должно быть при отсутствии двупреломления) в направлении, перпендикулярном к оптической оси.
 7. Для проверки результатов расчета проведено измерение спектров пропускания света в диапазоне длин волн 0.3–0.8 мкм для кристаллов $\text{La}_3\text{Ta}_{0.25}\text{Ga}_{5.25}\text{Si}_{0.5}\text{O}_{14}$, $\text{La}_3\text{Ta}_{0.25}\text{Zr}_{0.5}\text{Ga}_{5.25}\text{O}_{14}$, $\text{La}_3\text{Zr}_{0.5}\text{Ga}_5\text{Si}_{0.5}\text{O}_{14}$. Из измеренных данных вычислена дисперсия удельного вращения ρ_z , и проведено сравнение полученных величин с вычисленными из зависимости ρ_z (Δn) и по программе WinOptAct.
 8. Впервые проведен расчет удельного вращения плоскости поляризации света по структурным данным с помощью программы WinOptAct для двуосного кристалла на примере кристалла $\alpha\text{-HfO}_3$, и проведено сравнение с известными экспериментальными данными.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Федоров Ф.И. Теория гиротропии. Минск: Наука и техника, 1976. 456 с.
2. Константинова А.Ф., Гречушников Б.Н., Бокуть Б.В., Валяшко Е.Г. Оптические свойства кристаллов. Минск: Наука и техника, 1995. 302 с.
3. Федоров Ф.И., Бокуть Б.В., Константинова А.Ф. К вопросу об оптической активности кристаллов планальных классов средних сингоний. // Кристаллография. 1962. Т. 7. Вып. 6. С. 910–915.
4. Константинова А.Ф., Набатов Б.В. Проявление оптической активности в одноосных кристаллах планальных классов. // Кристаллография. 1995. Т. 40. № 2. С. 219–222.
5. Hobden M.V. Optical activity in a non-enantiomorphous crystal silver gallium sulphide. // Nature. 1967. V. 216. № 18. P. 678.
6. Kobayashi J., Takahashi T., Hosokawa T., Uesu Y. A new method for measuring the optical activity of crystals and the optical activity of KH_2PO_4 . // J. Appl. Phys. 1978. V. 49. P. 809–815.
7. Сусликов Л.М., Сливка В.Ю., Лисица М.П. Твердотельные оптические фильтры на гиротропных кристаллах. Киев: Интерпресс ЛТД, 1998. 294 с.
8. Федоров Ф.И. Оптика анизотропных сред. Минск: из-во АН БССР. 1958. 380 с.
9. Окорочков А.И., Константинова А.Ф. Собственные волны в гиротропных поглощающих кристаллах ромбической сингонии. // Кристаллография. 1984. Т. 29. Вып. 5. С. 841–848.
10. Кизель В.А., Бурков В.И. Гиротропия кристаллов. М.: Наука, 1980. 304 с.
11. Батурина О.А., Гречушников Б.Н., Каминский А.А., Константинова А.Ф., Маркосян А.А., Милль Б.В., Ходжабагян Г.Г. Кристаллооптические исследования соединений со структурой тригонального Са-галлогерманата ($\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$). // Кристаллография. 1987. Т. 32. № 2. С. 406–412.
12. Гераськин В.В., Козлова Н.С., Забелина Е.В., Исаев И.М. Вращение плоскости поляризации света кристаллами лангасита и лангатата. // Материалы электронной техники. 2009. № 3. С. 33–38.
13. Wei A., Wang B., Qi H., Yuan D. Optical activity along the optical axis of crystals with ordered langasite structure. // Cryst. Res. Technol. 2006. V. 41. № 4. P. 371–374.
14. Бацанов С.С. Структурная рефрактометрия. М.: Высшая школа, 1976. 304 с.
15. Дудка А.П., Милль Б.В., Писаревский Ю.В. Уточнение кристаллических структур $\text{La}_3\text{Ta}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$ и $\text{La}_3\text{Nb}_{0.5}\text{Ga}_{5.5}\text{O}_{14}$. // Кристаллография. 2009. Т. 54. № 4. С. 599–607.
16. Glazer A.M. WINOPTACT: a computer program to calculate optical rotatory power and refractive indices from crystal structure data. // J. Appl. Cryst. 2002. V. 35. P. 652.
17. Иванов Н.Р., Константинова А.Ф., Чихладзе О.А. Дисперсия оптической активности двупреломляющих кристаллов. // Сб. Модуляционная спектроскопия полупроводников. Материалы I Республик. коллоквиума. Изд. Ин-та кибернетики АН ГрузССР, Тбилиси, 1973. С. 128–134.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи

1. Любимов В.Н., Альшиц В.И., Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Евдищенко Е.А. Резонансные и конверсионные отражения электромагнитных волн от границы кристалла с металлом. // Кристаллография. 2010. Т. 55. № 6. С. 968–974.
2. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Набатов Б.В., Евдищенко Е.А., Константинов К.К. Особенности распространения света в оптически активных поглощающих кристаллах ромбической сингонии. // Кристаллография. 2011. Т. 56. № 3. С. 412–417.
3. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Набатов Б.В., Евдищенко Е.А., Константинов К.К. Поглощающие оптически активные кристаллы моноклинного класса 2. // Проблемы физики, математики и техники. 2011. № 4 (9). С. 38–44.
4. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Евдищенко Е.А., Набатов Б.В., Константинов К.К. Гиротропные поглощающие кристаллы низших сингоний. // Кристаллография. 2012. Т. 57. № 3. С. 455–465.
5. Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Евдищенко Е.А., Набатов Б.В., Константинов К.К. Оптические оси в различных поглощающих кристаллах. // Кристаллография. 2012. Т. 57. № 6. С. 886–896.
6. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Евдищенко Е.А., Набатов Б.В., Константинов К.К. Особые случаи низкосимметричных поглощающих кристаллов. // Проблемы физики, математики и техники. 2012. № 4. С. 15–20.
7. Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Константинов К.К., Евдищенко Е.А. Количество оптических осей в триклинных поглощающих кристаллах. // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 6. С. 878–883.
8. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Константинов К.К. Проявление оптической активности в различных веществах. // Кристаллография. 2014. Т. 59. № 4. С. 509–528.
9. Дудка А.П., Константинова А.Ф., Головина Т.Г. К вопросу о структурной основе наличия двух оптических осей в кристалле α - HfO_3 . // Кристаллография. 2014. Т. 59. № 6. С. 973–980.
10. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Набатов Б.В., Дудка А.П., Милль Б.В. Экспериментальное и теоретическое определение величины вращения плоскости поляризации света в кристаллах семейства лангасита. // Кристаллография. 2015. Т. 60. № 6. С. 950–957.
11. Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Евдищенко Е.А., Константинов К.К. Особенности проявления оптической активности в различных одноосных кристаллах. // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 4. С. 588–595.
12. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Евдищенко Е.А., Константинов К.К. Влияние антисимметричной части псевдотензора гирации на характеристики прошедшего света в двуосных кристаллах. // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 4. С. 596–600.

13. Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Константинов К.К. Проявление оптической активности при наклонном падении света в кристаллах классов $\bar{4}2m$ и $\bar{4}$. // Кристаллография. 2017. Т. 62. № 3. С. 422–432.

Тезисы докладов

1. Головина Т.Г., Любимов В.Н., Евдищенко Е.А., Константинова А.Ф. Резонансное возбуждение и конверсия электромагнитных волн у границы оптически одноосного кристалла с металлом. // VII Национальная конференция «Рентгеновское, синхротронное излучения, нейтроны и электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии» (РСНЭ-НБИК 2009). Москва, 14–18 ноября 2009 г. Тезисы докладов. С. 451.
2. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Евдищенко Е.А., Набатов Б.В. Особенности распространения света в оптически активных поглощающих кристаллах 222 и 2 . // VIII Национальная конференция «Рентгеновское, синхротронное излучения, нейтроны и электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии» (РСНЭ-НБИК 2011). Москва, 14–18 ноября 2011 г. Тезисы докладов. С. 451.
3. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Евдищенко Е.А., Набатов Б.В. Гиротропия или оптическая активность в различных веществах. // XXX научные чтения имени академика Николая Васильевича Белова, 20–21 декабря 2011. Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Н.Новгород. С. 125–126.
4. Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Евдищенко Е.А., Набатов Б.В., Константинов К.К. Необычные варианты поглощающих моноклинных кристаллов. // Труды XV Международного симпозиума "Порядок, беспорядок и свойства оксидов (ОДРО-15)", 7–12 сентября 2012 г., г. Ростов-на-Дону – п. Лоо. С. 88–91.
5. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Константинов К.К. Проявление оптической активности в различных веществах. // Труды XVI Международного симпозиума "Порядок, беспорядок и свойства оксидов (ОДРО-16)", 7–12 сентября 2013 г., г. Ростов-на-Дону – п. Южный. С. 196–199.
6. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Константинов К.К. Оптическая активность в кристаллах и живой природе. // Международный симпозиум "Физика кристаллов 2013", Москва, 28 октября – 2 ноября 2013 г. Тезисы докладов. С. 122.
7. Головина Т.Г., Константинова А.Ф. Оптическая активность в одноосных кристаллах при наличии антисимметричной части псевдотензора гирации. // II Международная научная Интернет-конференция «На стыке наук. Физико-химическая серия», Казань, 28 января 2014. Сб. тез. Т. 1. С. 103–106.
8. Дудка А.П., Константинова А.Ф., Головина Т.Г. Оптическая активность в ромбическом кристалле α - HfO_3 . // Труды XVII Международного симпозиума "Порядок, беспорядок и свойства оксидов (ОДРО-17)", 5–10 сентября 2014 г., г. Ростов-на-Дону – п. Южный. С. 161–164.

9. Дудка А.П., Головина Т.Г., Милль Б.В., Константинова А.Ф. Структурная основа оптической активности некоторых одноосных и двуосных кристаллов. // XXXIII научные чтения им. академика Н.В. Белова, Нижний Новгород, 16–17 декабря 2014. С. 30–32.
10. Konstantinova A.F., Golovina T.G., Evdishchenko E.A., Konstantinov K.K. Possible Variants of Optical Axes in Absorbing Crystals. // International scientific conference "Optics of crystals", September 23–26, 2014, Mozyr, Belarus. Book of abstracts. P. 118–119.
11. Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Дудка А.П., Милль Б.В. Оценка показателей преломления и вращения плоскости поляризации света в кристаллах семейства лангасита. Тезисы VI Международной конференции «Кристаллофизика и деформационное поведение перспективных материалов». 25–28 мая 2015, Москва, МИСиС, С. 99.
12. Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Набатов Б.В., Дудка А.П., Милль Б.В. Оценка некоторых оптических свойств кристаллов семейства лангасита. // XVIII междисциплинарный, международный симпозиум "Порядок, беспорядок и свойства оксидов (ОДРО-18)", 5–10 сентября 2015, г. Ростов-на-Дону – п. Южный. С. 98–101.
13. Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Евдищенко Е.А., Константинов К.К. Оптическая активность в одноосных кристаллах примитивных, аксиальных и планальных классов. // XIX междисциплинарный, международный симпозиум "Порядок, беспорядок и свойства оксидов (ОДРО-19)", 5–10 сентября 2016, г. Ростов-на-Дону – п. Южный. С. 75–78.
14. Константинова А.Ф., Головина Т.Г., Константинов К.К., Евдищенко Е.А. Необычные случаи проявления оптической активности в одноосных кристаллах. // IV Международная научная конференция "Проблемы взаимодействия излучения с веществом", 9–11 ноября 2016 г., Гомель, Беларусь. Сб. тез. Ч. 1. С. 37–41.
15. Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Евдищенко Е.А., Константинов К.К. Антисимметричная часть тензора гирации в одноосных и двуосных кристаллах. // Первый Российский кристаллографический конгресс, 21–26 ноября 2016 г., Москва. Сб. тез. С. 67.
16. Головина Т.Г., Константинова А.Ф., Набатов Б.В., Дудка А.П., Милль Б.В. Зависимость оптической активности от двупреломления в кристаллах семейства лангасита. // Первый Российский кристаллографический конгресс, 21–26 ноября 2016 г., Москва. Сб. тез. С. 67.