

# 11. ВРЪЗКА МЕЖДУ ЕЛАСТИЧНИТЕ, ТЕРМИЧНИТЕ И ЕЛЕКТРИЧНИТЕ ЯВЛЕНИЯ В КРИСТАЛИТЕ

## 1. Въведение

Предмет на кристалофизиката е изучаването на физичните свойства на кристалите.

Кристалофизиката се развива главно в две направления:

- ✚ **Феноменологично** (термодинамично) направление. Основава се на законите на термодинамиката. Кристалите се разглеждат като анизотропни среди, които се подчиняват на някои закони на симетрията.

От термодинамична гледна точка процесите, които протичат са равновесни (обратими) и неравновесни (необратими). Във връзка с това говорим за равновесни и неравновесни свойства.

- ✚ **Микроскопичен подход** - изучаване свойствата на кристалите на атомно-молекулно ниво. Дава по-ясна физическа картина за явленията, но се прилага трудно. За сега не обяснява задоволително всички свойства на кристалите.

## 2. Физични величини

Единното представяне на експериментално изследваните механични, електрични, магнитни и топлинни свойства на веществата е възможно, когато тези свойства се отнасят до термодинамично обратими процеси. Тук е важно да отбележим, че за свойствата, характеризиращи преносните явления, такова разглеждане е неприложимо.

Връзките между механични, електрични, магнитни и топлинни свойства на веществата, отнасящи се до термодинамично обратими процеси, могат да се установят като се въведат следните три групи величини.

**Първа група:** Полеви величини - характеризират външните въздействия, на които са подложени веществата:

- $T$  - Температура (топлинна величина), скалар (тензор от 0 ранг);
- $\vec{E}_n$  - Интензитет на електричното поле (електрична величина), вектор (тензор от I ранг);
- $\vec{H}_p$  - интензитет на магнитното поле (МП); вектор или тензор от I ранг;
- $T_{lm}$  - Механично напрежение (механична величина), симетричен тензор от II ранг.

**Втора група:** Величини, определящи състоянието на веществата – характеризират реакцията на веществата под действието на полевите величини:

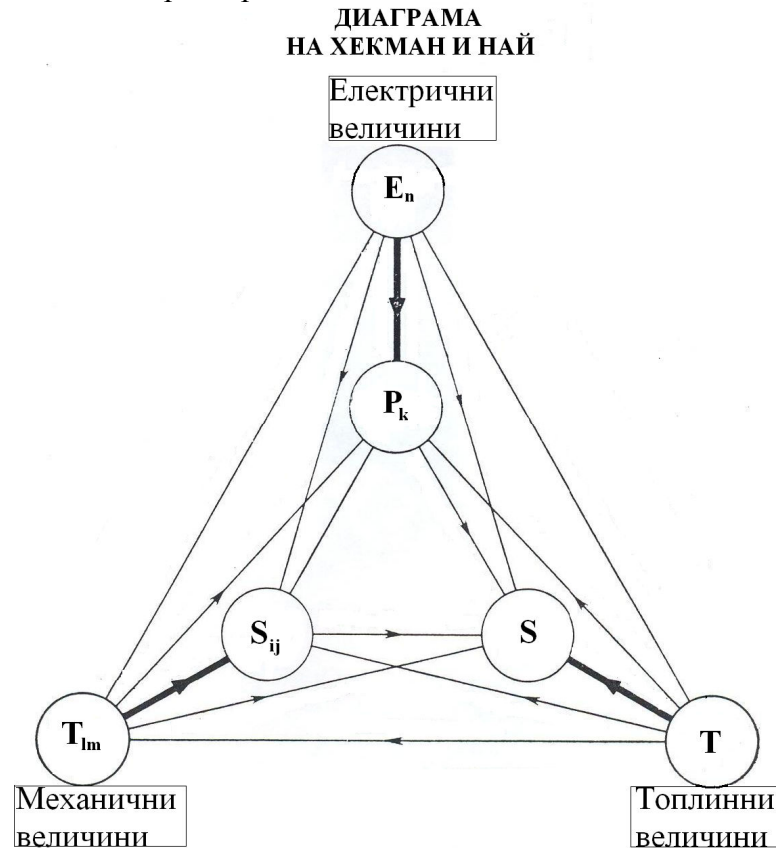
- $S$  - Ентропия (топлинна величина), скалар (тензор от 0 ранг);
- $\vec{P}_k$  - Електрична поляризация (електрична величина), вектор (тензор от I ранг);
- $\vec{M}_q$  - Намагнитване (магнитна величина), вектор (тензор от I ранг);
- $S_{ij}$  - Механична деформация (механична величина), симетричен тензор от II ранг (когато  $T_{lm}$  е избрана за полева величина и обратно)

**Трета група:** Материални константи - характеризират физичните свойства на веществата и определят връзките между първите две групи величини, които представляват емпирични закони. Стойностите на материалните константи съществено зависят от условията, при които протичат съответните физични явления – изотермични, адиабатни,

постоянно електрично или магнитно поле, постоянна поляризация или намагнитване, механически свободен или несвободен кристал и др.

### 3. Диаграма на Хекман и Най

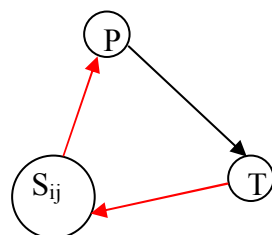
Илюстрира физични процеси, които се извършват в кристалите и свойствата им, свързани с тях. Състои се от два триъгълника и връзки, които характеризират физичните процеси. Ако се добавят и магнитния интензитет  $\vec{H}$  и магнитния момент  $\vec{M}$  триъгълника се преобразува в пространствен тетраедър.



**Фиг. 1.** Връзка между механични, електрични, и топлинни свойства на веществата.

#### Видове явления

- Главни ефекти – с наддебелени черти
- Спрегнати ефекти – с тънки, кръстосани линии. Материалните константи, свързващи полевите величини с величините, характеризиращи реакцията на кристала на правия и съответния му обратен ефект са равни помежду си.
- Странични ефекти – останалите линии - вътрешен триъгълник, външен триъгълник
- Вторични ефекти – Ефектът се съпровожда с допълнителни изменения на кристала. Обикновено протича на два етапа.



- Първичен пироелектричен ефект.
- Вторичен пироелектричен ефект.

#### 4. Различни случаи на изразяване на физични свойства със симетрични тензори от II ранг

За определяне на дадено свойство на кристала въведохме физични величини, определящи външното въздействие върху кристала (полеви величини) и неговата реакция на това въздействие. Количествено съответното свойство на кристала се изразява с материална константа - величината, която като се умножи с полевата величина, дава величината, описваща реакцията на кристала. Много от свойствата на кристалите се изразяват по този начин със симетрични тензори от II ранг, които се наричат материални тензори.

От математична гледна точка различаваме следните случаи:

**4.1. вектор = тензор II ранг . вектор**  $\rightarrow p_i = M_{ik} \cdot q_k$

Чрез тензор II ранг -  $M_{ik}$  - се преминава от компонентите на вектора на външно въздействие към компонентите на вектора на реакцията на кристала.

Например диелектрична поляризация:

$\vec{P}_i = \epsilon_0 \cdot \chi_{ik} \cdot \vec{E}_k$ ,  $\chi_{ik}$  - диелектрична възприемчивост,  $\vec{P}_i$  - електрична поляризация,  $\vec{E}_n$  - интензитет на електричното поле.

**4.2. тензор II ранг = тензор II ранг . скалар**  $\rightarrow p_{ik} = M_{ik} q$

Например топлинно разширение:

$S_{ik} = \alpha_{ik} \cdot T$ ,  $S_{ik}$  - механична деформация,  $\alpha_{ik}$  - коефициент на топлинно разширение,  $T$  - температура.

**4.3. скалар = тензор II ранг . тензор II ранг (симетрични)**  $\rightarrow p = M_{ik} q_{ik}$

Например пиезокалоричен ефект:

$dS = \alpha_{ij}^* \cdot dT_{ij}$ ,  $dS$  - ентропия,  $\alpha_{ij}^*$  - коефициент на пиезокалоричен ефект,  $dT_{ij}$  - механично напрежение.

#### 7. Характеристична повърхнина на материалния симетричен тензор от II ранг, изразяващ дадено свойство.

Всеки симетричен тензор II ранг се представя нагледно с една повърхнина от II порядък, наречена характеристична повърхнина, с уравнение:

$$M_{ik} x_i x_k = 1$$

Спрямо КС, чиито оси съвпадат с главните оси на тензора, уравнението е:

$$M_1 x_1^2 + M_2 x_2^2 + M_3 x_3^2 = 1$$

$M_1, M_2, M_3$  – главните компоненти на тензора  $M_{ik}$  са:

- положителни – повърхността е елипсоид;
- отрицателни – имагинерен елипсоид;
- двете са положителни, едната е отрицателна – едноплащен хиперболоид;
- една е положителна, двете са отрицателни – двуплащен хиперболоид.

Дължините на техните оси се изразяват чрез главните компоненти на тензора:

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{M_1}}, \quad a_2 = \frac{1}{\sqrt{M_2}}, \quad a_3 = \frac{1}{\sqrt{M_3}}$$

$a_1, a_2, a_3$  – главни полуоси на характеристичните повърхнини

$$\frac{x_1^2}{a_1^2} + \frac{x_2^2}{a_2^2} + \frac{x_3^2}{a_3^2} = 1 \text{ - уравнение на характеристична повърхнина}$$

Дължината на радиус-вектора на произволна точка от характеристичната повърхност на даден тензор, характеризиращ огледално физично свойство на кристала, е равно на реципрочната стойност на квадратен корен от характеризиращата това свойство величина в даденото направление:  $r^2 M = 1$  или  $r = \frac{1}{\sqrt{M}}$ .

## 8. Основни термодинамични уравнения за първичните ефекти в кристалите

Нека за независими променливи да изберем величините от първа група и да запишем пълните диференциали на величините от втора група. Разглеждаме  $10^{-\text{те}}$  величини  $S_{ij}$ ,  $P_k$  и  $S$ , като функции на  $10^{-\text{те}}$  независими променливи  $T_{lm}$ ,  $E_n$  и  $T$ . Получаваме система от 10 уравнения с по 10 члена:

$$\begin{aligned} dS_{ij} &= \left( \frac{\partial S_{ij}}{\partial T_{lm}} \right)_{E,T} dT_{lm} + \left( \frac{\partial S_{ij}}{\partial E_n} \right)_{T,T} dE_n + \left( \frac{\partial S_{ij}}{\partial T} \right)_{T,E} dT \\ dP_k &= \left( \frac{\partial P_k}{\partial T_{lm}} \right)_{E,T} dT_{lm} + \left( \frac{\partial P_k}{\partial E_n} \right)_{T,T} dE_n + \left( \frac{\partial P_k}{\partial T} \right)_{T,E} dT \\ dS &= \left( \frac{\partial S}{\partial T_{lm}} \right)_{E,T} dT_{lm} + \left( \frac{\partial S}{\partial E_n} \right)_{T,T} dE_n + \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{T,E} dT \end{aligned}$$

Коефициентите пред диагоналните членове са коефициенти на главните ефекти. Тези ефекти заемат особено място, т.к. свързват величините от I и II група със сходна физична природа (термодинамически спрегнати величини) - механични, електрични, и топлинни.

Коефициентите пред страничните членове са коефициенти на съответните им спрегнати ефекти.

$d_{klm}$  и  $d_{klm}^*$  – пиезоелектрични модули при правия и обратен пиезоелектричен ефект

$\alpha_{ij}$  и  $\alpha_{ij}^*$  – коефициенти на термично разширение и на пиезокалоричния ефект

$p_k$  и  $p_k^*$  – коефициенти на пироелектричния ефект и на електрокалоричния ефект

От термодинамични съображения коефициентите на спрегнатите ефекти са равни.

Коефициентите на всяка от правите и съответните им обратни ефекти са равни и затова те се наричат спрегнати.

$$dS_{ij} = \left( \frac{\partial S_{ij}}{\partial T_{lm}} \right)^{e_{ijlm}} dT_{lm} + \left( \frac{\partial S_{ij}}{\partial E_n} \right)^{d_{ijn}^*} dE_n + \left( \frac{\partial S_{ij}}{\partial T} \right)^{d_{ij}} dT$$

$$dP_k = \left( \frac{\partial P_k}{\partial T_{lm}} \right)^{d_{kelm}} dT_{lm} + \left( \frac{\partial P_k}{\partial E_n} \right)^{\epsilon_0 \chi_{kn}} dE_n + \left( \frac{\partial P_k}{\partial T} \right)^{P_k} dT$$

$$dS = \left( \frac{\partial S}{\partial T_{lm}} \right)^{d_{lm}^*} dT_{lm} + \left( \frac{\partial S}{\partial E_n} \right)^{P_n^*} dE_n + \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)^{c/T} dT$$

Коэффициенты на главните ефекти (диагонални членове)

$e_{ijlm}$  — на еластична деформация

$\epsilon_0 \chi_{kn}$  — на диелектрична възприемливост

$c/T$  — спец. топлимност на кристала

Коэффициенти на спрегнатите ефекти

$d_{kelm}$  — на правия пьезоелектричен ефект  
 модули  
 $d_{ijn}^*$  — на обратния пьезоелектричен ефект

$d_{ij}$  — на термично разширение

$d_{lm}^*$  — на пьезокалоричния ефект

$P_k$  — на пироелектричния ефект

$P_n^*$  — на електрокалоричния ефект