Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники

В.Н. Давыдов

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ФИЗИЧЕСКОГО СВОЙСТВА И КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ НАПРАВЛЕНИЙ ИХ ДОСТИЖЕНИЙ

Методические указания
по выполнению лабораторной работы

Томск
2022

УДК 548.1
ББК 22.37
Д-138

Рецензент:
Смирнов С.В., профессор кафедры «Физическая электроника»
Томского государственного университета систем управления
и радиоэлектроники, д-р тех. наук

Давыдов, Валерий Николаевич
Д-138 Методические указания по выполнению лабораторной работы «Определение экстремальных значений физического свойства и кристаллографических направлений их достижения». / В.Н. Давыдов – Томск: Томск. гос. ун-т систем упр. и радиоэлектроники, 2022. - 16 с.

Данное пособие является неотъемлемой частью комплекта учебно-методического комплекса для изучения дисциплины «Материалы электронной техники». Оно содержит теорию по методике введения тензоров второго ранга в задачах электронного материаловедения, его основных свойствах тензора, а также описание методики отыскания направлений в кристалле, вдоль которых заданное физическое свойство приобретает экстремальные значения.

Умение решать задачи указанного типа позволяют создавать элементы электронной техники с заданными параметрами путем выбора ориентации кристаллической пластины и направления внешнего воздействия.

Печатается по решению научно-методического совета,
протокол № 31-08/22 от 01.09.2022

УДК 6548.1
ББК 22.37

СОДЕРЖАНИЕ

1 ВВЕДЕНИЕ

Для создания элементов электронной техники широко используют электротехнические материалы, находящиеся в различных состояниях: аморфные, поликристаллические, сплавы, кристаллы и т.д. Среди этих состояний кристаллические материалы используют для изготовления прецезионной аппаратуры, высочувствительных резисторов, конденсаторов и других элементов. Применение в электронной технике для изготовления элементов кристаллических веществ различной симметрии позволяет изготавливать элементы, в которых требуемые физические свойства выбранного кристалла принимают максимальное или минимальное значений. Это позволяет создавать элементы с новыми фугкциональными возможностями и экстремальными свойствами.

В этой связи необходимо студенты должны знать основные физические свойства кристаллического вещества, уметь вычислять их максимальные и минимальные значения, а также кристаллографические направления, вдоль которых рассматриваемое физичское свойство принимает указанные значения..

Целью данной лабораторной работы является изучение студентами основных положений теории тензоров второго ранга, их свойств, а также получение навыков вычисления собственных векторов и собственных значений исследуемого физического свойства.

2 ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1 Основные положения теории тензоров второго ранга

Как показывает практический опыт, описать все физические явления в кристаллах только тензорами нулевого и первого ранга невозможно. Во многих задачах кристаллофизики приходится вводить тензора боле высокого ранга. Покажем на конкретном примере, как в задачах кристаллофизики может потребоваться тензор второго ранга.

Пусть требуется определить электропроводность кристаллического образца. Для её вычисления воспользуемся законом Ома: $j = \sigma E$. Свяжем с данным кристаллом систему координат, ориентировав её, например, по граням кристалла, и начнём с измерения электропроводности вдоль оси X_1. Для этого изготовим омические контакты к X_1- торцам образца, подключим к ним амперметр. Если теперь приложить электрическое поле вдоль оси X_1, то по найденному току можно вычислить электропроводность вдоль этой оси при X_1 - ориентации электрического поля. Обозначим эту электропроводность как σ_{11}. Однако в кристалле в силу того, что в его объеме имеется поляризация $\overline{P}$, вызванная внешним электрическим полем $\overline{E}$, вектор электрической индукции $\overline{D} = \overline{E} + 4\pi\overline{P}$ ориентирован в общем случае по всем трем осям координат, даже если вектор $\overline{E}$ направлен строго по одной из осей. Это делает возможным возникновение тока по оси X_1 также в случае воздействия поля вдоль осей X_2 и X_3. Вычисляемые в этих случаях электропроводности σ_{12} и σ_{13} в общем случае будут иметь отличные от нуля значения: $j_{12} = \sigma_{12} E_2$, $j_{13} = \sigma_{13} E_3$. Таким образом, при произвольной ориентации электрического поля $\overline{E}(E_1, E_2, E_3)$ относительно кристаллофизической системы координат величина тока вдоль оси X_1 характеризуется не одним значением, а тремя: j_{11}, j_{12} и j_{13}. Поэтому полный ток вдоль оси X_1 будет $j_1=\sigma_{11}E_1+\sigma_{12}E_2+\sigma_{13}E_3$. Он характеризуется тремя значениями электропроводности: σ_{11}, σ_{12}, σ_{13}.

Аналогичные ситуации будут иметь место при регистрации токов вдоль осей X_2 и X_3: величины этих токов будут характеризоваться наборами чисел σ_{21}, σ_{22}, σ_{23} и σ_{31}, σ_{32}, σ_{33} , соответственно. Таким образом, при произвольной ориентации электрического поля и регистрируемого тока относительно кристаллографической системы координат связь между ними описывают девять констант σ_{ij} , которые можно записать в виде матрицы

$$\left\|\sigma_{ij}\right\| = \begin{Vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{Vmatrix},$$

которая и является тензором второго ранга – тензором электропроводности.

Таким образом, тензор второго ранга представляет собой квадратную матрицу с числом элементов по строкам и столбцам, равным трем. От матриц с аналогичным числом элементов тензор отличается тем, что численные значения его компонент относятся к заданной системе координат и определяют величину какого-либо физического свойства (электропроводность кристалла, удельное сопротивление кристалла, диэлектрическая проницаемость, магнитная проницаемость и другие) в выбранном направлении регистрации физического свойства при заданном направлении внешнего воздействия. Отличить тензор от матрицы можно по закону преобразования их компонент при смене системы координат: компоненты тензора в новой системе координат $T_{i'j'}$ связаны с компонентами тензора в старой системе T_{kl} соотношением

$$T_{i'j'} = C_{i'k} \cdot C_{j'l} \cdot T_{kl}, \tag{1}$$

где $C_{i'k}$ и $C_{j'l}$ - это компоненты матрицы преобразования системы координат. В приведённом выше выражении (4.3) подразумевается суммирование в правой части по индексам k и l, каждый из которых пробегает значения 1, 2, 3. Закон преобразования компонент в виде (1) можно рассматривать как определение тензора второго ранга.

Тензор второго ранга может быть симметричным, если $T_{kl}=T_{lk}$, т.е. недиагональные компоненты тензора, равноотстоящие от диагонали, равны друг другу и по величине, и по знаку. Если же тензор антисимметричен, то $T_{kl}= -T_{lk}$, т.е. недиагональные компоненты тензора, равноотстоящие от диагонали, равны по модулю и противоположны по знаку. Диагональные элементы антисимметричного тензора равны нулю.

Как и векторы, тензоры второго ранга могут быть полярными и аксиальными. Однако в силу особенностей исторического развития в настоящее время в кристаллофизике наиболее широко используются физические явления, описываемые полярными тензорами, а аксиальные тензоры применяются преимущественно в отдельных областях знаний, например, магнетизме. По этой причине дальнейшее изложение будет относиться к полярным тензорам. Распространить его на аксиальные тензоры не представляет труда.

2.2 Введение тензоров второго ранга в задачах кристаллофизики

Тензорами второго ранга в кристаллах описываются диэлектрические и магнитные проницаемости, удельное сопротивление, теплопроводность, тепловое расширение и т.д. В настоящее время это самый обширный класс физических явлений, используемых в электронном приборостроении и научных исследованиях. Напомним, какими способами в задачах кристаллофизики могут быть введены полярные и аксиальные тензоры второго ранга. При этом следует иметь в виду, что в линейном уравнении, описывающем следствие S физического воздействия на кристалл W

$$S = \hat{T} \cdot W, \qquad (1)$$

ранг тензора S левой части выражения (1), обязательно равен рангу правой части (1), представляющего собой свертку (суммирование по повторяющимся индексам) тензоров физического свойства $\hat{T}$ и воздействия W и потому равного разности рангов тензоров $\hat{T}$ и W.

Общий случай

Полярные тензоры. Полярные тензоры второго ранга образуются тогда, когда в причинно-следственной связи, описываемой линейной зависимостью вида (1), и причина, и следствие одновременно являются или полярными, или аксиальными тензорами нулевого, первого или второго ранга. Ранг вводимого в рассмотрение тензора равен сумме рангов тензоров, описывающих причину (r_1) и следствие (r_2): $R = r_1 + r_2$. Рассмотрим способы введения полярных тензоров подробнее.

1. Если на кристалл действует внешняя причина, описываемая полярным вектором $\overline{P}$, а регистрируется полярная величина, описываемая полярным вектором $\overline{S}$, то при наличии между причиной и следствием линейной зависимости $\overline{S} = \hat{T} \cdot \overline{P}$ коэффициенты этой зависимости образуют полярный тензор второго ранга $\hat{T}$.

Пример: при воздействии на кристалл электрического поля $\overline{E}$ в нем возникает электрический ток $\overline{j}$, так что $\overline{j} = \hat{\sigma} \cdot \overline{E}$. Согласно описанному выше, тензор второго ранга $\hat{\sigma}$ является полярным тензором.

2. Если причина P и следствие S описываются аксиальными векторами первого ранга, тензор $\hat{T}$ будет также полярным тензором второго ранга.

Пример: при воздействии на кристалл магнитного поля $\mathring{H}$ в нем возникает магнитная индукция $\mathring{B}$, так что $\mathring{B} = \hat{\mu} \cdot \mathring{H}$. Согласно изложенному, тензор второго ранга $\hat{\mu}$ представляет собой полярный тензор.

3. Полярный тензор второго ранга может быть введен в рассмотрение, если скалярная причина T (полярный тензор нулевого ранга) вызывает следствие, описываемое полярным тензором второго ранга $\hat{\varepsilon}$, и имеет место линейная связь между причиной и следствием: $\hat{\varepsilon} = \hat{\alpha} \cdot T$. Здесь тензор $\hat{\alpha}$ будет полярным тензором второго ранга. Обратная ситуация: если причина, описываемая полярным тензором второго ранга, вызывает следствие, описываемое скаляром, то коэффициенты их линейной связи образуют полярный тензор второго ранга.

Пример: Изменение температуры кристалла ΔT вызывает его деформацию, описываемую тензором упругой деформации $\hat{\varepsilon}$ - тензором второго ранга, и имеет место линейное соотношение $\hat{\varepsilon} = \hat{\alpha} \cdot \Delta T$. Связь между ними описывается полевым тензором второго ранга $\hat{\alpha}$, называемым тензором теплового расширения кристалла.

Аксиальные тензоры. Аксиальные тензоры второго ранга образуются, если в причинно-следственной связи типа (1) либо причина, либо следствие описывается аксиальным тензором нулевого, первого или второго ранга, а вторая величина является обязательно полярным тензором. Наглядной интерпретацией физического свойства, описываемого аксиальным тензором второго ранга, является электромагнитная индукция в анизотропной среде, когда протекание тока (причина - полярный вектор) приводит к появлению магнитного поля (следствие - аксиальный вектор). Рассмотрим способы введения аксиальных тензоров подробнее.

1. Тензор $\hat{T}$ будет аксиальным тензором второго ранга, если одна из величин: причина *P* или следствие *S*, будет аксиальным вектором, например, магнитным полем, а вторая будет описываться полярным вектором.

Пример: к кристаллу приложили электрическое поле $\overline{E}$ в результате чего в нем возникла магнитная индукция $\mathring{B}$ и имеет место линейная связь между $\mathring{B}$ и $\overline{E}$: $\mathring{B} = \hat{\eta} \cdot \overline{E}$. Тензор второго ранга $\hat{\eta}$ будет представлять собой аксиальный тензор второго ранга. Другая ситуация, когда причина аксиальна, а следствие по природе полярно: $\overline{E} = \hat{\pi} \cdot \mathring{B}$, также приводит к аксиальному тензору второго ранга $\hat{\pi}$.

2. Другой класс физических явлений, описываемых аксиальными тензорами второго ранга, может быть введен, если в приведенных выражениях причиной считать скаляр или псевдоскаляр, а следствие - аксиальным или полярным тензором второго ранга соответственно.

Частные случаи

Возможны также частные физические ситуации, приводящие к тензорам второго ранга, когда причиной является действие двух полярных ($\overline{E}$ и $\overline{P}$) или двух аксиальных векторов ($\mathring{H}$ и $\mathring{R}$), а следствием является полевой тензор нулевого ранга - скаляр T или аксиальный тензор нулевого ранга - псевдоскаляр φ (мнимая часть комплексного числа). В линейной зависимости скалярного следствия и полярных причин $\overline{E}$ и $\overline{P}$

$$T = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial E_i \partial P_j} \right)_0 \cdot E_i \cdot P_j \ ,$$

вторые производные $\left(\partial^2 T \big/ \partial E_i \partial P_j\right)_0$ образуют полярный тензор второго ранга. Аналогичное будем иметь, если оба причинных вектора аксиальные:

$$T = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial H_i \partial R_j} \right)_0 \cdot H_i \cdot R_j \ .$$

Если же один из причинных векторов будет полярным, а другой аксиальным, то при наблюдении скалярного результата коэффициенты линейной зависимости образуют аксиальный тензор второго ранга, например:

$$T = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial E_i \partial R_j} \right)_0 \cdot E_i \cdot R_j$$

где вторые производные $\left(\partial^2 T \big/ \partial H_i \partial R_j\right)_0$ образуют аксиальный тензор второго ранга. Такой же тензор образуется, если причиной является произведение двух полярных ($\overline{E}$ и $\overline{P}$), а следствие представляет собой псевдоскаляр:

$$\varphi = \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial E_i \partial P_j} \right)_0 \cdot E_i \cdot P_j \cdot$$

Вторые производные $\left(\partial^2 \varphi \big/ \partial E_i \, \partial P_j\right)_0$ образуют аксиальный тензор второго ранга.

2.3 Основные задачи на определение физических свойств, описываемых тензорами второго ранга

Основные задачи на определение физических свойств, описываемых тензорами второго ранга, можно разделить на три типа

1. Вычисление собственных векторов и собственных значений симметричного тензора второго ранга, если его вид задан (т.е. известны численные значения всех его компонент) в некоторой системе координат. Задачи этого типа возникают в ситуациях, когда

- необходимо определить максимальное и минимальное значение исследуемого физического свойства в кристалле, а исходно задан тензор, полученный в некоторой системе координат и который , вообще говоря, не является диагональным. Собственные значения как раз и дадут максимальное и минимальное значения свойства в данном кристалле, которые достигаются только в направлениях собственных векторов;

- необходимо записать тензор в наиболее простой форме – диагональной, что возможно, если в качестве системы координат, в которой тензор записывается, выступает тройка собственных векторов;

2. Определение вида тензора второго ранга в новой системе координат, если известен его вид в исходной системе координат и задано преобразование системы координат (т.е. задана матрица преобразования координат);

3. Определение величины и направления последствия (электрического тока, потока тепла и т.д.) при заданных внешнем воздействии (направлении и величине электрического поля, градиента температуры и т.д.) и виде тензора, описывающем изучаемое физическое свойство (тензор электропроводности, тензор теплопроводности и т.д.).

2.4 Собственные векторы и собственные значения тензора второго ранга

Для того чтобы лучше понять необходимость изучения этого вопроса, рассмотрим на конкретном примере действие полярного тензора второго ранга. Если тензор $\hat{T}$ действует на векторное поле $\overline{E}$ (представьте это поле как поле пшеницы, колоски которой как-то улеглись, образовав некоторую картину распределения направлений колосьев), то в соответствии с определением тензора $\overline{j}=\hat{T}\,\overline{E}$ это векторное поле преобразуется в другое векторное поле $\overline{j}$. Действие тензора $\hat{T}$ на поле векторов $\overline{E}$ можно рассматривать как свойство колосьев пшеницы менять свою ориентацию под действием ветра, который изменяет картину распределения колосьев. Ясно, что второе поле – поле $\overline{j}$ отличается от первого как одно поле пшеницы от другого - каждый вектор $\overline{E}$ будет преобразован тензором $\hat{T}$. Однако, если сопоставить между собой векторные поля $\overline{j}$ и $\overline{E}$, то можно обнаружить, что отдельные векторы $\overline{j}$, полученные из векторов $\overline{E}$, совпадают с исходными векторами по направлению - тензор не изменил их направления, хотя у всех других он это сделал. Вот эти векторы $\overline{E}$, которые не подверглись переориентации под действием тензора, называют **собственными векторами** тензора $\hat{T}$. Число S, указывающее во сколько раз изменилась длина собственного вектора $\overline{E}_1$ в результате действия на него тензора, называется **собственным значением** для вектора $\overline{E}_1$. В трехмерном пространстве при решении физических задач число собственных векторов и собственных значений не может быть больше трех. Их находят из решения следующего векторного уравнения:

$$\overline{j}=\hat{T}\,\overline{E} \quad \text{или} \quad \hat{T}\,\overline{E}=S\cdot\overline{E}, \tag{2}$$

где S - число, а $\hat{T}$ - тензор (матрица из девяти чисел). Собственные векторы и собственные значения можно найти из выражения (2), переписав его следующим образом:

$$\left(\hat{T} - \hat{I}\,S\right)\overline{U} = 0,$$

В координатной форме записи это уравнение будет иметь вид:

$$\left(T_{ik} - S \cdot \delta_{ik}\right) \cdot U_k = 0$$

или в развернутом виде имеем систему:

$$\begin{aligned}
&\left(T_{11} - S\right) \cdot U_1 + T_{12} \cdot U_2 + T_{13} \cdot U_3 = 0, \\
&T_{21} \cdot U_1 + \left(T_{22} - S\right) \cdot U_2 + T_{23} \cdot U_3 = 0, \\
&T_{31} \cdot U_1 + T_{32} \cdot U_2 + \left(T_{33} - S\right) \cdot U_3 = 0.
\end{aligned}$$

Система из трёх однородных линейных уравнений относительно компонент вектора $\overline{U}$ имеет ненулевое решение, если ее определитель равен нулю:

$$\det\left(\hat{T} - S \cdot \hat{I}\right) = \begin{vmatrix} T_{11} - S & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} - S & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} - S \end{vmatrix} = 0 \quad .$$

Так как тензор $\hat{T}$ задан, то имеем уравнение 3-ей степени для отыскания собственных значений S. Это уравнение называют **характеристическим уравнением**. По формулам Кардано уравнение третьей степени в общем случае имеет один вещественный корень и два комплексно-сопряженных. Последние два корня зачастую не поддаются физической интерпретации и потому желательно уйти от комплексного представления собственных значений. Это достигается применением следующей схемы расчета. Пусть один вещественный корень каким-либо способом найден. Назовём его третьим решением - $S = S3$. Тогда из уравнения

$$\left(T_{ik} - S3 \cdot \delta_{ik}\right) \cdot U_k^{(3)} = 0 \qquad (k = 1, 2, 3)$$

находим один собственный вектор $\overline{U}^{(3)}$, являющийся по условию нормировки единичным. Этот вектор можно использовать как орт новой системы координат. Сделаем его ортом $\bar{e}_{3'}$, т.е. повернем старую систему координат так, чтобы в новой $\bar{e}_{3'}$, был осью $X_{3'}$ (или Z'). В новой системе координат тензор $\hat{T}$ будет

$$\left\| T_{j'l'} \right\| = \begin{Vmatrix} T_{1'1'} & T_{1'2'} & 0 \\ T_{2'1'} & T_{2'2'} & 0 \\ 0 & 0 & S3 \end{Vmatrix}.$$

Поэтому в новой системе координат характеристическое уравнение перепишется в виде:

$$\begin{vmatrix} T_{1'1'} - S & T_{1'2'} & 0 \\ T_{2'1'} & T_{2'2'} - S & 0 \\ 0 & 0 & T_{3'3'} - S3 \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрыв определитель, получим уравнение второго порядка, из которого найдем два других собственных значения:

$$S(1,2) = \frac{1}{2}\cdot\left[\left(T_{1'1'} + T_{2'2'}\right) \pm \sqrt{\left(T_{1'1'} - T_{2'2'}\right)^2 + \left(2\cdot T_{1'2'}\right)^2}\right].$$

Поскольку под корнем стоит положительное число, то оба корня будут вещественными.

Собственные вектора, соответствующие различным собственным значениям, взаимно ортогональны. Действительно, умножая справа скалярно уравнение для определения собственных векторов на $\overline{U}^{(i)}$

$$\hat{T}\,\overline{U}^{(1)} = S1\cdot\overline{U}^{(1)} \quad \Big| \; \overline{U}^{(2)}$$

$$\hat{T}\,\overline{U}^{(2)} = S2\cdot\overline{U}^{(2)} \quad \Big| \; \overline{U}^{(1)}$$

и вычитая одно из другого, получим:

$$\hat{T}\,\overline{U}^{(1)}\cdot\overline{U}^{(2)} - \hat{T}\,\overline{U}^{(2)}\cdot\overline{U}^{(1)} = 0 = \left(S1 - S2\right)\cdot\overline{U}^{(1)}\cdot\overline{U}^{(2)}, \qquad (3)$$

откуда следует, что скалярное произведение $\left(\overline{U}^{(1)}\cdot\overline{U}^{(2)}\right) = 0$, т.е. $\overline{U}^{(1)} \perp \overline{U}^{(2)}$ (этот символ «$\perp$» и символ «$\|$» здесь и далее означают взаимную перпендикулярность или параллельность векторов, соответственно) при $S1 \neq S2$. Левая часть выражения (3) представляет собой разность двух чисел, полученных в результате скалярного произведения двух векторов: вектора, преобразованного действием тензора, и одного из собственных векторов.

Если все собственные вектора тензора различны, то они образуют базис, в котором тензор принимает наиболее простой вид:

$$\hat{T} = S1\cdot\overline{U}^{(1)}\,\hat{}\,\overline{U}^{(1)} + S2\cdot\overline{U}^{(2)}\,\hat{}\,\overline{U}^{(2)} + S3\cdot\overline{U}^{(3)}\,\hat{}\,\overline{U}^{(3)},$$

а его матрица - ортогональную форму:

$$\left\|T_{ij}\right\| = \begin{Vmatrix} S1 & 0 & 0 \\ 0 & S2 & 0 \\ 0 & 0 & S3 \end{Vmatrix}.$$

Здесь символ $\overline{U}^{(i)}\,\hat{}\,\overline{U}^{(i)}$ - обозначает диады собственных векторов. Когда два собственных значения совпадают $\left(S1 = S2\right)$, то это означает, что этим значениям соответствует целая плоскость собственных векторов ($X_1 0 X_2$), перпендикулярная $\overline{U}^{(3)}$. При совпадении всех трех собственных значений любой вектор является для такого тензора собственным.

В чем же польза от введения собственных векторов и собственных значений тензора? В кристаллофизике часто возникает задача по определению направления вектора $\overline{n}$, при котором нормальная составляющая данного тензора

$\hat{T}$ принимает экстремальные значения. При этом предполагается, что тензор $\hat{T}$ задан компонентами T_{ij} в системе координат X_1, X_2, X_3, .

Математическая формулировка этой задачи такова: найти значения n_i , при которых достигает экстремума функция $F(\bar{n}) = \bar{n} \cdot \hat{T}\bar{n} = T_{ij} \cdot n_i \cdot n_j$ при условии, что $f(\bar{n}) = (\bar{n} \cdot \bar{n}) - 1 = 0$. Это типичная задача по отысканию условного экстремума, которая обычно решается методом неопределенных множителей Лагранжа. Для этого составляется новая функция

$$\Phi(\bar{n}) = F(\bar{n}) - \lambda \cdot f(\bar{n})$$

с неопределенным множителем λ, у которой ищут безусловный экстремум, приравнивая к нулю частные производные:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_i} = 0 .$$

Затем из этих уравнений и условия $f(\bar{n}) = 0$ находят компоненты n_i и множитель λ:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial n_i} = \frac{\partial F}{\partial n_i} - \lambda \cdot \frac{\partial f}{\partial n_i} = T_{ij} \cdot n_j + T_{ji} \cdot n_j - 2 \cdot \lambda \cdot n_i = 0$$

или с учетом симметричности тензора $\hat{T}$: $T_{ij} \cdot n_j = \lambda \cdot n_i$, а это есть условие того, что вектор $\bar{n}$ является собственным вектором тензора, а λ - соответствующее ему собственное значение.

Таким образом, **нормальная составляющая тензора достигает экстремальных значений в направлениях, совпадающих с направлением собственных векторов этого тензора. Более того, эти экстремальные значения равны соответствующим собственным значениям тензора**. Действительно, по определению нормальной составляющей

$$\left(\bar{n} \cdot \hat{T}\bar{n} \right) = T_{ij} \cdot n_i \cdot n_j = \lambda \cdot n_j \cdot n_j = \lambda .$$

Отсюда же следует, что если все собственные значения тензора положительны (отрицательны), то и все его нормальные составляющие положительны (отрицательны). Будучи непрерывной функцией направления, они могут обратиться в нуль, если нормальная составляющая принимает положительные и отрицательные значения. Нормальная составляющая тензора равна величине физического свойства, описываемого данным тензором, в направлении вектора $\bar{n}$.

3 КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Что такое тензор второго ранга?
2. Запишите закон изменения компонент тензора второго ранга при смене системы координат.

3. Как определить ранг тензора и его природу в линейной зависимости следствия от воздействия?
4. Какие способы введения тензоров второго ранга в задачах кристаллофизики являются общими?
5. Какие способы введения тензоров второго ранга в задачах кристаллофизики являются частными?
6. Как вычислить собственные значения тензора второго ранга?
7. Как вычислить собственные векторы тензора второго ранга?
8. Что характеризуют собственные значения тензора второго ранга?
9. Что характеризуют собственные векторы тензора второго ранга?
10. Какой должна быть система координат, чтобы записанный в ней тензор второго ранга имел диагональный вид?

4 РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ

4.1 Задание к лабораторной работе

4.1.1 Получите у преподавателя задание на лабораторную работу в виде тензора второго ранга, описывающего рассматриваемое физическое свойство, собственные векторы и собственные значения которого требуется определить.

4.1.2 Составьте схему расчета собственных векторов и собственных значений с учетом внутренней симметрии заданного тензора.

4.1.3 Получите численные величины собственных значений тензора.

4.1.4 Получите координаты единичных векторов, указывающих кристаллографические направления, вдоль которых физическое свойство принимает экстремальное значение.

4.1.5 Составьте отчет о проделанной работе.

4.2. Схема вычисления собственных векторов и собственных значений

Рассмотрим схему вычисления собственных векторов и собственных значений тензора второго ранга на решении конкретной задачи.

Пусть для моноклинного кристалла было найдено, что величина коэффициента теплового расширения вдоль направления [010], являющегося осью симметрии второго порядка, составляет $41 \cdot 10^{-6}$ *град*$^{-1}$. Следующие измерения сделаны в плоскости (010). При этом оказалось, что величина коэффициента теплового расширения по двум взаимно перпендикулярным направлениям в плоскости (010) равна $32 \cdot 10^{-6}$ и $15 \cdot 10^{-6}$ *град*$^{-1}$, а вдоль направления, составляющего угол в 45^0 с указанными направлениями, составила $16 \cdot 10^{-6}$ *град*$^{-1}$. Требуется определить коэффициенты тензора $\left\| \alpha_{ij} \right\|$ в стандартной установке, а также значения его главных коэффициентов.

Решение. Тензор теплового расширения устанавливает связь между изменением температуры кристалла и тензором деформации. В моноклинных кристаллах одна из главных осей тензора (в стандартной установке – ось X_2) совпадает с направлением [010], являющимся либо осью симметрии 2, либо нормалью к плоскости симметрии. Две остальные главные оси тензора относительно этого направления могут иметь различные ориентации, ввиду чего тензор $\|\alpha_{ij}\|$ такого кристалла содержит четыре независимых компоненты. Совместим с направлением [010] ось X_2; взаимно перпендикулярные направления, лежащие в плоскости (010), вдоль которых были получены величины теплового расширения $32\cdot10^{-6}$ и $15\cdot10^{-6}$ *град*$^{-1}$, соответственно с осями X_3 и X_1. При таком выборе системы координат будем иметь, что диагональные компоненты тензора теплового расширения измерены и равны

$$\alpha_{11} = 15\cdot10^{-6}\,\text{град}^{-1},\ \alpha_{22} = 41\cdot10^{-6}\,\text{град}^{-1},$$
$$\alpha_{33} = 32\cdot10^{-6}\,\text{град}^{-1}.$$

Более того, для моноклинного кристалла с выбранной системой координат относительно оси симметрии второго порядка вид тензора второго ранга известен (см. Учебное пособие, «Метод прямой проверки в декартовых координатах». Примеры: класс 2):

$$\|\alpha_{ij}\| = \begin{Vmatrix} \alpha_{11} & 0 & \alpha_{13} \\ 0 & \alpha_{22} & 0 \\ \alpha_{13} & 0 & \alpha_{33} \end{Vmatrix}.$$

Диагональные элементы этого тензора нам заданы по условию задачи, а неизвестен только один - α_{13}. Его надо найти. Коэффициент теплового расширения вдоль направления, составляющего угол в 45^0 с осями X_3 и X_1, найдется из соотношения для определения величины свойства в заданном направлении. При этом следует иметь ввиду, что направление в 45^0 с осями X_3 и X_1 задается единичным вектором $\bar{n}\ (\sqrt{2}/2,\ 0,\ \sqrt{2}/2)$. Поэтому можно записать:

$$\alpha_n = \alpha_{ij}\cdot n_i n_j = (\alpha_{11}\cdot n_1^2 + \alpha_{33}\cdot n_3^2 + 2\alpha_{13}\cdot n_1 n_3) = $$
$$= (\sqrt{2}/2)^2\cdot(\alpha_{11} + \alpha_{33} + 2\alpha_{13}).$$

По условию задачи эта величина равна $16\cdot10^{-6}$ *град*$^{-1}$. Поэтому имеем уравнение для определения компоненты тензора α_{13}:

$$16\cdot10^{-6} = \frac{1}{2}(\alpha_{11} + \alpha_{33} + 2\alpha_{13});$$

$$\alpha_{13} = 16\cdot10^{-6} - \frac{1}{2}(\alpha_{11} + \alpha_{33}).$$

Отсюда находим: $\alpha_{13} = -7{,}5\cdot10^{-6}$ *град*$^{-1}$.

Следовательно, тензор теплового расширения этого кристалла в системе координат X_1, X_2, X_3 имеет вид

$$\|\alpha_{ij}\| = \begin{Vmatrix} 15 & 0 & -7..5 \\ 0 & 41 & 0 \\ -7.5 & 0 & 32 \end{Vmatrix}\cdot10^{-6}\ \text{град}^{-1}.$$

Найдем главные коэффициенты теплового расширения - собственные значения тензора теплового расширения. Для этого требуется решить характеристическое уравнение, которое будет иметь вид:

$$\begin{vmatrix} 15-\lambda & 0 & -7.5 \\ 0 & 41-\lambda & 0 \\ -7.5 & 0 & 32-\lambda \end{vmatrix} = 0 .$$

Это характеристическое уравнение может быть представлено в виде произведения двух сомножителей, поскольку данный определитель можно разложить по минорам, вычеркнув второй столбец и вторую строку (взято из курса «Линейная алгебра» как известный способ вычисления определителей высокого порядка):

$$(41-\lambda)\cdot\begin{vmatrix} 15-\lambda & -7.5 \\ -7.5 & 32-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

Отсюда находим, что $\lambda_1 = 41$. Далее, раскрываем и приравниваем к нулю второй сомножитель

$$(15-\lambda)\cdot(32-\lambda) - 7.5\cdot 7.5 = 0 .$$

Решая это квадратное уравнение относительно неизвестной величины λ, найдем два дополнительных корня:

$$\lambda_2 = 34.8, \qquad \lambda_3 = 12.2.$$

Таким образом, главные коэффициенты теплового расширения равны:

$$\alpha_1 = 41\cdot 10^{-6}\,\textit{град}^{-1},\ \ \alpha_2 = 34.8\cdot 10^{-6}\,\textit{град}^{-1},\ \alpha_3 = 12.2\cdot 10^{-6}\,\textit{град}^{-1}.$$

5 ТРЕБОВАНИЯ К СОДЕРЖАНИЮ И ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТА

1. Отчет по лабораторной работе должен содержать следующие разделы:
   - цель лабораторной работы,
   - теоретическая часть,
   - описание расчетной части лабораторной работы,
   - конкретные данные на выполнение лабораторной работы,
   - полученные расчетные результаты в виде матриц преобразования,
   - объяснение полученных результатов на основе симметрии кристалла.
2. Отчет должен быть набран в редакторе Word и представлен в скрепленном виде. Схемы и графики выполнены в графическом редакторе и вставлены в текст отчета. Рекомендуемые параметры для набора текста: шрифт Arial – 12, поля со всех сторон по 2 см, полуторный интервал между строк.
3. В случае выполнения работы несколькими студентами в конце отчета должно быть указано конкретное участие каждого в выполнении работы.
4. В соответствии с рейтинговой системой качество выполнения лабораторной работы и оформления отчета оценивается в баллах, которые суммируются с баллами по контрольным работам.

6 РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Сиротин, Ю.И., Основы кристаллофизики. Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. - М: Наука, 1979. - 640с.
2. Най, Дж. Физические свойства кристаллов. Дж. Най. - М.: Мир, - 1967. – 388с.
3. Давыдов, В.Н. Материалы электронной техники и методы их анализа. В.Н. Давыдов. Томск, ТУСУР, 2013. - 132 с.