

CRISTAL·LOFÍSICA

Les propietats físiques d'un cristall es poden definir com la relació entre dues quantitats mesurables. Així per exemple, la densitat es la relació entre la massa i el volum.

Isotropia i anisotropia

En l'anterior exemple, ambdues quantitats es podem mesurar sense relacionar-les amb cap direcció específica del cristall, per tant, la densitat no depèn de la direcció. En aquest cas es diu que aquesta propietat és no direccional. Contràriament, hi ha altres propietats, com la conductivitat elèctrica, que es defineix com la relació entre un camp elèctric i la intensitat del corrent produït per aquest camp: en aquest cas per ambdues quantitats cal precisar la magnitud i la direcció, per tant, la conductivitat elèctrica dependrà de la direcció en que es mesuren el camp i el corrent, i alhora estarà associada a una direcció del cristall, dependrà de la direcció i per tant, es parla de propietats direccionals.

Es pot comprovar experimentalment que algunes de les propietats que es poden associar a una direcció determinada, adquireixen valor diferents per a direccions diferents. És a dir, la magnitud d'una propietat pot variar amb la direcció en que es mesura: en aquest cas el cristall és *anisotròpic* respecte d'aquesta propietat. Per contra, si la magnitud no varia amb la direcció, es diu que el cristall és *isotròpic* respecte d'aquesta propietat.

Cal assenyalar que els cristalls no són anisotròpic o isotròpics per se, sino que aquest concepte està en relació amb cada una de les propietats físiques. Hi ha cristalls anisotròpics per a certes propietats, mentre que es comporten isotròpicament per a altres.

Convé no confondre aquest concepte amb el d'heterogeneïtat i homogeneïtat, també relacionades amb la direcció. Un cos és heterogeni respecte de certa propietat si el valor d'aquesta varia al llarg d'una direcció, cosa que únicament succeeix en els cristalls en condicions excepcionals. Per exemple l'atmosfera és heterogènia respecte de la velocitat del llum perquè la densitat de les diverses capes és diferent i per tant, la llum viatja a velocitats diferents al llarg d'una mateixa direcció.

Escalars, vectors i tensors

Tal com s'ha vist, una propietat física relaciona dues magnituds mesurables. Si aquestes magnituds no es poden associar a una direcció, i per tant la propietat en qüestió tampoc, aquesta es pot definir amb un sol número, es a dir un escalar, resultat de la relació entre dos escalars. La densitat abans esmentada n'és un exemple.

Hi ha propietats, com la piroelectricitat, que resulten de relacional una magnitud no associable a una direcció (la temperatura) amb un altre que s'ha de mesurar en una direcció, (la polarització elèctrica). En aquests casos la propietat és direccional, i per descriure-la s'haurà de representar la magnitud de la propietat associada a la direcció en que s'ha produït la polarització elèctrica, és a dir, cal representar-la amb un vector, resultat de la relació entre un escalar i un vector.

En molt dels casos, una propietat física resulta de la relació entre dues magnituds associables a les respectives direccions (dues magnituds vectorials), i la propietat que en resulta és, obviament, direccional. Aquest és el cas de la conductivitat elèctrica, que resulta de la relació entre un camp elèctric aplicat en certa direcció i el corrent elèctric general en un altre direcció. Per representar la conductivitat elèctrica cal introduir el concepte

de tensor, que resulta de la relació entre dos vectors, el qual té forma la forma matemàtica d'una matriu de n components. En propers capítols s'explicarà en sentit físic dels tensors sobre la base del comportament dels cristalls davant d'algunes propietats com la conductivitat elèctrica o la dilatació tèrmica.

Es possible generalitzar el concepte de tensor, de manera que un vector es pot considerar un tensor de 3^1 components, atès que calen tres números per definir-lo en l'espai de tres dimensions en el que es representa el cristall. Igualment, un escalar es pot considerar un tensor de 3^0 components. Un tensor que representa una propietat que relaciona dos magnituds vectorials de 3^1 components, tindrà la forma d'una matriu de 3^2 components. I una relació entre una magnitud tensorial de 3^2 components i un vector de 3^1 components, es representarà per un tensor de 3^3 components, etc.

Això permet introduir el concepte de rang dels tensors, i dir que un escalar és un tensor de rang zero, un vector un tensor de rang u, un tensor de 3^2 components és de rang dos, i en general dir que un tensor de 3^n components és de rang n . I per tant, parlar de propietats tensorials de primer, segon, tercer... ordre.

Principi de Neumann

El principi de Neumann estableix que *la simetria d'una propietat física ha d'incloure la simetria del grup puntual del cristall*. És a dir, que els elements de simetria d'una propietat física han de ser igual o o bé un supergrup, del grup puntual.

La simetria d'una propietat física correspon a la de la figura tridimensional, lloc geomètric dels extrems dels vectors que representen el valor de la

propietat en cada una de les direccions dels cristall. És a dir, si es representa el valor mesurat de la propietat en cada direcció, al conjunt de mesures defineix una figura, la qual té certa simetria, que ha d'incloure la del corresponent grup puntual.

Grups de Laue i propietats centrosimètriques

Aquelles propietats físiques direccionals que tenen el mateix valor en la direcció $[uvw]$ que en la $[\bar{u}\bar{v}\bar{w}]$ s'anomenen *centrosimètriques*. Aquest és el cas d'algunes propietats que, per la seva pròpia naturalesa no té sentit diferenciar entre dues direccions oposades, relacionades per un centre de simetria. La dilatació tèrmica, n'és un exemple: si una línia d'un cristall es modifica (augmenta o disminueix), aquesta mesura és atribuïble a una direcció, però no a un dels sentits de la direcció.

Per a aquestes propietats, els cristall es comporten com si tinguessin centre de simetria, tant si el seu grup puntual el conté o no. Per aquests casos s'utilitzen els anomenats grups de Laue, que resulten d'afegir un centre de simetria al grup puntual del cristall, i per tant, els 32 grups de simetria puntual queden reduïts a 11 grups centrosimètrics, o de Laue. Així, el grup de Laue d'un cristall del grup 1 és $\bar{1}$, el d'un cristall del grup 2 és $2/m$, etc. A la taula següent es relacionen els grups puntuals i els corresponents centrosimètrics.

	GRUPS PUNTUALS			GRUPS DE LAUE
Triclínic	1	$\bar{1}$		$\bar{1}$
Monoclínic	2	m	2/m	2/m
Ròmbic	222	mm2	mmm	mmm

Trigonal	3	$\bar{3}$		$\bar{3}$
	3m	32	$\bar{3}2/m$	$\bar{3}2/m$
Tetragonal	4	$\bar{4}$	4/m	4/m
	$\bar{4}2m$	422	4mm 4/mmm	4/mmm
Hexagonal	6	$\bar{6}$	6/m	6/m
	622	6mm	$\bar{6}m2$ 6/mmm	6/mmm
Cúbic	23	$2/m\bar{3}$		$2/m\bar{3}$
	432	$\bar{4}3m$ $m\bar{3}m$		$m\bar{3}m$