

А К А Д Е М И Я Н А У К С С С Р
С И Б И Р С К О Е О Т Д Е Л Е Н И Е
И Н С Т И Т У Т Ф И З И К И и м . Л . В . К И Р Е Н С К О Г О

Препринт ИФСО-162Ф

В.И.Рубайло, Е.М.Аверьянов

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕПРИВОДИМЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ТЕНЗОРОВ
ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ СВЯЗИ МЕЖДУ МИКРО- И МАКРО-
СКОПИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД,

Красноярск

1981

065(02)Б

УДК 548.0 : 532.783

А Н Н О Т А Ц И Я

В работе подробно рассмотрено разложение декартовых тензоров общего вида ранга $n \leq 4$ на неприводимые сферические компоненты. Установлена связь между анизотропными макроскопическими свойствами нематических жидких кристаллов с микроскопическими анизотропными свойствами молекул и их ориентационным порядком.

Ответственный за выпуск Е.М.Аверьянов

© Институт физики СО АН СССР, г.Красноярск, 1984г.

СО Д Е Р Ж А Н И Е

	Стр.
Введение	4
§ 1. Разложение декартового тензора произвольного ранга по неприводимым тензорам в сферической форме ...	7
§ 2. Перестановка индексов	22
§ 3. Обратное преобразование. Усреднение тензорных величин в случае симметрии, соответствующей нематическим жидким кристаллам	29
§ 4. Литература	35

Описание физических свойств анизотропной среды требует использования тензоров. Тензоры необходимы не только для характеристики физических величин, таких как электрическая поляризация P , электрическое поле E , деформация ϵ , напряжение e ; и т.д., но и для определения внутренних свойств среды.

Таковыми свойствами являются диэлектрическая восприимчивость χ , пьезо-электрический тензор d , тензор упругости C , тензор $\chi^{(n)}$ восприимчивости n -го порядка. Эти тензоры определены отношениями, которые обычно выражены в декартовой системе отсчета следующим образом:

$$\begin{cases} P_i = \chi_{ij} E_j + \chi_{ijk}^{(2)} E_j E_k + \chi_{ijkl}^{(3)} E_j E_k E_l + \dots \\ P_i = d_{ijke} \epsilon_{jke} + \dots \\ \epsilon_{ij} = C_{ijke} e_{ke} + \dots \end{cases} \quad (I)$$

Тензорные компоненты, включенные в уравнение (I) зависят от ориентации системы координат, но сами соотношения являются неизменными по форме относительно любого изменения системы отсчета. В случае изотропной среды выбор системы отсчета не существен. При рассмотрении макроскопических эффектов, связанных с анизотропией среды, требуется усреднение микроскопических величин по возможным ориентациям структурных единиц, что весьма затруднительно в декартовом формализме, ввиду зависимости значений тензорных компонент от ориентации системы координат. Эти трудности в значительной мере могут быть устранены при помощи разложения тензоров различных рангов на неприводимые тензоры относительно непрерывной группы вращений. Рассмотрению разложений тензоров произвольного ранга на неприводимые представления в сфери-

Таблица I.

Спектр разложения тензоров до ранга 4

ранг	объединяемые физические индексы	физический пример	К-во компонент	Спектр разложения					
				(вес)	0	1	2	3	4
				1	3	5	7	9	
				наз-ва-ние	скаляр	вектор	девиатор	септор	ноттор
1	i	Спонтанная поляризация	3	-	1	-	-	-	-
2	ij (ij)	Общий случай	9	1	1	1	-	-	-
		Напряжение и деформация	6	1	-	1	-	-	-
3	ijk $i(jk)$	общий случай	27	1	3	2	1	-	-
		Генерация второй гармоники или пьезо-электрический эффект	18	-	2	1	1	-	-
4	$ijkl$ $ij(kl)$ (ij)(kl) $i(jkl)$ (ij)(kl) ($ijkl$)	Общий случай	81	3	6	6	3	1	-
		Фото-упругий эффект	54	2	3	4	2	1	-
		Эффект Керра	36	2	1	3	1	1	-
		Генерация третьей гармоники	30	1	1	2	1	1	-
		Упругость	21	2	-	2	-	1	-
($ijkl$)	Соотношения Коши	15	1	-	1	-	1	-	

ческой форме и посвящена данная работа.

Следует отметить, что вид этих разложений и количество независимых компонент в нем зависит как от симметрии исследуемого тензора, так и от симметрии структурных единиц описываемой системы. В таблице I приведены конкретные примеры, связанные с симметрией тензора относительно перестановки различных индексов (перестановочные индексы взяты в скобки).

Ниже изложена процедура построения неприводимого представления в сферической форме для тензоров произвольного ранга. Затем проанализирован ряд частных случаев симметрии исследуемых тензоров относительно перестановки отдельных индексов, а также симметрии рассматриваемой структурной единицы.

Данный подход позволяет получать уравнения, связывающие анизотропные макроскопические свойства системы с микроскопическими анизотропными свойствами структурных единиц. Подробно рассмотрен частный случай макро-симметрии, соответствующей нематическому жидкому кристаллу (НЖК).

§ 1. РАЗЛОЖЕНИЕ ДЕКАРТОВОГО ТЕНЗОРА ПРОИЗВОЛЬНОГО РАНГА ПО НЕПРИВОДИМЫМ ТЕНЗОРАМ В СФЕРИЧЕСКОЙ ФОРМЕ

Как известно, использование тензоров в декартовой форме при изучении свойств, связанных с вращением системы координат весьма затруднительно. Это связано с тем, что компоненты тензора в новой системе координат выражаются через все компоненты тензора в старой системе по закону [1]

$$t_{\alpha' \beta' \gamma' \dots} = \sum_{\alpha \beta \gamma \dots} \cos \theta_{\alpha \alpha'} \cos \theta_{\beta \beta'} \dots t_{\alpha \beta \gamma \dots} \quad (1.1)$$

где $\theta_{\alpha \alpha'}$ - угол между α -осью старой системы \mathcal{L} и α' -осью новой \mathcal{L}' .

Ясно, что с возрастанием ранга тензора выкладки такого сорта будут чрезвычайно громоздки.

Использование сферических тензоров имеет в этом случае то существенное преимущество, что компоненты с различным весом при преобразовании координат не преобразуются друг через друга и в уравнениях, аналогичных (1.1), количество суммируемых членов резко уменьшается.

Рассмотрим вопрос о построении преобразования тензора любого ранга в сферические тензоры. Такое построение удобно изобразить в виде двух ступенчатого процесса. Сначала строим сферические тензоры, опираясь на компоненты тензора в циклических координатах, а затем используем выражение циклических компонент через декартовы. Последний переход осуществляется по формуле:

$$t_{\alpha \beta \gamma} = \sum_{ijk} U_{\alpha i} U_{\beta j} U_{\gamma k} \dots t_{ijk} \dots \quad (1.2)$$

где матрица U имеет вид:

$$U = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

Рассмотрим процедуру построения компонент сферических тензоров. Согласно теории неприводимых представлений непрерывной группы вращений [2], тензорное представление любого ранга может быть построено последовательным произведением представлений веса 1.

Условно это можно записать так:

$$R_1 - \text{представление веса } l=1 \quad ;$$

$$R_1 \otimes R_1 \rightarrow R_2 - \text{представление веса } l=2 \quad ;$$

$$R_1 \otimes R_2 \rightarrow R_3 - \text{представление веса } l=3 \quad ;$$

$$\text{и вообще } R_1 \otimes R_l \rightarrow R_{l+1}$$

Так, например, в случае тензора ранга 1 (векторные величины) для построения нужна только матрица U и компоненты T_α , таковы:

$$T_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-T_x + iT_y); T_0 = T_z; T_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(T_x + iT_y) \quad (1.4)$$

Случай тензоров 2-го ранга подробно разобран в [3].

Формула перехода в этом случае имеет вид:

$$T_m^l = \sum_{\alpha, \beta} \delta_{m, \alpha+\beta} C_{l\alpha l\beta}^{lm} t_{\alpha\beta} \quad (1.5)$$

Согласно вышесказанному такое преобразование может быть записано следующим образом:

$$T_m^l = \sum_{\alpha, \beta} \delta_{m, \alpha+\beta} C_{l\alpha l\beta}^{lm} T_\alpha T_\beta = \sum_{\alpha, \beta} \delta_{m, \alpha+\beta} C_{l\beta l\alpha}^{lm} T_\beta T_\alpha \quad (1.6)$$

$C_{l\alpha l\beta}^{lm}$ - коэффициенты Клебша-Гордона.

Здесь принято $t_{\alpha\beta} \doteq T_\alpha T_\beta$ (например $t_{-1,1} \doteq T_{-1} T_1$),

Опираясь на формулу (1.6), мы можем аналогично построить представление для тензора третьего ранга:

$$T_m^{l(i)} = \sum_{\alpha, \beta} \delta_{m, \alpha+\beta} C_{l\beta l\alpha}^{lm} T_\beta^i T_\alpha \quad (1.7)$$

Теперь $R_1 \otimes R_3 \rightarrow R_4$, откуда последовательно получаем

для тензора четвертого ранга:

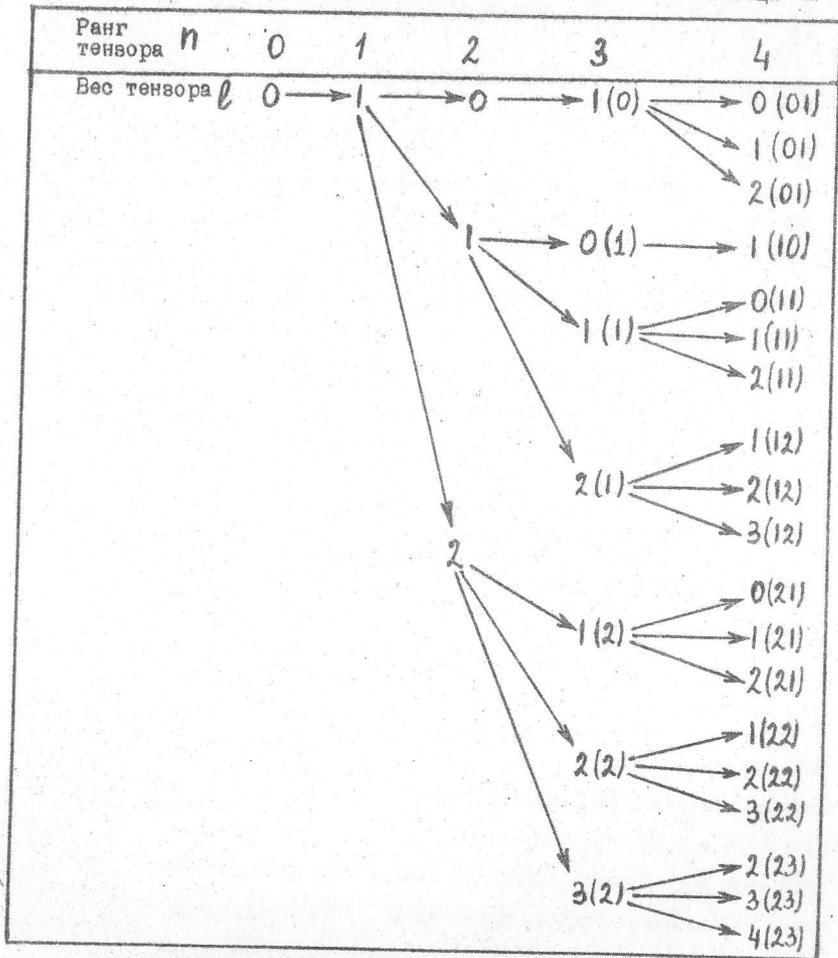
$$T_m^{l(ij)} = \sum_{\alpha, \beta} \delta_{m, \alpha+\beta} C_{j\beta l\alpha}^{lm} T_\beta^{j(i)} T_\alpha \quad (1.8)$$

Формулы (1.6 - 1.8) носят рекуррентный характер, ввиду выбранного метода построения, то есть для тензора произвольного ранга можно написать:

$$T_m^{l(i...j^k)} = \sum_{\alpha, \beta} \delta_{m, \alpha+\beta} C_{k\beta l\alpha}^{lm} T_\beta^{k(i...j)} T_\alpha \quad (1.9)$$

Индексы, втятые в скобки, согласно [4], будем называть индексами старшинства. Появление их связано с тем, что в разложении (1.7 - 1.9) тензоры одного веса l могут встречаться несколько раз. Такое разложение называется кратным неприводимому и, согласно теории, единственно. Чтобы нагляднее был виден смысл индексов старшинства, нарисуем схему получения представления (табл. 2)

Таблица 2



Отсюда видно, например, что для тензора ранга 4 кратность сепаратного представления (вес 3) будет равна трем.

С учетом этой схемы и формул (1.5)-(1.7) легко получить явные выражения сферических компонент тензора. Вычислим, например, компоненту $T_0^{2(12)}$ тензора четвертого ранга:

$$\begin{aligned}
 T_0^{2(12)} &= \sum_{\alpha, \beta} \delta_{0, \alpha + \beta} C_{2\beta 1\alpha}^{2(1)} T_\beta^{2(1)} T_\alpha = -\frac{1}{\sqrt{2}} T_1 T_{-1}^{2(1)} + \frac{1}{\sqrt{2}} T_{-1} T_1^{2(1)} = (1.10) \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} T_1 \sum_{\alpha, \beta} \delta_{-1, \alpha + \beta} C_{1\beta 1\alpha}^{2(1)} T_\beta^{2(1)} T_\alpha + \frac{1}{\sqrt{2}} T_{-1} \sum_{\alpha, \beta} \delta_{1, \alpha + \beta} C_{1\beta 1\alpha}^{2(1)} T_\beta^{2(1)} T_\alpha = \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} T_1 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} T_0 T_{-1}' + \frac{1}{\sqrt{2}} T_{-1} T_0' \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} T_{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} T_1 T_0' + \frac{1}{\sqrt{2}} T_0 T_1' \right) = \\
 &= -\frac{1}{2} (T_1 T_0 \sum_{\alpha, \beta} \delta_{-1, \beta + \alpha} C_{1\alpha 1\beta}^{1(1)} T_\alpha T_\beta + T_1 T_{-1} \sum_{\alpha, \beta} \delta_{0, \alpha + \beta} C_{1\alpha 1\beta}^{1(0)} T_\alpha T_\beta) + \\
 &+ \frac{1}{2} (T_{-1} T_1 \sum_{\alpha, \beta} \delta_{0, \alpha + \beta} C_{1\alpha 1\beta}^{1(0)} T_\alpha T_\beta + T_{-1} T_0 \sum_{\alpha, \beta} \delta_{1, \alpha + \beta} C_{1\alpha 1\beta}^{1(1)} T_\alpha T_\beta) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{8}} (-T_1 T_0 T_0 T_{-1} + T_1 T_0 T_{-1} T_0 - T_1 T_{-1} T_1 T_{-1} + T_1 T_{-1} T_{-1} T_1 + \\
 &+ T_{-1} T_1 T_1 T_{-1} - T_{-1} T_1 T_{-1} T_1 + T_{-1} T_0 T_1 T_0 - T_{-1} T_0 T_0 T_1) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{8}} (-t_{100-1} + t_{10-10} + t_{1-1-11} - t_{1-11-1} + t_{-111-1} - t_{-11-11} + t_{-1010} - t_{-1001}).
 \end{aligned}$$

Во избежании путаницы индекс α во всех выкладках ставится первым. Далее с помощью формулы (1.2) остается перейти от циклических компонент к декартовым. Обратный переход - от декартовых компонент к сферическим, а именно он и нужен будет нам впоследствии, затруднений не вызывает. Ведь матрица прямого перехода является унитарной, то есть обратная - просто сопряженная и транспонированная.

Итак, для тензора 2-го ранга получаем:

$$T_{-2}^2 = \frac{1}{2}(t_{xx} - t_{yy}) + \frac{i}{2}(t_{xy} + t_{yx})$$

$$T_{-1}^2 = \frac{1}{2}(t_{xz} + t_{zx}) + \frac{i}{2}(t_{yz} + t_{zy}) \quad (1.11)$$

$$T_0^2 = \frac{1}{\sqrt{6}}(2t_{zz} - t_{xx} - t_{yy})$$

$$T_1^2 = -T_{-1}^{2*}; \quad T_2^2 = T_{-2}^{2*}$$

$$T_{-1}^1 = \frac{1}{2}(t_{zx} - t_{xz}) + \frac{i}{2}(t_{zy} - t_{yz})$$

$$T_0^1 = \frac{i}{\sqrt{2}}(t_{yx} - t_{xy})$$

$$T_1^1 = T_{-1}^{1*}$$

$$T_0^0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}(t_{xx} + t_{yy} + t_{zz})$$

Для тензора 3-го ранга получаем:

а) септорная часть

$$T_{-3}^{3(2)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}[t_{xxx} - t_{xyy} - t_{yxy} - t_{yyx} + i(t_{xxy} + t_{xyx} + t_{yxx} - t_{yyy})]$$

$$T_{-2}^{3(2)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}[t_{xxz} + t_{xzx} - t_{zxx} - t_{yyz} - t_{yzy} - t_{zyy} + i(t_{xyz} + t_{xzy} + t_{zxy} + t_{yxz} + t_{yzx} + t_{zyx})] \quad (1.12)$$

$$T_{-1}^{3(2)} = \frac{1}{2\sqrt{30}}[4(t_{xzz} + t_{zxx} - t_{zzx}) - 3t_{xxx} - t_{yxx} - t_{xyx} - t_{xyy} + 4i(t_{yzz} + t_{zyz} + t_{zzy}) - i(3t_{yyy} + t_{xyy} + t_{yxx} + t_{yxx})]$$

$$T_0^{3(2)} = \frac{1}{\sqrt{10}}[2t_{zzz} - t_{xxz} - t_{xzx} - t_{zxx} - t_{yyz} - t_{yzy} - t_{zyy}]$$

$$T_3^3 = -T_{-3}^{3*}; \quad T_2^3 = T_{-2}^{3*}; \quad T_1^3 = -T_{-1}^{3*}$$

б) две псевдо-девиаторные части ($\ell = 2$)

$$T_{-2}^{2(2)} = \frac{1}{\sqrt{24}}[t_{xxz} + t_{xzx} - t_{zxx} - t_{yyz} - t_{yzy} - t_{zyy} + i(t_{xyz} + t_{xzy} - t_{zxy} + t_{yxz} - t_{zyx} - t_{zyx})]$$

$$T_{-1}^{2(2)} = \frac{1}{\sqrt{24}}[t_{yxx} + t_{xyx} - t_{xyy} - t_{xzz} - t_{zxx} - t_{zxx} + i(t_{xxy} + t_{xyx} - t_{yxx} - t_{yzz} - t_{zyz} - t_{zyz})] \quad (1.13)$$

$$T_0^{2(2)} = \frac{i}{2}[t_{xyx} - t_{yxz} + t_{xzy} - t_{yzx}]$$

$$T_{-2}^{2(1)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}[t_{xzx} - t_{xxz} + t_{yyz} - t_{yzy} + i(t_{xzy} - t_{xyx} + t_{yzx} - t_{yxz})]$$

$$T_{-1}^{2(1)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}[t_{yxy} - t_{yyx} + t_{zxx} - t_{zxx} + i(t_{zzy} - t_{zyz} + t_{xyx} - t_{xxy})] \quad (1.14)$$

$$T_0^{2(1)} = \frac{i}{\sqrt{12}}[t_{xyx} - t_{yxz} + t_{yzx} - t_{xzy} + 2t_{zyx} - 2t_{zxy}]$$

Оставшиеся компоненты связаны соотношением:

$$T_2^{2(i)} = -T_{-2}^{2(i)*}; \quad T_1^{2(i)} = T_{-1}^{2(i)*} \quad (1.15)$$

в) три векторные части ($\ell = 1$)

$$T_{-1}^{1(2)} = \frac{1}{2\sqrt{30}}[2t_{xzz} - 3t_{zxx} - 3t_{zxx} - 4t_{xxx} - 3t_{yyx} - 3t_{yxy} + 2t_{xyy} + i(2t_{yzz} - 3t_{zyz} - 3t_{zyz} - 4t_{yyy} + 2t_{yxx} - 3t_{xyx} - 3t_{xxy})] \quad (1.16)$$

$$T_0^{1(2)} = \frac{1}{2\sqrt{15}}[2t_{zxx} + 2t_{zyy} - 3t_{xzx} - 3t_{xxz} - 3t_{yyz} - 3t_{zyz} - 4t_{zzz}]$$

$$T_{-1}^{1(1)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}[t_{yxy} - t_{yyx} + t_{zxx} - t_{zxx} + i(t_{xyx} - t_{xxy} + t_{zyz} - t_{zzy})] \quad (1.17)$$

$$T_0^{1(1)} = \frac{1}{2}[t_{xzx} - t_{xxz} + t_{yzy} - t_{yyz}]$$

$$T_{-1}^{1(0)} = \frac{-1}{\sqrt{6}}[t_{xxx} + t_{xyy} + t_{xzz} + i(t_{yyy} + t_{yxx} + t_{yzz})] \quad (1.18)$$

$$T_0^{1(0)} = \frac{-1}{\sqrt{3}}[t_{zxx} + t_{zyy} + t_{zzz}]$$

$$+i(h+h+h+3h-h-h-h) + 4i(3h-h-h-h)$$

$$H_0^{3(23)} = \frac{-i}{2\sqrt{30}} [h-h+h-h+h-h+3h-3h+4(h-h+h-h-h+h-h)]$$

$$H_{-3}^{3(22)} = \frac{1}{\sqrt{48}} [h-h-2h+2h-h-h+2h-h-h+2h-h-h+h+i(2h-h-h-2h+h+h-2h+h+h-2h+h+h)]$$

$$H_{-2}^{3(22)} = \frac{1}{2\sqrt{18}} [h+h-2h+2h-h-h+2h-h-h+h+h-2h+2h-h-h+h+h-2h+i(h+h-2h+h+h-2h+2h+2h-h-h-2h+h+h-2h+h+h)]$$

$$H_{-1}^{3(22)} = \frac{1}{2\sqrt{180}} [2h-h-h+5h+5h+2h+2h-7h-7h+h+h-h-2h+4h+4h-8h+8h-4h-4h+i(5h+5h+2h+2h-7h-7h+h+h-2h+2h-h-h+4h+4h-8h+8h-4h-4h)]$$

$$H_0^{3(22)} = \frac{i}{\sqrt{60}} [2h-h-h+h+h-2h+2h-h-h+h+h-2h+3h-3h+3h-3h]$$

$$H_{-3}^{3(12)} = \frac{1}{4} [h-h+h-h+h-h+h-h+i(h-h+h-h+h-h-h)]$$

$$H_{-2}^{3(12)} = \frac{1}{2\sqrt{6}} [h-h+h-h+h-h+h-h+h-h+h-h+i(h-h+h-h+h-h+h-h+h-h)]$$

$$H_{-1}^{3(12)} = \frac{1}{2\sqrt{60}} [h-h+3h-3h+h-h+h-h+4(h-h+h-h-h+h-h)+i(h-h+h-h+3h-3h+h-h-h+h-h+4h-4h+4h-4h)]$$

$$H_0^{3(12)} = \frac{i}{\sqrt{20}} [h-h+h-h+h-h+h-h+h-h+h-h+2h-2h]$$

Невыписанные компоненты подчиняются соотношениям:

$$H_3^{3(ij)} = H_{-3}^{3(ij)*}; H_2^{3(ij)} = -H_{-2}^{3(ij)}; H_1^{3(ij)} = H_{-1}^{3(ij)}$$

в) шесть девятиорных частей ($\ell = 2$):

$$H_{-2}^{2(23)} = \frac{1}{\sqrt{1260}} [9h-9h+7(h+h+h-h-h-h)+2(h+h+h-h-h-h)-5(h+h+h-h-h-h)+2i(h+h+h+h+h+3h+3h-4h-4h-4h-4h-4h-4h)-5i(h+h+h+h+h+h+h)]$$

$$H_{-1}^{2(23)} = \frac{1}{\sqrt{1260}} [6h+6h-8(h+h+h+h+h)+2(h+h+h+h+h)-5(h+h+h+h+h)+2i(h+h+h+h+h+3h+3h)-8i(h+h+h+h+h)-5i(h+h+h+h+h)]$$

$$H_0^{2(23)} = \frac{1}{\sqrt{210}} [3h+3h+h+h+h+h+h+h-6h-4(h+h+h+h+h+h+h)+3(h+h+h+h+h+h+h)]$$

$$H_{-2}^{2(22)} = \frac{1}{12} [2h-2h+h-h+h-h+4h-4h+2h-2h+2h-2h+2h-h-h-2h+h+h+i(h+h-2h+h+h-2h+4h+4h-2h-2h-h-h-2h-2h-2h-h-h+2h+2h)]$$

(I.28)

$$H_{-1}^{2(21)} = \frac{1}{12} [h+h-2h+h+h-2h+4h+4h+2h+2h-2h-2h-2h-2h-h-h-h-h+i(h+h-2h+h+h-2h+4h+4h+2h+2h-2h-2h-2h-2h-h-h-h-h)]$$

$$H_0^{2(22)} = \frac{1}{\sqrt{24}} [h+h-2h+h+h-2h+2h-h-h+2h-h-h]$$

$$H_{-2}^{2(11)} = \frac{1}{4} [h-h+h-h+h-h+h-h+i(h+h-h-h+h-h-h)]$$

$$H_{-1}^{2(11)} = \frac{1}{4} [h-h+h-h+h-h+h-h+i(h-h+h-h+h-h-h)]$$

(I.29)

$$H_0^{2(11)} = \frac{1}{\sqrt{24}} [h+h-h-h+h-h+2h-2h+h-h+2h-2h]$$

$$H_{-2}^{2(12)} = \frac{1}{\sqrt{48}} [h-h+h-h+2h-2h+h-h+2h-2h+h-h+h+i(h-h+h-h+2h-2h+h-h+2h-2h+h-h)]$$

$$H_{-1}^{2(12)} = \frac{1}{\sqrt{48}} [h-h+h-h+2h-2h+h-h+h-h+2h-2h+i(h-h+2h-2h-h-h+2h-2h+h-h-h)]$$

(I.30)

$$H_0^{2(12)} = \frac{1}{\sqrt{8}} [h-h+h-h+h-h+h-h]$$

$$H_{-2}^{2(21)} = \frac{1}{2\sqrt{240}} [4h-4h+2h-2h+3h-3h+3h-3h+2h-2h+3h-3h+3h-3h+i(2h+2h-3h-3h-3h-3h-4h-4h+2h+2h-3h-3h-3h-3h)]$$

$$H_{-1}^{2(21)} = \frac{1}{\sqrt{240}} [2h+2h-4h-4h+2h+2h-3h-3h-3h-3h-3h-3h-3h-3h+i(2h+2h+2h+2h-3h-3h-3h-3h-3h-3h-3h-3h-3h-4h-4h)]$$

(I.31)

$$H_0^{2(21)} = \frac{1}{6\sqrt{10}} [4h+4h-2h-2h+3h+3h+3h+3h+4h+4h-2h-2h+3h+3h+3h-6h-6h-6h-6h-8h]$$

$$H_{-2}^{2(01)} = \frac{1}{\sqrt{12}} [h-h+h-h-h+h-h+i(h+h+h+h+h+h)]$$

$$H_{-1}^{2(01)} = \frac{1}{\sqrt{12}} [h+h+h+h+h+h+i(h+h+h+h+h+h)]$$

(I.32)

$$H_0^{2(01)} = \frac{1}{\sqrt{18}} [h+h+h+h+h+h-2h-2h]$$

Как отмечалось выше, формулы обратного перехода получаются просто в силу унитарности данного преобразования. Например: возьмем компоненту t_{xy} - тензора второго ранга. В формулах (I. II) она встречается в T_{-2}^2, T_2^2, T_0^2 соответственно с коэффициентами $1/2; -1/2; -1/\sqrt{2}$, ввиду унитарности имеем:

$$t_{xy} = \frac{1}{2} T_{-2}^2 - \frac{1}{2} T_2^2 + \frac{1}{\sqrt{2}} T_0^2$$

то есть коэффициенты обратного преобразования равны соответствующим сопряженным коэффициентам прямого преобразования. К

примеру, компонента t_{zzx} - тензора третьего ранга входит в $T_{-1}^3, T_1^3, T_{-1}^2, T_1^2, T_{-1}^2, T_1^2, T_{-1}^1, T_1^1, T_{-1}^1, T_1^1, T_{-1}^1, T_1^1$ соответственно с коэффициентами $2/\sqrt{30}; -2/\sqrt{30}; -1/\sqrt{24}; +1/\sqrt{24}; 1/\sqrt{8}; 1/\sqrt{8}; -3/2\sqrt{30}; 3/2\sqrt{30}; -1/\sqrt{8}; 1/\sqrt{8}$. Откуда:

$$t_{zzx} = \frac{2}{\sqrt{30}} [T_{-1}^3 - T_1^3] - \frac{1}{\sqrt{24}} [T_{-1}^2 + T_1^2] - \frac{3}{2\sqrt{30}} [T_{-1}^1 - T_1^1] + \frac{1}{\sqrt{8}} [T_{-1}^1 + T_1^1 + T_{-1}^1 + T_1^1]$$

Ввиду простоты выкладки и громоздкости записи, формулы обратного преобразования мы приводить не будем, исключая некоторые частные случаи, речь о которых пойдет ниже.

§ 2. Перестановка индексов.

В данном параграфе мы разберем несколько случаев, когда тензор симметричен относительно перестановки определенного числа объединяемых индексов. Необходимость такого рассмотрения вытекает из разнообразия практических применений этих частных случаев (смотри таблицу I).

В этих случаях формулы (I. II) - (I. 43) необходимо трансформировать с тем, чтобы компоненты неприводимых тензоров были инвариантны не только относительно непрерывной группы вращений, но также и относительно группы перестановок объединяемых индексов. Например: возьмем тензор 4-го ранга, симметричный по всем индексам. Если непосредственно учесть перестановку индексов в формулах (I. 21) - (I. 43), то окажется, что псевдо-скалярные и псевдо-векторные части

обратятся в нуль. Ненулевые компоненты следующие:

$$H_m^4; H_m^{2(23)}; H_m^{2(21)}; H_m^{2(01)}; H_0^{0(21)}; H_0^{0(01)}$$

Однако, полученные выражения не будут являться полностью симметричным представлением группы перестановок P_4 . В частности, непосредственно проверкой можно убедиться, что при таком механическом подходе теряется нормировка компонент. Это означает, что преобразование перестает быть унитарным. Поиск обратного преобразования в таком случае становится весьма затруднительным.

Таким образом, возникают следующие вопросы:

1. Какие компоненты не обратятся в нуль при перестановке индексов объединенных в какую-либо группу;
2. Каким образом нужно перенормировать данные выражения в случае симметрии по перестановке группы объединяемых индексов.

Ответ на первый вопрос следует из следующего свойства неприводимых сферических тензоров:

$$\{T^{l_1} \otimes T^{l_2}\}^K = (-1)^{l_1+l_2+K} \{T^{l_2} \otimes T^{l_1}\}^K \quad (2.1)$$

Используя уравнение (2.1) и таблицу (2) легко видеть, что построенные нами преобразования должны подчиняться следующим правилам отбора: для тензора T ранга n , перестановочного по последним

p индексам, исчезающими неприводимыми частями $(\tau = (i_2, i_3 \dots i_{n-1})$ - индекс старшинства) будут те, у которых i_{2p} - четное, а i_{2p-1} - нечетное. Например, если H_{ijklm} тензор 4-го ранга симметричный по перестановке (jkm) , то необходимо i_2 - четное, i_3 - нечетное. Поэтому ненулевыми компонентами будут: $H_m^4; H_m^{3(23)}; H_m^{2(23)}; H_m^{2(21)}; H_m^{2(01)}; H_m^{1(21)}; H_m^{1(01)}; H_0^{0(01)}; H_0^{0(01)}$. В случае симметричного по всем индексам тензора ненулевыми будут те компоненты, у которых i_2 - четное, i_3 - нечетное и l - чет-

ное - эти компоненты уже указывались выше. Эти два частных случая будут, в основном, интересовать нас в дальнейшем.

Вопрос о перенормировке решений достаточно подробно изучался в статье [4] на примере полностью симметричного тензора. Основная идея заключается в том, что в процессе симметризации по группе индексов должна сохраняться норма тензора в целом. Не вдаваясь в подробности теоретического обоснования выкладок, мы здесь опишем практическую процедуру вычислений для двух частных случаев.

Рассмотрим тензор четвертого ранга H_{ijkl} , перестановочный по всем индексам. Как уже отмечалось, в этом случае наблюдается пропорциональность ряда сферических компонент. А именно:

$$H_m^{2(23)}/H_m^{2(21)} = \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{28}} = K_1; \quad H_m^{2(23)}/H_m^{2(01)} = \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{35}} = K_2 \quad (2.2)$$

$$H_0^{0(21)}/H_0^{0(01)} = \frac{2}{\sqrt{5}} = K \quad (2.3)$$

Пусть $\delta(n)$ оператор симметризации тензора n -го ранга. Тогда, как показано в работе [4], действие этого оператора на сферическую компоненту приводит к следующему:

$$\delta(n)T_m^{\ell(\tau)} = \lambda_{\tau}^{\ell n} S_m^{\ell} \quad (2.4)$$

где S_m^{ℓ} - искомое симметризованное решение. При этом должно выполняться условие нормировки:

$$\sum_{\tau} |\lambda_{\tau}^{\ell n}|^2 = 1 \quad (2.5)$$

Выполнение условия (2.5) как раз и гарантирует сохранение нормы тензора. Применительно к девиаторным компонентам это даёт в нашем случае:

$$\delta(4)H_m^{2(23)} = \lambda_{23}^{24} S_m^2; \quad \delta(4)H_m^{2(21)} = \lambda_{21}^{24} S_m^2; \quad \delta(4)H_m^{2(01)} = \lambda_{01}^{24} S_m^2 \quad (2.6)$$

При этом

$$|\lambda_{23}^{24}|^2 + |\lambda_{21}^{24}|^2 + |\lambda_{01}^{24}|^2 = 1 \quad (2.7)$$

Заметим, что из (2.2) и (2.6) следует, что

$$\lambda_{21}^{24} = \lambda_{23}^{24}/K_1; \quad \lambda_{01}^{24} = \lambda_{23}^{24}/K_2 \quad (2.8)$$

Учитывая это и используя (2.7), получаем $|\lambda_{23}^{24}|^2 = \frac{3}{10}$. Ясно, что при такой процедуре подсчета нельзя определить знак $\lambda_{\tau}^{\ell n}$. Однако в рассматриваемых нами частных случаях $\lambda_{\tau}^{\ell n}$ имеет знак "+". Таким образом, нужный нам симметричный тензор получается так:

$$S_m^{\ell} = \delta(n)H_m^{\ell(\tau)}/\lambda_{\tau}^{\ell n} \quad (2.9)$$

Итак, чтобы получить решение в случае симметричного по всем индексам тензора, нужно выбрать зависимые компоненты одного веса и перенормировать их согласно вышеизложенному. Независимые же компоненты в такой процедуре не нужны, так как сами уже являются нормированными. Таким образом, для симметричного по всем индексам тензора получаем:

$$S_{-4}^4 = \frac{1}{4} [h_{xxxx} + h_{yyyy} - 6h_{xxyy} + 4i(h_{xxxy} - h_{xyyy})]$$

$$S_{-3}^4 = \frac{1}{\sqrt{2}} [h_{xxxz} - 3h_{xyyz} + i(3h_{xxyz} - h_{yyyz})]$$

$$S_{-2}^4 = \frac{1}{\sqrt{28}} [h_{yyyy} - h_{xxxx} + 6(h_{xxzz} - h_{yyzz}) + 2i(6h_{xyzz} - h_{xxxy} - h_{xyyy})] \quad (2.10)$$

$$S_{-1}^4 = \frac{1}{\sqrt{14}} [4h_{xzzz} - 3h_{xxxx} - 3h_{xyyz} + i(4h_{yzzz} - 3h_{xxyz})]$$

$$S_0^4 = \frac{1}{\sqrt{280}} [8h_{zzzz} + 3h_{xxxx} + 3h_{yyyy} + 6h_{xxyy} - 24h_{xxzz} - 24h_{yyzz}]$$

$$S_4^4 = S_{-4}^{4*}; \quad S_3^4 = -S_{-3}^{4*}; \quad S_2^4 = -S_{-2}^{4*}; \quad S_1^4 = -S_{-1}^{4*}$$

$$S_{-2}^2 = \sqrt{\frac{3}{4}} [h_{\text{yyyy}} - h_{\text{xxxx}} - h_{\text{xxzz}} + h_{\text{yyzz}} - 2i(h_{\text{xxxy}} + h_{\text{xyyy}} + h_{\text{xyzz}})]$$

$$S_{-1}^2 = -\sqrt{\frac{6}{7}} [h_{\text{xxxz}} + h_{\text{zzzz}} + h_{\text{xyyz}} + i(h_{\text{xyyz}} + h_{\text{zzzy}})] \quad (2.11)$$

$$S_0^2 = \frac{1}{\sqrt{7}} [h_{\text{xxxx}} + h_{\text{yyyy}} - 2h_{\text{zzzz}} + 2h_{\text{xxyy}} - h_{\text{xxzz}} - h_{\text{yyzz}}]$$

$$S_2^2 = S_{-2}^{2*}; \quad S_1^2 = -S_{-1}^2$$

$$S_0^0 = \frac{1}{\sqrt{5}} [h_{\text{xxxx}} + h_{\text{yyyy}} + h_{\text{zzzz}} + 2h_{\text{xxyy}} + 2h_{\text{xxzz}} + 2h_{\text{yyzz}}] \quad (2.12)$$

Отметим, что решение здесь нормированы не в обычном смысле, а с учетом вырождения. Например:

$$\|S_0^0\|^2 = \frac{1}{5} (1+1+1 + \frac{2^2}{6} + \frac{2^2}{6} + \frac{2^2}{6}) = 1$$

Здесь учтено, что компоненты h_{xxyy} , h_{xxzz} и h_{yyzz} - шестикратно вырождены, что и отражено при вычислении норм.

Перейдем теперь к случаю тензора четвертого ранга, симметричного по последним трем индексам. Построение решения в этом случае полностью аналогично предыдущему. С помощью формул (1.21) - (1.43), а также (2.4) и (2.5) легко получить:

$$F_{-4}^4 = \frac{1}{4} [h_{\text{xxxx}} + h_{\text{yyyy}} - 3h_{\text{xxyy}} - 3h_{\text{yyxx}} + i(3h_{\text{xxxy}} + h_{\text{xyxx}} - h_{\text{xyyy}} - 3h_{\text{yyyx}})]$$

$$F_{-3}^4 = \frac{1}{4\sqrt{2}} [3h_{\text{xxxz}} + h_{\text{zzzz}} - 6h_{\text{xyyz}} - 3h_{\text{zyyy}} + i(6h_{\text{xxyz}} + 3h_{\text{yxxz}} + 3h_{\text{zxxz}} - 3h_{\text{xyyz}} - h_{\text{zyyy}})]$$

$$F_{-2}^4 = \frac{1}{4\sqrt{7}} [2h_{\text{yyyy}} - 2h_{\text{xxxx}} + 6h_{\text{xxzz}} + 6h_{\text{zzxx}} - 6h_{\text{yyzz}} - 6h_{\text{zzyy}} + i(6h_{\text{xyzz}} + 6h_{\text{yxzz}} + 12h_{\text{xyzz}} - 3h_{\text{xxxy}} - h_{\text{xyxx}} - 3h_{\text{yyxy}} - h_{\text{yyyx}})] \quad (2.13)$$

$$F_{-1}^4 = \frac{1}{4\sqrt{14}} [3h_{\text{xxxz}} + 9h_{\text{xxxz}} + 3h_{\text{zxyy}} + 6h_{\text{xyyz}} + 3h_{\text{xyyz}} - 12h_{\text{zzzz}} - 4h_{\text{zzzz}} + i(3h_{\text{zxxz}} + 6h_{\text{zxxz}} + 3h_{\text{xyzz}} - 4h_{\text{xyzz}} - 12h_{\text{xyzz}} + 9h_{\text{xyzz}} + 3h_{\text{xyzz}})]$$

$$F_0^4 = \frac{1}{\sqrt{280}} [3h_{\text{xxxx}} + 3h_{\text{yyyy}} + 8h_{\text{zzzz}} + 3h_{\text{xyyy}} + 3h_{\text{yyxx}} - 12h_{\text{zzxx}} - 12h_{\text{xxzz}} - 12h_{\text{yyzz}} - 12h_{\text{zzyy}}]$$

$$F_{-3}^3 = \frac{3}{4\sqrt{6}} [h_{\text{xxxz}} - h_{\text{zzxx}} + 3h_{\text{zxyy}} - h_{\text{zyyy}} + i(h_{\text{zxyy}} - h_{\text{zyyy}} + 2h_{\text{xyxx}} + h_{\text{xyxx}} - 3h_{\text{zxyy}})]$$

$$F_{-2}^3 = \frac{1}{4} [2(h_{\text{yyxx}} - h_{\text{xyyy}} + h_{\text{xxzz}} - h_{\text{zzxx}} + h_{\text{zyyy}} - h_{\text{yyzz}}) + i(h_{\text{xxxy}} - h_{\text{xyxx}} + h_{\text{xyxx}} - h_{\text{xyxx}} + 2h_{\text{xyxx}} + 2h_{\text{xyxx}} - 4h_{\text{xyxx}})]$$

$$F_{-1}^3 = \frac{1}{4\sqrt{10}} [10h_{\text{xyyz}} - 11h_{\text{xyyz}} + h_{\text{xyyz}} + h_{\text{xyyz}} - h_{\text{xyyz}} + 4h_{\text{xyyz}} - 4h_{\text{xyyz}} + i(10h_{\text{xyyz}} - 11h_{\text{xyyz}} + h_{\text{xyyz}} + h_{\text{xyyz}} - h_{\text{xyyz}} + 4h_{\text{xyyz}} - 4h_{\text{xyyz}})] \quad (2.14)$$

$$F_0^3 = -\frac{3i}{2\sqrt{30}} [h_{\text{xxxy}} - h_{\text{xyxx}} + h_{\text{xyxx}} - h_{\text{xyxx}} + 4h_{\text{xyxx}} - 4h_{\text{xyxx}}]$$

$$F_{-2}^{2(a)} = \frac{3}{\sqrt{60}} [h_{\text{yyyy}} - h_{\text{xxxx}} + h_{\text{yyzz}} - h_{\text{zzyy}} + h_{\text{yyxx}} - h_{\text{xyyy}} - i(h_{\text{xxxy}} + h_{\text{xyxx}} + h_{\text{xyxx}} + h_{\text{xyxx}} + h_{\text{xyxx}})]$$

$$F_{-1}^{2(a)} = \frac{-3}{\sqrt{60}} [h_{\text{xxxz}} + h_{\text{zzxx}} + h_{\text{zxyy}} + h_{\text{zyyy}} + h_{\text{zxyy}} + h_{\text{zyyy}} + i(h_{\text{zxyy}} + h_{\text{zyyy}} + h_{\text{zxyy}} + h_{\text{zyyy}})]$$

$$F_0^{2(a)} = \frac{1}{\sqrt{10}} [h_{\text{xxxx}} + h_{\text{yyyy}} - 2h_{\text{zzzz}} + h_{\text{xxyy}} + h_{\text{yyxx}} - 2h_{\text{zzxx}} - 2h_{\text{zzyy}}] \quad (2.15)$$

$$F_{-2}^{2(p)} = \frac{1}{\sqrt{140}} [3h_{\text{yyyy}} - 3h_{\text{xxxx}} + 7h_{\text{xxyy}} - 7h_{\text{yyxx}} + 2h_{\text{xxzz}} - 2h_{\text{yyzz}} + 5h_{\text{zzxx}} - 5h_{\text{zzyy}} + 2i(h_{\text{xyxx}} + h_{\text{xyxx}} - 4h_{\text{xyxx}} - 4h_{\text{xyxx}} + h_{\text{xyxx}} - 5h_{\text{xyxx}})]$$

$$F_{-1}^{2(p)} = \frac{-1}{\sqrt{35}} [4h_{\text{xxxz}} - h_{\text{zzxx}} + 4h_{\text{zxyy}} - h_{\text{zyyy}} + 5h_{\text{zxyy}} - h_{\text{zyyy}} + i(4h_{\text{zxyy}} - h_{\text{zyyy}} + 4h_{\text{zxyy}} - h_{\text{zyyy}} - h_{\text{zxyy}} - h_{\text{zyyy}})] \quad (2.16)$$

$$F_0^{2(p)} = \frac{3}{\sqrt{210}} [h_{\text{xxxx}} + h_{\text{yyyy}} - 2h_{\text{zzzz}} + h_{\text{xxyy}} + h_{\text{yyxx}} - 4h_{\text{zzxx}} - 4h_{\text{zzyy}} + 3h_{\text{zxyy}} + 3h_{\text{zxyy}}]$$

$$f_{-1}^3 = \frac{3}{\sqrt{60}} [h_{zxxx} - h_{xxxx} + h_{zxxy} - h_{xyyz} + h_{zzzx} - h_{zzzz} + i(h_{zxxy} - h_{yxxx} + h_{zyyz} - h_{yzzz})]$$

$$f_0^3 = \frac{3i}{\sqrt{30}} [h_{yxxx} - h_{xxxy} + h_{yyyz} - h_{yyzy} + h_{yxzz} - h_{xyzz}] \quad (2.17)$$

$$f_0^0 = \frac{1}{\sqrt{5}} [h_{xxxx} + h_{yyyy} + h_{zzzz} + h_{xxyy} + h_{yyxx} + h_{zzxx} + h_{zzyy} + h_{xxzz} + h_{yyzz}] \quad (2.18)$$

Невыписанные компоненты подчиняются соотношению типа (1.22).

Используя формулы (1.12) - (1.20), получим для тензора третьего ранга, симметричного по последним двум индексам, следующие выражения:

$$f_{-3}^3 = \frac{1}{\sqrt{8}} [t_{xxx} - t_{xyy} - 2t_{yyx} + i(2t_{xxy} + t_{yxx} - t_{yyy})] \quad (2.19)$$

$$f_{-2}^3 = \frac{1}{2\sqrt{3}} [2t_{xxz} + t_{zxx} - 2t_{yyz} - t_{zyy} + i(2t_{xyx} + 2t_{zxy} + 2t_{yxz})]$$

$$f_{-1}^3 = \frac{1}{2\sqrt{30}} [4t_{xzz} + 8t_{zxx} - 3t_{xxx} - 2t_{yyx} - t_{xyy} + i(4t_{yzz} + 8t_{zzy} - 3t_{yyy} - 2t_{xxy} - t_{yxz})]$$

$$f_0^3 = \frac{1}{\sqrt{10}} [2t_{zzz} - 2t_{xxz} - 2t_{yyz} - t_{zxx} - t_{zyy}]$$

$$f_{-2}^2 = \frac{1}{\sqrt{6}} [t_{xxz} - t_{zxx} + t_{zyy} - t_{yyz} + i(t_{xyx} + t_{yxx} - 2t_{zxy})]$$

$$f_{-1}^2 = \frac{1}{\sqrt{6}} [t_{yyx} - t_{xyy} + t_{xzz} - t_{zzx} + i(t_{xxy} - t_{yxx} + t_{yzz} - t_{zzy})] \quad (2.20)$$

$$f_0^2 = i(t_{xyz} - t_{yxz})$$

$$f_{-1}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{30}} [t_{xzz} - 3t_{zxx} - 2t_{xxx} + t_{yyx} + i(t_{yzz} - 3t_{zzy} + t_{yxx} - 2t_{xyy})] \quad (2.21)$$

$$f_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{15}} [t_{zxx} + t_{zyy} - 3t_{xxz} - 3t_{yyz} - 2t_{zzz}]$$

$$f_{-1}^{(0)} = -\frac{1}{\sqrt{6}} [t_{xxx} + t_{xyy} + t_{xzz} + i(t_{yyy} + t_{yxx} + t_{yzz})]$$

$$f_0^{(0)} = -\frac{1}{\sqrt{3}} [t_{zxx} + t_{zyy} + t_{zzz}] \quad (2.22)$$

§ 3. Обратное преобразование. Усреднение тензорных величин в случае симметрии, соответствующей нематическим жидким кристаллам.

Переход к макроскопическим характеристикам системы неизбежно связан с усреднением по молекулярным ориентациям микроскопических величин. Преимущество аппарата неприводимых тензоров заключается в том, что при поворотах системы координат компоненты неприводимых тензоров равного веса ℓ не смешиваются между собой, то есть преобразуются по закону [5]:

$$T_m^{\ell(\tau)} = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} D_{mm'}^{\ell(\tau)*}(\varphi, \theta, \psi) T_{m'}^{\ell(\tau)}(x', y', z') \quad (3.1)$$

$$\text{Здесь } D_{mm'}^{\ell(\tau)*}(\varphi, \theta, \psi) = e^{im'\psi} (-1)^{m-m'} d_{m'm}^{\ell}(\theta) e^{im'\varphi} \quad (3.2)$$

- матрица Вигнера. Углы φ, θ, ψ определяют ориентацию системы \mathcal{L}' относительно \mathcal{L} . Выражение для $d_{m'm}^{\ell}(\theta)$ выписаны в [6].

Функция ориентационного молекулярного распределения для нематического ЖК, как показано в [7], может быть представлена в следующем виде:

$$f(\cos\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4n+1}{2} \langle P_{2n} \rangle P_{2n}(\cos\theta) \quad (3.3)$$

Для того, чтобы получить выражения для компонент макроскопического тензора, необходимо выразить соответствующую декартову компоненту через циклические, а потом произвести усреднение по всевозможным ориентациям. Например, в случае произвольного тензора третьего ранга:

$$\langle T_{xxx} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{8}} (\langle T_3^3 \rangle - \langle T_{-3}^3 \rangle) - \frac{3}{2\sqrt{30}} (\langle T_1^3 \rangle - \langle T_{-1}^3 \rangle) + \frac{2}{\sqrt{30}} (\langle T_1^{(2)} \rangle - \langle T_{-1}^{(2)} \rangle) + \frac{1}{\sqrt{6}} (\langle T_1^{(0)} \rangle - \langle T_{-1}^{(0)} \rangle)$$

Воспользуемся формулой (3.1) и (3.2) и учтем, что в случае ЖК

$$\langle D_{mm'}^{(3)*}(\varphi, \theta, \psi) \rangle = 0 \text{ за исключением случая } m = m' = 0.$$

Это замечание сразу даёт $T_{xxx} = 0$ и, вообще, значительно упрощает выкладки. Выпишем результаты подобных вычислений в следующих, интересующих нас случаях:

1. Тензор общего вида четвертого ранга:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_{zzzz} &= \frac{4H_0^4}{\sqrt{70}} \langle P_4 \rangle - \left[\frac{6H_0^{2(23)}}{\sqrt{210}} + \frac{4H_0^{2(21)}}{3\sqrt{10}} - \frac{2H_0^{2(01)}}{\sqrt{18}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{2H_0^{0(21)}}{\sqrt{45}} + \frac{H_0^{0(01)}}{3} \\ \langle H \rangle_{xxyy} &= \frac{H_0^4}{\sqrt{280}} \langle P_4 \rangle + \left[\frac{H_0^{2(23)}}{\sqrt{210}} - \frac{H_0^{2(22)}}{\sqrt{6}} - \frac{H_0^{2(21)}}{3\sqrt{10}} + \frac{H_0^{2(01)}}{\sqrt{18}} \right] \langle P_2 \rangle - \frac{H_0^{0(21)}}{\sqrt{45}} + \frac{H_0^{0(01)}}{3} \\ \langle H \rangle_{xyxy} &= \frac{H_0^4}{\sqrt{280}} \langle P_4 \rangle + \left[\frac{H_0^{2(23)}}{\sqrt{210}} + \frac{H_0^{2(22)}}{\sqrt{24}} + \frac{H_0^{2(12)}}{\sqrt{8}} + \frac{H_0^{2(21)}}{2\sqrt{10}} - \frac{H_0^{2(11)}}{\sqrt{24}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{H_0^{0(21)}}{\sqrt{20}} - \frac{H_0^{0(11)}}{\sqrt{12}} \\ \langle H \rangle_{xyyx} &= \frac{H_0^4}{\sqrt{280}} \langle P_4 \rangle + \left[\frac{H_0^{2(23)}}{\sqrt{210}} + \frac{H_0^{2(22)}}{\sqrt{24}} - \frac{H_0^{2(12)}}{\sqrt{8}} + \frac{H_0^{2(21)}}{2\sqrt{10}} + \frac{H_0^{2(11)}}{\sqrt{24}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{H_0^{0(21)}}{\sqrt{20}} + \frac{H_0^{0(11)}}{\sqrt{12}} \\ \langle H \rangle_{xxzz} &= \frac{-2H_0^4}{\sqrt{70}} \langle P_4 \rangle - \left[\frac{4H_0^{2(23)}}{\sqrt{210}} + \frac{H_0^{2(21)}}{3\sqrt{10}} - \frac{H_0^{2(22)}}{\sqrt{6}} - \frac{H_0^{2(01)}}{\sqrt{18}} \right] \langle P_2 \rangle - \frac{H_0^{0(21)}}{\sqrt{45}} + \frac{H_0^{0(01)}}{3} \\ \langle H \rangle_{yzyz} &= \frac{-2H_0^4}{\sqrt{70}} \langle P_4 \rangle - \left[\frac{4H_0^{2(23)}}{\sqrt{210}} + \frac{H_0^{2(22)}}{\sqrt{24}} + \frac{H_0^{2(12)}}{\sqrt{8}} - \frac{H_0^{2(21)}}{2\sqrt{10}} + \frac{H_0^{2(11)}}{\sqrt{24}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{H_0^{0(21)}}{\sqrt{20}} - \frac{H_0^{0(11)}}{\sqrt{12}} \\ \langle H \rangle_{yzzy} &= \frac{-2H_0^4}{\sqrt{70}} \langle P_4 \rangle + \left[\frac{-4H_0^{2(23)}}{\sqrt{210}} - \frac{H_0^{2(22)}}{\sqrt{24}} + \frac{H_0^{2(12)}}{\sqrt{8}} + \frac{H_0^{2(21)}}{2\sqrt{10}} + \frac{H_0^{2(11)}}{\sqrt{24}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{H_0^{0(21)}}{\sqrt{20}} + \frac{H_0^{0(11)}}{\sqrt{12}} \\ \langle H \rangle_{zxxx} &= \frac{-2H_0^4}{\sqrt{70}} \langle P_4 \rangle + \left[\frac{3H_0^{2(23)}}{\sqrt{210}} + \frac{2H_0^{2(21)}}{3\sqrt{10}} - \frac{2H_0^{2(01)}}{\sqrt{18}} \right] \langle P_2 \rangle - \frac{H_0^{0(21)}}{\sqrt{45}} + \frac{H_0^{0(01)}}{3} \quad (3.4) \\ \langle H \rangle_{zxzx} &= \frac{-2H_0^4}{\sqrt{70}} \langle P_4 \rangle + \left[\frac{3H_0^{2(23)}}{\sqrt{210}} - \frac{H_0^{2(21)}}{\sqrt{10}} + \frac{H_0^{2(11)}}{\sqrt{6}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{H_0^{0(21)}}{\sqrt{20}} + \frac{H_0^{0(11)}}{\sqrt{12}} \\ \langle H \rangle_{zxxz} &= \frac{-2H_0^4}{\sqrt{70}} \langle P_4 \rangle + \left[\frac{3H_0^{2(23)}}{\sqrt{210}} - \frac{H_0^{2(21)}}{\sqrt{10}} - \frac{H_0^{2(11)}}{\sqrt{6}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{H_0^{0(21)}}{\sqrt{20}} - \frac{H_0^{0(11)}}{\sqrt{12}} \end{aligned}$$

Остальные компоненты либо равны нулю, либо выражаются через вышеприведенные [8]. $\langle P_2 \rangle$ и $\langle P_4 \rangle$ - средние значения соответствующих полиномов Лежандра.

Компоненты тензора третьего ранга, вне зависимости от симметрии по индексам, равны нулю в случае симметрии, соответствующей НЖК.

2. Тензор четвертого ранга симметричный по трем последним индексам.

В этом случае, как уже отмечалось, выражения для компонент тензора отличны от общего случая. Проведя усреднение с использованием формул (2.15) - (2.20), получаем:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_{xxxx} &= \frac{3}{\sqrt{280}} F_0^4 \langle P_4 \rangle + \left[\frac{F_0^{2(\alpha)}}{\sqrt{10}} + \frac{3F_0^{2(\beta)}}{\sqrt{210}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{F_0^0}{\sqrt{5}} \\ \langle F \rangle_{zzzz} &= \frac{4F_0^4}{\sqrt{70}} \langle P_4 \rangle - \left[\frac{2}{\sqrt{10}} F_0^{2(\alpha)} + \frac{6F_0^{2(\beta)}}{\sqrt{210}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{F_0^0}{\sqrt{5}} \quad (3.5) \\ \langle F \rangle_{xxzz} &= \langle F \rangle_{yyzz} = \frac{-2F_0^4}{\sqrt{70}} \langle P_4 \rangle + \left[\frac{F_0^{2(\alpha)}}{3\sqrt{10}} - \frac{4F_0^{2(\beta)}}{\sqrt{210}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{F_0^0}{3\sqrt{5}} \\ \langle F \rangle_{zzxx} &= \langle F \rangle_{zzyy} = \frac{-2F_0^4}{\sqrt{70}} \langle P_4 \rangle + \left[\frac{3F_0^{2(\beta)}}{\sqrt{210}} - \frac{2F_0^{2(\alpha)}}{3\sqrt{10}} \right] \langle P_2 \rangle + \frac{F_0^0}{3\sqrt{5}} \\ \langle F \rangle_{xxxx} &= \langle F \rangle_{yyyy} = 3 \langle F \rangle_{xxyy} = 3 \langle F \rangle_{yyxx} \end{aligned}$$

3. Тензор четвертого ранга, симметричный по всем индексам.

Используя формулы (2.10) - (2.12) и производя усреднение получим:

$$\langle S_{zzzz} \rangle = \frac{4}{\sqrt{70}} S_0^4 \langle P_4 \rangle - \frac{2}{\sqrt{7}} S_0^2 \langle P_2 \rangle + \frac{1}{\sqrt{5}} S_0^0$$

$$\langle S_{xyxy} \rangle = \frac{1}{\sqrt{280}} S_0^4 \langle P_4 \rangle + \frac{1}{3\sqrt{7}} S_0^2 \langle P_2 \rangle + \frac{1}{3\sqrt{5}} S_0^0$$

$$\langle S_{xxzz} \rangle = \frac{-2}{\sqrt{70}} S_0^4 \langle P_4 \rangle - \frac{1}{6\sqrt{7}} S_0^2 \langle P_2 \rangle + \frac{1}{3\sqrt{5}} S_0^0$$

(3.6)

$$\langle S_{xxxx} \rangle = \langle S_{yyyy} \rangle = 3 \langle S_{xyxy} \rangle; \quad \langle S_{xxzz} \rangle = \langle S_{yyzz} \rangle$$

4. В случае, если по оси директора направлено постоянное электрическое поле, симметрия системы будет уже не ∞/mmm , а ∞ . Ясно, что и выражение для функции распределение (3.3) будет другим, а именно:

$$f(\cos\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(\cos\theta) \langle P_n \rangle$$

Произведя усреднение в этом случае получим:

а) для полностью симметричного тензора четвертого ранга выражения (3.6) для компонент тензора останутся прежними.

б) тензора четвертого ранга, симметричного по последним трем индексам, появятся еще две независимые компоненты:

$$\langle F_{xyxx} \rangle = \frac{iF_0^3}{2\sqrt{30}} \langle P_3 \rangle + \frac{iF_0^1}{\sqrt{30}} \langle P_1 \rangle; \quad \langle F_{xyzz} \rangle = -\frac{2iF_0^3}{\sqrt{30}} \langle P_3 \rangle + \frac{iF_0^1}{\sqrt{30}} \langle P_1 \rangle$$

в) у тензора третьего ранга, симметричного по двум послед-

ним индексам, также появляются отличные от нуля компоненты:

$$\langle t_{zzz} \rangle = \frac{2f_0^3}{\sqrt{10}} \langle P_3 \rangle - \left[\frac{2f_0^{(12)}}{\sqrt{15}} + \frac{f_0^{(10)}}{\sqrt{3}} \right] \langle P_1 \rangle$$

$$\langle t_{zxx} \rangle = \langle t_{zyy} \rangle = \frac{f_0^3}{\sqrt{10}} \langle P_3 \rangle + \left[\frac{f_0^{(12)}}{\sqrt{15}} - \frac{f_0^{(10)}}{\sqrt{3}} \right] \langle P_1 \rangle$$

$$\langle t_{xxz} \rangle = \langle t_{yyz} \rangle = \frac{-f_0^3}{\sqrt{10}} \langle P_3 \rangle - \frac{3f_0^{(12)}}{2\sqrt{15}} \langle P_1 \rangle; \quad \langle t_{yxz} \rangle = -\langle t_{xyx} \rangle = \frac{i}{2} f_0^2 \langle P_2 \rangle$$

5. До сих пор мы проводили усреднение непосредственно компонент тензоров. Эти величины важны при интерпретации экспериментов, связанных с когерентными процессами.

Однако, если процесс некогерентен, то необходимо знание среднего значения квадрата компоненты. Такая ситуация встречается, например, в спонтанном комбинационном рассеянии света.

В случае НЖК, получаем для тензора КР следующие выраже-

$$\begin{aligned} \langle (\alpha'_{xy})^2 \rangle &= \frac{1}{32} (2r'_{zz} - r'_{xx} - r'_{yy})^2 \langle \sin^4\theta \rangle + \frac{1}{4} (r'_{xz} + r'_{yz})^2 \cdot \\ &\cdot \langle \sin^2\theta(1 + \cos^2\theta) \rangle + \frac{1}{64} [(r'_{xx} - r'_{yy})^2 + 4r'_{xy}{}^2] \langle 1 + 6\cos^2\theta + \cos^4\theta \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle (\alpha'_{xz})^2 \rangle &= \langle (\alpha'_{yz})^2 \rangle = \frac{1}{8} (2r'_{zz} - r'_{xx} - r'_{yy})^2 \langle \sin^2\theta \cdot \cos^2\theta \rangle + \\ &+ \frac{1}{4} (r'_{xz} + r'_{yz})^2 \langle 4\cos^4\theta - 3\cos^2\theta + 1 \rangle + \frac{1}{16} [(r'_{xx} - r'_{yy})^2 + \\ &+ 4r'_{xy}{}^2] \langle \sin^2\theta(1 + \cos^2\theta) \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle (\alpha'_{zz})^2 \rangle &= \frac{1}{9} (2r'_{zz} - r'_{xx} - r'_{yy})^2 \langle \left(\frac{3\cos^2\theta - 1}{2} \right)^2 \rangle + 2(r'_{xz} + r'_{yz})^2 \cdot \\ &\cdot \langle \sin^2\theta \cos^2\theta \rangle + \frac{1}{8} [(r'_{xx} - r'_{yy})^2 + 4r'_{xy}{}^2] \langle \sin^4\theta \rangle + \\ &+ \frac{2}{9} (r'_{xx} + r'_{yy} + r'_{zz}) (2r'_{zz} - r'_{xx} - r'_{yy}) \langle \frac{3\cos^2\theta - 1}{2} \rangle + \frac{1}{9} (r'_{xx} + r'_{yy} + r'_{zz})^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle (\alpha'_{xx})^2 \rangle &= \langle (\alpha'_{yy})^2 \rangle = \langle (\alpha'_{xy})^2 \rangle + \frac{1}{36} (2r'_{zz} - r'_{xx} - r'_{yy})^2 \langle \left(\frac{3\cos^2\theta - 1}{2} \right)^2 \rangle + \\ &+ \frac{1}{2} (r'_{xz} + r'_{yz})^2 \langle \sin^2\theta \cos^2\theta \rangle + \frac{1}{32} [(r'_{xx} - r'_{yy})^2 + 4r'_{xy}{}^2] \langle \sin^4\theta \rangle - \\ &- \frac{1}{9} (r'_{xx} + r'_{yy} + r'_{zz}) (2r'_{zz} - r'_{xx} - r'_{yy}) \langle \frac{3\cos^2\theta - 1}{2} \rangle + \frac{1}{9} (r'_{xx} + r'_{yy} + r'_{zz})^2 \end{aligned}$$

Во всех рассмотренных случаях симметрия макросистемы предполагалась $\infty/m\bar{m}$ или ∞ . При этом не накладывалось никаких ограничений на симметрию самих молекул. Учет симметрии молекулы зачастую значительно упрощает все формулы. Мы такого рассмотрения проводить не будем, отметим только одно важное свойство неприводимых сферических тензоров. Если молекула имеет ось симметрии C_K порядка K , который выше, чем ранг тензора P , то все компоненты $T_m^{(l)}$ обращаются в нуль, кроме компонент с $m=0$.

Аппарат неприводимых сферических тензоров позволяет, в некоторых случаях, значительно упростить вычисления и поэтому он находит все более широкое применение. Однако ясно, что для описания какого-либо явления надо четко увязывать данный формализм с конкретной физической задачей. Так в работе [9] изучались параметры ориентационного порядка в нематическом ЖК при генерации второй гармоники под полем. Определялись параметры $\langle P_2 \rangle$ и $\langle P_4 \rangle$, хотя ясно (смотри (3.7) - (3.9)), что в этом случае надо так же знать $\langle P_1 \rangle$ и $\langle P_3 \rangle$, иначе мы получаем функцию распределения, не имеющую отношения к реальному эксперименту.

Такого сорта ошибки связаны в частности с тем, что ввиду сложности определения компонент тензора третьего ранга восприимчивости, их берут как свертку тензора 4-го ранга с полем. Причем при усреднении полагают:

$$\langle \chi_{ijk} \rangle = \langle \chi_{ijkl} E_l \rangle = \langle \chi_{ijkl} \rangle E_l.$$

Кроме того, часто предполагается χ_{ijkl} симметричным по всем индексам, хотя его значения находят из экспериментальных данных по генерации третьей гармоники. Между тем известно, что в этом случае рассматриваемый тензор в принципе не может быть симметричным по всем индексам.

Авторы глубоко признательны В.Ф.Шабанову за поддержку настоящей работы и обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шубников А.В. Избранные труды по кристаллографии. М.: Наука, 1975. 400 с.
2. Гельфанд И.М., Шапиро Э.Я. Представления группы вращения и группы Лорентца. М.: Гостехиздат, 1958. 250 с.
3. Аверьянов Е.М., Шабанов В.Ф. Оптическая анизотропия нематических жидких кристаллов. Красноярск.: Препринт ИФ СО АН СССР №61Ф, 1977. 56 с.
4. Jerphagnon J., Chemla D., Bonneville R. The Description of the Physical Properties of Condensed Matter Using Irreducible Tensors. - Advances in Physics, 1978, v.27, No4, p.609.
5. Maker P.D. Spectral Broadening of Elastic Second Harmonic Light-Scattering in Liquids. - Phys.Rev., 1970, v.A1, No3, p.923.
6. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975. 380 с.
7. Shen Jen, Clark N.A., Pershan P.S., Priestley E.B. Polarized Raman Scattering Studies of Orientational Order in Uniaxial Liquid Crystalline Phases. - J.Chem.Phys., 1977, v.66, No10, p.4635.
8. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1975. 680 с.
9. Saha S.K., Wong G.K. Investigation of Nematic Ordering Using Electric-Field-Induced Second-Harmonic Generation. - Appl. Phys.Lett., 1979, v.34, No7, p.423.