

# 1 ВВЕДЕНИЕ

Данное учебно-методическое пособие включает в себя материалы, необходимые для усвоения теоретической части дисциплины «Материалы электронной техники», а также для приобретения навыков решения задач по расчету параметров и величин физических свойств кристаллов, используемых при создании элементов электронной техники.

Структурно пособие состоит из глав, в каждой из которых рассматриваются физические свойства, описываемые тензорами разных рангов: с первого ранга по четвертый включительно, а также их фундаментальные свойства. Каждая глава предваряется кратким изложением теории, необходимой для решения задач этой главы, за которым следуют примеры решения типичных задач и затем задачи для самостоятельного решения.

В пособии приведены примеры решения задач по вычислению физических свойств первого ранга, второго ранга с вычислением экстремальных значений физического свойства и направления его реализации, составления тензоров упругих напряжений, физических свойств третьего и четвертого рангов.

В приложении к пособию помещены таблицы с указанием вида тензоров третьего и четвертого ранга в матричной форме кристаллов различных сингоний и точечных групп. Данные материалы необходимы при решении задач на определение физических свойств, описываемых тензорами различных рангов.

Данное учебно-методическое пособие составлено по результатам более чем 20-летнего опыта преподавания дисциплины в техническом университете. При составлении программы курса автор основывался на структуре фундаментальной монографии Ю.И.Сиротина и М.П. Шаскольской «Основы кристаллофизики» М.: 1979. и учебно-методическом пособии по кристаллофизике Н.В. Переломова, М.М. Тагиева. «Задачник по кристаллофизике». М.: Наука, 1972. Исходя из опыта преподавания дисциплины, материалы указанных монографии и задачника кардинальным образом переработаны и дополнены автором как по структуре разделов, математическому изложению материала, так и физическому содержанию математических операций, основных терминов, понятий, принципов.

## **ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ, ОПИСЫВАЕМЫЕ ТЕНЗОРАМИ ПЕРВОГО РАНГА**

### **2.1 Краткое изложение теории**

Прежде чем рассматривать конкретные физические свойства заданного ранга, вспомним, как определяется ранг тензора физического свойства и его характер: полярный или аксиальный.

Если причина  $P$ , приложенная к кристаллу и описываемая тензором ранга  $r_1$ , вызывает следствие  $S$ , описываемое тензором ранга  $r_2$ , и линейная связь между ними устанавливается тензором  $T$  :

$S = TP$ ,

то ранг  $R$  тензора  $T$  будет равен сумме рангов тензорных величин  $P$  и  $S$ :  $R = r_1 + r_2$ . Приведем пример вычисления ранга тензора, устанавливающего линейную связь между двумя величинами: электрическое поле  $E$  в кристалле вызывает электрический ток  $J$ , причем  $J = jE$ .

Поскольку электрическое поле имеет ранг  $r_1 = 1$  (это вектор, а вектор - это тензор первого ранга по определению), ток через кристалл также векторная величина и потому  $r_2 = 1$ . Значит, ранг тензора равен  $R = r_1 + r_2 = 1 + 1 = 2$ .

Тип тензора, описывающего линейную связь между причиной и следствием, определяется следующим образом: если тензорные величины  $P$  и  $S$  описываются полярными или аксиальными тензорами, то тензор  $T$  будет являться полярным тензором всегда (даже в случае аксиальных тензоров  $P$  и  $S$ ). Если же один из тензоров  $P$  или  $S$  является тензором аксиальным, а другой полярным, то тензор  $T$  будет аксиальным вне зависимости от того, какой из тензоров  $P$  и  $S$  является аксиальным, а какой полярным.

Иногда возникают ситуации, когда порядок вычисления ранга тензора несколько отличается от приведенного выше. В этих случаях мы будем оговаривать его отдельно.

Теперь обратимся к рассмотрению физических свойств, описываемых полярными тензорами первого ранга. Они следующие.

**1. Пироэлектрический эффект** (иногда его называют сокращенно: пироэффект) описывает изменения спонтанной, т.е. существующей в отсутствие внешнего электрического поля, поляризации  $s$  кристалла при увеличении или уменьшении его температуры. За счет спонтанной поляризации на противоположных гранях кристалла появляются связанные заряды. Их плотность зависит от направления вектора спонтанной

поляризации  $s$  относительно граней кристалла:

$$P_s = P_s \cos \theta, \quad (1)$$

где  $n$  - единичный вектор нормали к грани кристалла, на которой регистрируются связанные заряды;  $\theta$  - угол между нормалью к поверхности и вектором поляризации. Наличие связанных зарядов на поверхности

приводит к появлению электрического поля в окружающем кристалл пространстве. Оно притягивает из атмосферы заряженные частицы. По истечении некоторого времени (обычно не более нескольких часов) заряженные грани кристалла пирозлектрика оказываются покрытыми слоем противоположно заряженных ионов, нейтрализующих связанные заряды на поверхности пирозлектрика. Поэтому в равновесных условиях обнаружить наличие спонтанной поляризации кристалла невозможно. Для этого необходимо каким-либо способом нарушить равновесие между осевшими на кристалл зарядами и связанными зарядами на поверхности.

можно, если изменить температуру  
 В реальных условиях наблюдать кристалла (нагреть или охладить) на величину  $T$  и регистрировать изменение вектора поляризации. Если изменения температуры малы, то функциональную зависимость общего вида  $P_s(T)$  можно аппроксимировать (заменить) линейной зависимостью. Математически это означает, что зависимость общего вида  $P_s(T)$  разлагают в степенной ряд по малому параметру  $T$  и разложение ограничивают первым (линейным) членом:

$$P_s(T) \approx P_s(0) + T \cdot \dots \quad (2)$$

В данном выражении в качестве тензора, описывающего физическое свойство, выступает множитель, обозначенный как  $\dots$ . Он должен быть полярным

вектором: иначе левая и правая части выражения (2) окажутся рангами разной размерности, что недопустимо.

Поэтому можно записать, что  $1, 2, 3$  есть полярный вектор или,

другими словами, тензор пирозлектрических коэффициентов первого ранга. Из выражения (2) видно: чем больше компоненты пирозлектрического вектора, тем большие изменения поляризации будут иметь место при изменении температуры кристалла на один градус. В соответствии с правилом определения ранга тензора, описывающего физическое свойство, в данном

случае ранг тензора  $1, 2, 3$  будет равен единице.

*Ограничения, налагаемые симметрией решетки.* Вектор  $s$ , благодаря своей симметрии  $m$  (симметрия полярного вектора), может существовать в кристаллах вдоль единичного полярного направления. Поэтому по принципу Неймана, пирозэффект возможен в кристаллах, группы симметрии которых являются подгруппами группы симметрии полярного вектора  $m$ .