

КРИСТАЛЛОФИЗИКА

УДК 530.1

КРИСТАЛЛОФИЗИКА В ТВЕРСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

Ю.М. Смирнов

Кафедра прикладной физики

Приведено резюме основных итогов деятельности научной школы кристаллофизиков ТвГУ. Научная школа кристаллофизиков существует и развивается в ТвГУ 30 лет. За этот период реализованы серьезные научные и практические результаты.

Исследование симметрии сложных динамических систем позволило создать симметрично-термодинамический метод их анализа. В методе использованы принципы симметричного описания термодинамических сил и потоков и их деление по чётности. Силы и потоки, являющиеся скалярами, аксиальными векторами и полярными тензорами второго ранга, относящиеся к величинам чётного типа, и являющиеся полярными векторами и псевдотензорами второго ранга, относящиеся к величинам нечётного типа, при анализе физических и физико-химических процессов строго разделены. Кристаллофизическое существо такого подхода – наличие или отсутствие инверсии в группе симметрии анализируемой величины. В этом случае значительно упрощается уравнение производства энтропии: вместо четырёх отдельно рассматриваемых членов – скалярного, полярно-векторного, аксиально-векторного и тензорного следует анализировать две группы величин – чётные и нечётные.

Выбор термодинамических сил и потоков можно осуществлять, используя понятия факторов ёмкости и интенсивности. Их произведения, приведенные ниже, характеризуют различные виды энергии:

$\vec{F} \cdot d\vec{l}$ - механическая;

$\vec{E} \cdot dq$ ($\vec{q} = q'\vec{l}$) – электрическая;

$\widehat{B} \cdot d\widehat{i}$ - магнитная;

$m\vec{g} \cdot d\vec{h}$ – гравитационная;

Pdv - объёмная;

$m\vec{v} \cdot d\vec{v} \Leftrightarrow \vec{p} \cdot dv$ - кинетическая;

σda - поверхностная;

$\sigma : d\epsilon$ – деформационная;

$\Sigma \mu dn_i$ – химическая.

Факторы интенсивности связаны с термодинамическими силами, а факторы ёмкости – с потоками.

Имеющиеся трактовки принципов Неймана и Кюри часто объективно приводят к представлению о наличии тенденции постепенного понижения

симметрии мира или, в крайнем случае, только сохранения её. Конечно, изначальная формулировка Кюри ничего подобного не предполагает. При рассмотрении взаимодействий сил и потоков в сложных динамических системах нами сформулировано положение, в соответствии с которым общий принцип суперпозиции полевых величин (термодинамических сил) и физических свойств объекта или системы (коэффициентов Онсагера-Казимира) можно трактовать следующим образом: группа симметрии результата (например, плотность потока переносимой величины) является итоговой группой или надгруппой пересечения групп симметрий, описывающих как симметрию воздействий (полевых величин), так и симметрию физических свойств объектов (в общем случае – систем).

Для реализации симметрично-термодинамического метода следует правильно представлять сущность процессов, происходящих в сложной динамической системе. Наиболее существенные этапы метода:

1. Определение наиболее важной переносимой величины;
2. Выявление чётности (нечётности) потока этой величины и, исходя из этого, - определение влияющих на перенос термодинамических сил;
3. Составление общего выражения, связывающего поток и действующие силы через коэффициенты Онсагера – Казимира;
4. Расчёт или экспериментальное определение действующих термодинамических сил;
5. Определение результата – величины плотности потока.

Симметрично-термодинамический метод является наиболее общим подходом ко всему разнообразию процессов переноса. Наряду с переносами массы в процессах роста кристаллов рассмотрены переносы таких экстенсивных величин как объём и поверхность. Локальное изменение энергии в системе с изменяющейся поверхностью может быть записано в виде:

$$dW = \sigma dA, \quad (1)$$

где A – поверхность (площадь). Интенсивная величина в уравнении трактуется различно: свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение или поверхностное напряжение. Сопоставление групп симметрии этих величин позволяет считать, что поверхностное натяжение является аксиальным вектором. Аксиальный вектор – чётная тензорная величина и второй множитель в правой части уравнения (1) тоже должен быть чётной величиной. В приведенном случае это – аксиальный вектор.

Известно, что в некоторых физических эффектах, например, в пиромангнитном и электрокалорическом, симметрия результата повышается. Анализ ряда эффектов позволяет применить к ним закон сохранения чётности: чётность сложной системы определяется произведением чётностей налагаемых на систему (привносимых в систему) эффектов или явлений (обычно – термодинамических действующих сил). Определёнными аналогами правила перемножения чётностей могут быть перемножения операций симметрии первого и второго родов, операций инверсии пространства или времени,

векторные произведения аксиальных и полярных векторов. При векторном умножении векторов результаты являются следующими: $\mathbf{p} \times \mathbf{a} \rightarrow \mathbf{p}$; $\mathbf{a} \times \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}$; $\mathbf{a} \times \mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a}$; $\mathbf{p} \times \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{a}$. Примерами таких умножений могут быть эффекты Магнуса, Холла, Эттингсгаузена и многие другие.

Практическая сторона и значимость исследований связаны с разработанными технологиями выращивания крупногабаритных монокристаллов германия и парателлурида (диоксида теллура).

Германий для инфракрасной оптики должен обладать минимальным поглощением электромагнитного излучения в требуемом интервале длин волн, а в ряде случаев для оптики необходимы монокристаллы с большой площадью поперечного сечения. Расчёты, основанные на характеристиках реальных излучающих объектов, свидетельствуют о целесообразности использования монокристаллов с диаметрами до 700 – 750 мм. Работы в этом направлении были начаты впервые в нашей стране в 1971 г. С самого начала преследовались обе указанные выше цели. И если первая решалась строго дозированным выбором легирующих добавок и регулированием дефектной структуры, то вторая потребовала серии принципиально отличных друг от друга способов выращивания. Уже за первые три года были получены монокристаллы с диаметрами от 160 до 200 мм. Далее диаметры увеличивались примерно на 100 мм каждые 3 – 4 года. Ведущие зарубежные разработчики остались позади. Одновременно уменьшался показатель ослабления лучистой энергии до величин, близких к теоретическим (практически равных им). Методами выращивания монокристаллов в нестационарных режимах роста при строго контролируемых переохлаждениях в поверхностном слое расплава диаметры монокристаллов удалось увеличить до 500 – 620 мм.

Монокристаллы парателлурида (диоксида теллура) обладают исключительно ценными акустооптическими свойствами. Применения их разнообразны – фильтры для АО спектрометров видимого и ближнего ИК диапазонов, используемые в астрономии, перестраиваемые фильтры для поисковых применений, двухкоординатные дефлекторы, высоко чувствительные поляризационные призмы и многое другое. Самые уникальные приборы требуют крупногабаритных совершенных монокристаллов с диаметрами до 80 и высотой до 100 мм. По существу, такие результаты достигнуты и сейчас основные усилия концентрируются на обеспечении максимально возможной оптической однородности.

Новые направления работы связаны с разработкой методов получения, исследованием физических свойств и техническими применениями ряда новых материалов - фотонных кристаллов, технической керамики, эпитаксиальных тонкоплёночных структур, моно- и нанокристаллических сплавов с эффектом памяти формы.

Теория и практика кристаллофизики и технической кристаллогенетики внедрены и широко используются на кафедре прикладной физики ТвГУ для подготовки студентов по двум специальностям и в работе аспирантуры.