

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ (ТУСУР)
КАФЕДРА ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ (ЭП)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УР ТУСУР
_____ П.Е. Троян
« ____ » _____ 2017 года

Давыдов В.Н.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ НАПРАВЛЕНИЙ
ДЛЯ ЗАДАННОГО ЗНАЧЕНИЯ ФИЗИЧЕСКОГО СВОЙСТВА
ВТОРОГО РАНГА**

Учебно - методическое пособие к лабораторной работе
по дисциплине «Материалы электронной техники»
для студентов направления
11.03.04 – Электроника и наноэлектроника,
Профиль «Квантовая и оптическая электроника»

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|----|
| 1. ВВЕДЕНИЕ..... | 3 |
| 2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ..... | 3 |
| 2.1. Основные положения теории тензоров второго ранга..... | 3 |
| 2.2. Введение тензоров второго ранга в задачах кристаллофизики..... | 5 |
| 2.3. Нормальные и тангенциальные составляющие тензора второго ранга..... | 9 |
| 2.4. Указательная и характеристические поверхности тензора второго ранга..... | 10 |
| 2.5. Вопросы для самостоятельного контроля знаний..... | 12 |
| 3. РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ..... | 12 |
| 3.1. Задание к лабораторной работе..... | 12 |
| 3.2. Схема определения кристаллографических направлений для заданного значения физического свойства..... | 13 |
| 4. ТРЕБОВАНИЯ К СОДЕРЖАНИЮ И ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТА..... | 15 |
| 5. ЛИТЕРАТУРА..... | 16 |

1. ВВЕДЕНИЕ

Для создания элементов электронной техники широко используют электро-технические материалы, находящиеся в различных состояниях: аморфные, поликристаллические, сплавы, кристаллы и т.д. Среди этих состояний кристаллические материалы используют для изготовления прецизионной аппаратуры, высокочувствительных резисторов, конденсаторов и других элементов. Применение в электронной технике для изготовления элементов кристаллических веществ различной симметрии позволяет получать элементы, в которых в заданной пропорции сочетаются различные физические свойства выбранного кристалла. Это позволяет создавать элементы с принципиально новыми функциональными возможностями и свойствами.

В этой связи необходимо студентам должны знать основные структурные свойства кристаллического вещества, в которых доминирующая роль принадлежит элементам точечной симметрии.

Целью данной лабораторной работы является изучение студентами основных элементов симметрии кристаллов, их свойств, а также получение навыков математической записи действия элементов симметрии на структуру кристалла путем составления матрицы преобразования системы координат выбранным элементом симметрии.

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 более 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, ориентируя 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 \bar{P} , вызванная внешним электрическим полем \bar{E} , вектор электрической индукции $\bar{D} = \bar{E} + 4\pi\bar{P}$ ориентирован в общем

случае по всем трем осям координат, даже если вектор \vec{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 $\vec{E}(E_1, E_2, E_3)$ 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

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

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

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

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.

Для понимания этого закона покажем на примере вычисления компоненты $T_{1'1'}$ при смене системы координат. Согласно выражению (1) компонента тензора в новой системе координат представляет собой сумму из девяти слагаемых (полагаем $i' = j' = 1'$, а индексы k, l пробегает значения 1, 2, 3):

$$\begin{aligned} T_{1'1'} &= C_{1'k} C_{1'l} T_{kl} = C_{1'1}^2 T_{11} + C_{1'1} C_{1'2} T_{12} + C_{1'1} C_{1'3} T_{13} + \\ &+ C_{1'2} C_{1'1} T_{21} + C_{1'2}^2 T_{22} + C_{1'2} C_{1'3} T_{23} + C_{1'3} C_{1'1} T_{31} + \\ &+ C_{1'3} C_{1'2} T_{32} + C_{1'3}^2 T_{33}. \end{aligned}$$

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

После того, как рассмотрен конкретный пример введения тензора второго ранга, перейдем к выяснению условий, приводящих к таким математическим объектам, используемым в кристаллофизике для описания физических свойств кристаллов, наблюдаемых в различных условиях. При этом следует иметь в виду, что в линейном уравнении, описывающем следствие S физического воздействия на кристалл W

$$S = \hat{T} \cdot W, \quad (2)$$

ранг тензора S левой части выражения (2), обязательно равен рангу правой части (2), представляющего собой свертку (суммирование по одинаковым индексам) тензоров физического свойства \hat{T} и воздействия W и потому равно разности рангов тензоров \hat{T} и W . Значит, если ранг воздействия и следствия равны единице, то ранг тензора \hat{T} равен двум.

Общим правилом, справедливым для всех рассматриваемых далее тензорах, является следующее: если тензор действует на линейную комбинацию векторных полей $\bar{U}^{(1)}$ и $\bar{U}^{(2)}$, то результат его действия равен сумме результатов от независимых действий тензора на каждое векторное поле в отдельности:

$$\hat{T}(\lambda\bar{U}^{(1)} + \mu\bar{U}^{(2)}) = \lambda\hat{T}(\bar{U}^{(1)}) + \mu\hat{T}(\bar{U}^{(2)}),$$

где λ и μ - любые вещественные числа. Это означает, что рассматриваемый тензор действует как линейный оператор, отображающий одно множество векторов на другое множество.

Рассмотрим специальные случаи линейных преобразований векторных множеств вида (4.4), производимых тензорами второго ранга, которые будут использоваться при дальнейшем рассмотрении:

1. Если векторы \bar{V} просто равны векторам \bar{U} , то связывающий их называется **единичным** и обозначается \hat{I} . В любой системе координат его компоненты равны 1 или 0:

$$I_{kl} = \delta_{kl}.$$

2. Если векторы \bar{V} параллельны векторам \bar{U} и длиннее их в λ раз, то линейная зависимость \bar{V} от \bar{U} реализуется тензором $\lambda\hat{I}$. Тензоры такого вида называются **шаровыми**.

3. В векторной алгебре компонента вектора \bar{U} , параллельная некоторому заданному единичному вектору \bar{k} , может быть определена вычислением скалярного произведения: $\bar{k}(\bar{k} \cdot \bar{U})$.

В тензорной алгебре аналогичная операция записывается в виде: $\hat{k}\bar{k}\bar{U}$ и называется **диадой**. Если же в векторной алгебре требуется определить компоненту вектора \bar{U} , перпендикулярную вектору \bar{k} , то это можно сделать вычислением выражения: $\bar{U} - \bar{k}(\bar{k} \cdot \bar{U})$. Эта запись предполагает, что вектор \bar{U} разлагается на сумму двух векторов, один из которых параллелен вектору \bar{k} , а другой перпендикулярен. Аналогично, проецирование тензоров второго ранга на плоскость, перпендикулярную к единичному вектору \bar{k} осуществляется тензором: $\hat{I} - \hat{k}\bar{k}$.

4. Как и всякую матрицу, тензор второго ранга можно транспонировать (поменять строки и столбцы местами). Если при этом тензор не изменяется $\hat{T} = \hat{T}^*$, то он называется **симметричным**;

в противном случае - **антисимметричным** $\hat{T} = -\hat{T}^*$.

5. Любой тензор \hat{T} можно разложить на симметричную

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \left(\hat{T} + \hat{T}^* \right)$$

и антисимметричную части $\hat{A} = \frac{1}{2} \left(\hat{T} - \hat{T}^* \right)$.

Так, в развернутом виде разложение тензора второго ранга на симметричную и антисимметричную части будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{23} & T_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} T'_{11} & T'_{12} & T'_{13} \\ T'_{12} & T'_{22} & T'_{23} \\ T'_{13} & T'_{23} & T'_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 & T''_{12} & T''_{13} \\ -T''_{12} & 0 & T''_{23} \\ -T''_{13} & -T''_{23} & 0 \end{vmatrix}.$$

В системе координат, построенной на собственных векторах, симметричная часть тензора представляет собой тензор диагонального типа с собственными значениями по диагонали. Остальные его компоненты равны нулю. В свою очередь выбором соответствующей системы координат антисимметричный тензор также может быть приведён к простейшему виду:

$$\begin{vmatrix} 0 & T'''_{12} & 0 \\ -T'''_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}.$$

Здесь ось с нулевыми компонентами называется **главной осью** и в приведённом примере она совпадает с осью X_3 .

Симметричная часть тензора, в свою очередь, разлагается на **шаровую (сферическую) часть**, каждый диагональный элемент которой вычисляется как треть суммы диагональных элементов симметричной части тензора

$$H_{ij} = \frac{1}{3} S_{kk} \cdot \delta_{ij},$$

и **девиатор**:

$$D_{ij} = S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \cdot \delta_{ij}.$$

В итоге любой тензор второго ранга \hat{T} можно представить в следующем виде:

$$\hat{T} = \hat{S} + \hat{A} = \hat{H} + \hat{D} + \hat{A}.$$

В заключение параграфа дадим физическую интерпретацию процедурам выделения симметричной и антисимметричной частей, шаровой части и девиатора тензора второго ранга.

Предположим, что в результате измерений физического свойства (например, электропроводности кристалла) получены численные значения компонент тензора второго ранга. Требу-

ется выяснить физические механизмы, объясняющие полученные значения измеренного свойства. Стратегию объяснения строим по методу последовательных приближений.

Первый шаг. Сначала из полученного тензора выделяем симметричную и антисимметричную части. Это означает, что в своих объяснениях физических механизмов возникновения электропроводности ограничиваемся линейным приближением связи причины и следствия (электрического поля и плотности тока). При этом симметричная часть отражает существование физических механизмов возникновения электропроводности кристалла, дающих ток в том же направлении, что и действующее электрическое поле, а также электропроводности, не зависящей от перемены местами причины и следствия. Антисимметричная часть тензора отражает наличие физических механизмов электропроводности, дающих ток в перпендикулярном к полю направлении, причем перемена местами причины и следствия меняет направление следствия на обратное (ток течет в обратном направлении).

В зависимости от численных значений компонент симметричной и антисимметричной частей тензора можно приписать большее или меньшее влияние физическим механизмам, ответственным за симметричную и антисимметричную проводимость кристалла. В эксперименте большие значения антисимметричной части тензора могут свидетельствовать об отклонении траектории электронов от прямолинейной, например, за счет действия неконтролируемого магнитного поля или намагниченности кристалла, наведенной приложенным электрическим полем.

Второй шаг. Если в разбиении физических механизмов электропроводности кристалла на симметричную и антисимметричную части не удастся полностью понять механизм электропроводности, то возможно дальнейшее разбиение тензора путем выделения из симметричной части тензора шаровой части и девиатора. Такое разбиение на уровне физической модели кристалла означает, что анизотропный кристалл заменяется изотропной средой (с электропроводностью, равной компоненте шарового тензора) со свойством, описываемом шаровой частью тензора. В кристалле также имеются элементы анизотропной среды, описываемые элементами девиатора. Если наибольшие значения имеют компоненты шаровой части, то это означает, что кристалл для данного физического свойства близок к изотропной среде.

Третий шаг. После того, как будет дано объяснение численным значениям компонент тензора (электропроводности) в приближении изотропной среды модель уточняется введением в рассмотрение анизотропии кристалла, что достигается учётом в физической модели роли девиатора тензора. Чем выше численные значения его компонент, тем ярче выражена анизотропия исследуемого физического свойства.

2.3. Нормальные и тангенциальные составляющие тензора второго ранга

По аналогии с тем, что для любой геометрической поверхности в каждой ее точке можно построить нормальную и тангенциальную составляющие, такие же составляющие вводятся в рассмотрение для тензоров второго ранга.

Нормальной составляющей симметричного тензора второго ранга \hat{T} в направлении единичного вектора \bar{n} называется число

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

представляющее собой результат скалярного умножения вектора \bar{n} на вектор, полученный в результате преобразования тензором \hat{T} вектора \bar{n} . Если принять единичный вектор \bar{n} за один из ортов новой координатной системы X_1, X_2, X_3 , ($\bar{n} = \bar{e}_1$), то нормальная составляющая в направлении вектора \bar{n} окажется просто соответствующей диагональной компонентой тензора в системе X_1, X_2, X_3 . В данном примере

$$\left(\bar{n} \cdot \hat{T} \bar{n} \right) = T_{11}.$$

В системе координат, построенной на главных осях тензора, выражения для вычисления нормальной составляющей принимают наиболее простой вид:

$$\left(\bar{n} \cdot \hat{T} \bar{n} \right) = S_1 \cdot n_1^2 + S_2 \cdot n_2^2 + S_3 \cdot n_3^2.$$

Если, в частности, два собственных значения совпадают, то его нормальная составляющая будет зависеть только от компоненты $n_3 = (\bar{n} \cdot \bar{k})$:

$$\left(\bar{n} \cdot \hat{T} \bar{n} \right) = S_{\perp} \cdot (1 - n_3^2) + S_{\parallel} \cdot n_3^2 = S_{\perp} + (S_{\parallel} - S_{\perp}) \cdot n_3^2,$$

где обозначено: $S_{\parallel} = S_3$, $S_{\perp} = S_1 = S_2$. Наконец, если все три собственных значения тензора совпадают, то нормальная составляющая такого тензора одинакова для любого направления в пространстве и равна:

$$\left(\bar{n} \cdot \hat{T} \bar{n} \right) = S, \quad S = S_1 = S_2 = S_3.$$

Итак, нормальная составляющая тензора равна величине физического свойства, описываемого данным тензором, в направлении вектора \bar{n} .

Рассмотрим тангенциальные составляющие симметричного тензора второго ранга. Пусть

\hat{T} - тензор второго ранга, а \bar{p} и \bar{q} - взаимно перпендикулярные единичные вектора:

$$(\bar{p} \cdot \bar{p}) = 1, \quad (\bar{q} \cdot \bar{q}) = 1, \quad (\bar{p} \cdot \bar{q}) = 0.$$

Тогда тангенциальной составляющей тензора \hat{T} в направлениях векторов \bar{p} и \bar{q} называется число:

$$\left(\bar{p} \cdot \hat{T} \bar{q} \right) = T_{ij} \cdot p_i \cdot q_j,$$

представляющее собой результат скалярного умножения вектора \bar{p} и преобразованного тензором \hat{T} вектора \bar{q} . Так как рассматриваемый тензор \hat{T} симметричен, то направления \bar{p} и \bar{q} абсолютно равноправны и взаимозаменяемы. Пользуясь тем, что единичные векторы \bar{p} и \bar{q} взаимно перпендикулярны, на них можно построить новую систему координат X_1, X_2, X_3 , орты которой равны:

$$\bar{e}_1 = \bar{p}, \quad \bar{e}_2 = \bar{q}, \quad \bar{e}_3 = [\bar{p} \times \bar{q}].$$

В новой системе координат тангенциальная составляющая тензора второго ранга будет равна:

$$\left(\bar{p} \cdot \hat{T} \bar{q} \right) = T_{12}.$$

Отсюда следует, что если нормальные составляющие тензора соответствуют его диагональным компонентам, то тангенциальные составляющие есть его недиагональные элементы.

В системе координат, построенной на собственных векторах тензора, тангенциальные составляющие выражаются следующим образом:

- в общем случае: $\left(\bar{p} \cdot \hat{T} \bar{q} \right) = S_1 \cdot p_1 \cdot q_1 + S_2 \cdot p_2 \cdot q_2 + S_3 \cdot p_3 \cdot q_3$;
- при совпадении двух собственных значений: $\left(\bar{p} \cdot \hat{T} \bar{q} \right) = (S_{||} - S_{\perp}) \cdot p_3 \cdot q_3$;
- при совпадении трех собственных значений: $\left(\bar{p} \cdot \hat{T} \bar{q} \right) = 0$.

2.4. Указательная и характеристическая поверхности тензора второго ранга

Каждый тензор можно представить в наглядной форме, нарисовав его в трехмерном пространстве как геометрическую фигуру, поверхность. Существует два способа отображе-

ния тензора в виде пространственной фигуры (поверхности).

Указательная поверхность. Первый способ заключается в следующем: каждому тензору второго ранга \hat{T} с компонентами T_{kl} ставится в соответствие указательная поверхность второго порядка в пространстве $X_1X_2X_3$, которая определяется следующим образом: радиус-вектор r , откладываемый из начала координат до любой точки указательной поверхности, равен величине физического свойства $r = T_{kl} n_k n_l$. Она строится следующим образом. Перебираются все возможные направления единичного вектора $\bar{n} (n_1, n_2, n_3)$ в пространстве и для каждого из них вычисляется величина физического свойства в данном направлении. Затем, из начала координат в направлении выбранного единичного вектора откладывается отрезок длиной r , равной величине физического свойства. Концы отрезка r опишут в пространстве некоторую поверхность, которая называется **указательной**. Симметрия указательной поверхности отражает симметрию рассматриваемого физического свойства.

Простой пример указательной поверхности: в изотропной среде она представляет собой сферу, т.к. величина физического свойства одинакова во всех направлениях.

Характеристическая поверхность. Второй способ заключается в следующем: другая поверхность тензора строится как поверхность равного свойства и определяется выражением:

$$T_{ij} X_i X_j = 1$$

и называется **характеристической поверхностью**. Это поверхность второго порядка, которая хорошо известна из курса высшей математики. В системе координат, построенной на собственных векторах данного тензора, вид характеристической поверхности предельно упрощается, т.к. в этом случае у тензора оказываются отличными от нуля только диагональные элементы, которые равны собственным значениям S_1, S_2, S_3 . Таким образом, уравнение характеристической поверхности будет иметь следующий вид

$$T_{ij} X_i^2 = S_{11} X_1^2 + S_{22} X_2^2 + S_{33} X_3^2 = 1,$$

где $S_{11} = S_1, S_{22} = S_2, S_{33} = S_3$. Возможные варианты видов характеристической поверхности ограничены и определяются величинами собственных значений тензора S_1, S_2, S_3 :

- * если значения S_1, S_2, S_3 положительны и не совпадают между собой, то характеристическая поверхность - это эллипсоид общего вида;
- * если значения S_1, S_2, S_3 положительны и два из них равны друг другу: $S_1=S_2$, то характеристическая поверхность – это эллипсоид вращения;
- * если собственные значения S_1, S_2, S_3 положительны и равны $S_1=S_2=S_3$, то характеристическая поверхность имеет форму сферы;

- * если два собственных значения положительны, а третье отрицательно, то характеристическая поверхность - однополостной гиперboloид;
- * если два собственных значения отрицательны, а третье положительно, то характеристическая поверхность - двуполостной гиперboloид;
- * если все три собственных значения S_1, S_2, S_3 отрицательны, то характеристическая поверхность - мнимый эллипсоид.

2.5. Вопросы для самостоятельной проверки знаний

1. Что такое тензор второго ранга?
2. Запишите закон изменения компонент тензора второго ранга при смене системы координат.
3. Как определить ранг тензора в линейной зависимости следствия от воздействия?
4. Как разложить тензор второго ранга на симметричную и антисимметричную части?
5. Что характеризуют симметричная и антисимметричная части тензора второго ранга? Дать физическое объяснение.
6. Как выделить из тензора второго ранга шаровую часть и девиатор?
7. Как вычисляется нормальная составляющая тензора и что она описывает?
8. Что такое указательная поверхность тензора, как она вычисляется и что характеризует?
9. Как вычисляется тангенциальная составляющая тензора и что она описывает?
10. Что такое характеристическая поверхность тензора и как она вычисляется?

3. РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ

3.1. Задание к лабораторной работе

3.1.1. Получите у преподавателя задание на лабораторную работу в виде тензора второго ранга, описывающего рассматриваемое физическое свойство, и заданного значения физического свойства.

3.1.2. Составьте схему расчета результирующего преобразования кристалла с использованием матриц преобразования для действия каждого элемента симметрии из задания.

3.1.3. Получите матрицу преобразования системы координат каждого элемента симметрии из задания на лабораторную работу.

3.1.4. Получите координаты единичных векторов, указывающих кристаллографические направления, вдоль которых физическое свойство принимает заданное значение.

3.1.5. Составьте отчет о проделанной работе.

3.2. Схема определения кристаллографических направлений

для заданного значения физического свойства

При разработке элементов и приборов опто- и наноэлектроники часто приходится решать задачу определения кристаллографического направления, задающего ориентацию кристаллической пластины, вдоль которого используется в работе прибора физическое свойство (электрическое, оптическое, упругое и т.д.) кристалла достигает требуемого значения. Для решения подобных задач в кристаллофизике имеются ставшие классическими следующие методы: нахождение экстремальных значений целевой функции по методу неопределенных множителей Лагранжа, отыскание собственных векторов и собственных значений физического свойства, описываемого тензором второго ранга. В применении к тензорам высших рангов к указанным методам можно также отнести определение ориентации пластины по заданному значению нормальной составляющей тензора.

Для описания физических свойств кристаллов наиболее часто используют тензоры второго ранга. По мере усложнения физических процессов формирования рассматриваемого свойства ранг тензора повышается. В современной науке и приборостроении все чаще используют свойства третьего и четвертого рангов. По указанной причине и наглядности предлагаемый метод к решению многофакторной задачи продемонстрирован на примере задачи с сочетанием двух физических свойств второго ранга в кристаллах низшей категории, поскольку такие кристаллы имеют достаточно сложную внутреннюю симметрию тензоров, описывающих их физические свойства, что расширяет набор точечных групп симметрии, охватываемых методом.

Алгоритм решения. Пусть требуется определить кристаллографические направления, задаваемые единичными векторами \vec{n} , вдоль которых величина физического свойства (диэлектрической проницаемости) кристалла типа виннокислого калия принимает значение 80% от максимального его значения. При этом тензор диэлектрической проницаемости кристалла моноклинной сингонии в стандартной установке кристаллофизической системы координат, когда ось X_2 направлена по симметрии второго порядка, имеет вид

$$\|\varepsilon_{ij}\| = \begin{vmatrix} 37.8 & 0 & 17.6 \\ 0 & 166.0 & 0 \\ 17.6 & 0 & 60.1 \end{vmatrix} \cdot \varepsilon_0, \Phi \cdot \text{см}^{-1}, \quad (1)$$

где ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума.

Поскольку по условию задачи необходимо знать максимальные значения физического свойства, воспользуемся теоремой кристаллофизики, утверждающей, что собственные значения тензора второго ранга определяют максимальное и минимальное значения физического

свойства, а собственные векторы задают кристаллографические направления, вдоль которых достигаются указанные значения данного свойства [3].

Система уравнений для нахождения экстремальных значений рассматриваемого физического свойства $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ и кристаллографических направлений $\vec{n}(n_1, n_2, n_3)$ имеет вид

$$\begin{cases} (87.8 - \lambda) \cdot n_1 + 17.6 \cdot n_3 = 0, \\ (66.0 - \lambda) \cdot n_2 = 0, \\ 17.6 \cdot n_1 + (60.1 - \lambda) \cdot n_3 = 0, \\ n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1. \end{cases} \quad (2)$$

Система (2) имеет характеристическое уравнение, решениями которого являются собственные значения $\lambda_1 = 66.0$, $\lambda_2 = 96.0$, $\lambda_3 = 52.0$. Отсюда следует, что максимальное значение обобщенного физического свойства в данном кристалле составляет 96 относительных единиц, которое достигается в направлении, задаваемом вектором $\vec{n}_{\max}(n_1, n_2, n_3)$. Координаты вектора найдем из системы (2):

$$n_1 = 0.9, \quad n_2 = 0.0, \quad n_3 = \pm 0.4.$$

На следующем этапе необходимо найти кристаллографические направления, вдоль которых величина обобщенного свойства составляет заданные 80% от его максимального значения, что составляет около 77 единиц. Эта задача является обратной по отношению к вычислению нормальной составляющей заданного тензора в направлении заданного вектора единичной длины. Поэтому система уравнений для нахождения компонент вектора будет иметь вид

$$\begin{cases} S_{ij} n_i n_j = 77, \\ n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1. \end{cases} \quad (3)$$

Система уравнений (3) может быть решена методом координатных плоскостей, когда поочередно одна из компонент вектора \vec{n} обращается в нуль.

В случае $n_1 = 0.0$ система (3) с учетом тензора (1) переписется в виде

$$\begin{cases} 66.0 \cdot n_2^2 + 60.1 \cdot n_3^2 = 77, \\ n_2^2 + n_3^2 = 1. \end{cases}$$

Эта система решений не имеет. Для случая $n_2 = 0.0$ из системы (3) будем иметь

$$\begin{cases} 87.8 \cdot n_1^2 + 60.1 \cdot n_3^2 + 35.2 \cdot n_1 n_3 = 77, \\ n_1^2 + n_3^2 = 1. \end{cases}$$

Ее решение приводит к уравнению $2006 \cdot n_1^4 - 2175 \cdot n_1^2 + 285 = 0$, корнями которого являются $n_1 = \pm 0.9$ и $n_1 = \pm 0.4$. Для плоскости $X_1 O X_3$ искомыми направлениями будут $\vec{n}^{(1)}(0.4, 0.0, 0.9)$, $\vec{n}^{(2)}(-0.4, 0.0, 0.9)$, $\vec{n}^{(3)}(0.9, 0.0, 0.4)$ и $\vec{n}^{(4)}(-0.9, 0.0, 0.4)$.

Для поиска решения в плоскости $X_2 O X_3$, когда $n_3 = 0.0$, получим систему

$$\begin{cases} 87.8 \cdot n_1^2 + 66.0 \cdot n_2^2 = 77, \\ n_1^2 + n_2^2 = 1, \end{cases}$$

решениями которой являются векторы: $\vec{n}^{(a)}(0.7, 0.7, 0.0)$ и $\vec{n}^{(b)}(-0.7, 0.7, 0.0)$.

Данный метод применим для кристаллов различной точечной симметрии и сочетания лю-

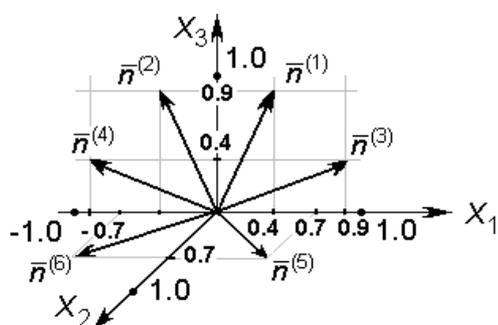


Рис. 1. Кристаллофизическая система координат в моноклинной сингонии и векторы оптимальной ориентации физического свойства

бого числа физических свойств, описываемых тензорами или псевдотензорами. Поскольку симметрия Кюри физических свойств в методе не ограничивает его возможностей, то это означает, что рассматриваемые свойства могут быть как полевой, так и аксиальной природы. Если максимальные значения одних свойств нужно объединять с минимальными значениями других, то вычислением обратных тензоров входящих в обобщение физические свойства, приводятся к одному типу экстремума: либо все минимизируют, либо ищут направления их максимальных значений.

Согласно полученным результатам, требуемое значение физического свойства в рассматриваемом кристалле моноклинной сингонии достигается в шести кристаллографических направлениях, четыре из которых лежат в плоскости X_1OX_3 и два в плоскости X_1OX_2 . На рис.1 показаны векторы оптимальной ориентации, вдоль которых физическое свойство принимает заданное значение. Вырезая кристаллическую пластину перпендикулярно любому из указанных векторов, получим оптический элемент с заданным значением (от максимальной величины) физического свойства.

Данный метод будет полезен при создании кристаллических приборов, передаточная функция которых учитывает наличие у подложки многих физических свойств различных рангов: спонтанной пьезополяризации, пиро- и пьезоэлектрического эффектов, температурного расширения кристалла и их комбинаций, а также свойств высших рангов. К таким приборам можно отнести светодиодные гетероструктуры с множественными квантовыми ямами в оптоэлектронике, многочисленные элементы и приборы управления оптическим излучением в квантовой электронике и фотонике, а также другие устройства на кристаллах.

4. 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 единичных векторов кристаллографических направлений,
 - объяснение полученных результатов на основе теории 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.

5. ЛИТЕРАТУРА

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