12 Главни ефекти в кристалите

1. Изменение на ентропията при изменение на температурата

При обратим процес, нарастването на температурата води до изменение на ентропията в единица обем.

(1) $$\boxed{dS = \frac{c}{T}\,dT},$$

c – специфична топлоемност или специфична топлина на кристала (топлоемност на единица обем).

(2) $dS = \dfrac{\delta Q}{T}$ - редуцирано количество топлина,

δQ е обмененото количество топлина, като $\delta Q = cdT$.

2. Поляризация – диелектрична

2.1. Диелектрична възприемчивост

Под влияние на електрично поле (ЕП), зарядите q_s се преместват един спрямо друг.

(3) $\vec{P} = \sum\limits_{s} q_s \vec{r}_s$ – диелектрична поляризация – пълен диполен момент на единица обем от веществото.

В изотропни среди: $\vec{P} \parallel \vec{E}$

(4) $$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi \vec{E},$$

$\varepsilon_o = 8{,}85.10^{-12}$F/m - диелектрична проницаемост на вакуума, χ - диелектрична възприемчивост.

В анизотропни среди:

(5) $$\boxed{P_i = \varepsilon_0 . \chi_{ik} . E_k},$$

χ_{ik} - тензор на диелектрична възприемчивост.

Диелектрична поляризация *- Поляризиране на диелектрика под действие на външно електрично поле.*

Симетричност на χ_{ik} :

За целта пресмятаме работата за поляризация на кристала.

(6) $\delta A_i = E_i.q.dx_i$ - работата за преместване на заряд q на разстояние dx_i в ЕП $- E_i$.

(7) $\delta A = n.\delta A_i = E_i.n.q.dx_i$ - работата за преместване на n заряда q в единица обем.

(8) $\delta A = E_i dP_i = E_i.\varepsilon_0.\chi_{ik}.dE_k$

За изотермичен процес:

(9) $\delta A = dF$ - промяна на свободната енергия вследствие на поляризацията.

Диференцираме:

$$\frac{\partial^2 F_p}{\partial E_k \partial E_i} = \varepsilon_0 \chi_{ik} \qquad \frac{\partial^2 F_p}{\partial E_i \partial E_k} = \varepsilon_0 \chi_{ki}$$

Равни, тъй като вторите производни на F_p не зависи от реда на диференциране.

$\chi_{ik} = \chi_{ki}$ - тензорът на диелектрична възприемчивост е симетричен.

2.2. Диелектрична проницаемост

Вектор на електричната индукция $\vec{D}$

(10) $$\boxed{\vec{D} = \varepsilon_0.\vec{E} + \vec{P}}$$

За изотропни диелектрици $\vec{D} \parallel \vec{E}$

(11) $$\boxed{\vec{D} = \varepsilon_0.\varepsilon.\vec{E}},$$

$\varepsilon_0.\varepsilon$ – диелектрична проницаемост, ε – относителна диелектрична проницаемост.

От (4) и (10) следва, че:

(12) $$\boxed{\vec{D} = \varepsilon_0.(1+\chi).\vec{E}}$$

или

(13) $$\varepsilon = 1 + \chi$$

В анизотропни среди (кристали) $\vec{P}$ не е успоредно на $\vec{E}$:

(14) $$\boxed{D_i = \varepsilon_0.\varepsilon_{ik}.E_k = \varepsilon_0.E_i + P_i = \varepsilon_0.(\delta_{ik} + \chi_{ik}).E_k}$$

(15) $$\varepsilon_{ik} = \delta_{ik} + \chi_{ik}$$

$\varepsilon_0.\varepsilon_{ik}$ – тензор на диелектрична проницаемост; δ_{ik} – единичен тензор или единична квадратна матрица на Кронекер:

$$\delta_{ik} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

От симетричността на χ_{ik}, следва симетрията на $\varepsilon_0.\varepsilon_{ik}$. Следователно, тензорът на диелектрична проницаемост се определя от стойностите и направленията на 3$^{-те}$ главни диелектрични проницаемости.

3. Намагнитване

3.1. Магнитна възприемчивост, $æ_{ik}$

Аналогично на електрична възприемчивост за изотропни среди.

(16) $\vec{M} = \mu_0.æ.\vec{H}$ – вектор на магнитен момент – магнитният момент на единица обем,

$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ H/m – магнитна проницаемост на вакуум, æ – магнитна възприемчивост.

При $æ > 0$ ($\vec{M}$ в посока на $\vec{H}$) - парамагнитни вещества.

При $æ < 0$ ($\vec{M}$ противоположна на $\vec{H}$) - диамагнитни вещества.

За анизотропни тела

(17) $$\boxed{M_i = \mu_0.æ_{ik}.H_k}$$

$æ_{ik}$ – компоненти на тензора на магнитна възприемчивост, $æ_{ik}$ – симетричен тензор (аналогичен на χ_{ik})

Магнитната възприемчивост на кристала напълно се определя от стойностите и направленията на неговите главни възприемчивости $æ_1, æ_2, æ_3$.

Намагнитване *– под действие на външно магнитно поле (МП)* $\vec{H}$ *кристалът се намагнитва* $\vec{M}$.

3.2. Магнитна проницаемост

(18) $$\boxed{\vec{B} = \mu_0 .\vec{H} + \vec{M}}$$

От (17) и (18) за анизотропна среда

(19) $$\boxed{B_i = \mu_0 .(\mathrm{H}_i + æ_{\mathrm{ik}} \mathrm{H}_k) = \mu_0 .(\delta_{ik} + æ_{\mathrm{ik}}).\mathrm{H}_k}$$

(20) $$\boxed{B_i = \mu_{ik} .\mathrm{H}_k}$$

(21) $\mu_{ik} = \mu_0 .(\delta_{ik} + æ_{\mathrm{ik}})$ – симетричен тензор на магнитна проницаемост, $(\delta_{ik} + æ_{\mathrm{ik}})$ – относителна магнитна проницаемост.

4. Еластична деформация

4.1. Тензори на еластичните модули

(22) $S_{ij} = e_{ijkl} .T_{kl}$, e_{ijkl} – еластична константа

(23) $T_{ij} = c_{ijkl} .S_{kl}$, c_{ijkl} – модул на еластичност

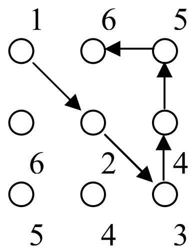
(22), (23) – обобщен закон на Хук. Всяка компонента на $T_{kl}(S_{ij})$ зависи линейно от всички компоненти на $S_{ij}(T_{kl})$

(22) Полевият тензор на механично напрежение T_{ik}, характеризира външното въздействие върху кристала.
Полевият тензор на еластична деформация S_{kl}, характеризира реакцията на тялото на тези външни въздействия.

T_{ik}, S_{kl} са симетрични, следователно e_{ijkl} и c_{ijkl} – симетрични тензори от IV ранг $9 \times 9 = 81$ члена се редуцират до 36 (симетрични при замяна: $i \leftrightarrow j$, $k \leftrightarrow l$).

4.2. Матрично представяне на механичното напрежение, деформацията, еластичните константи и еластичните модули.

Тензорите се представят в матрична форма. Заменяме двойните индекси ij и kl с p и q, така:



ij (*kl*)	11	22	33	32(23)	31(13)	12(21)
p (*q*)	1	2	3	4	5	6

Тогава се получава:

$T_p = (T_1\, T_2 T_3\, T_4 T_5\, T_6)$ - единична матрица

$T_q = 2T_{kl}$, $S_q = 2S_{kl}$, тъй като при $k \neq l$ вдясно на (22) и (23) фигурират по два члена $T_{kl}(S_{kl})$.

$T_q = T_{kl}$, $S_q = S_{kl}$ при $k = l$

(24) $$S_p = e_{pq} .T_q$$

(25) $$T_p = c_{pq} .S_q$$

От енергетични съображения се показва, че матриците e_{pq} и c_{pq} са симетрични. Членовете им от 36 се свеждат до 21.

21 е максималният брой еластични константи и модули в най-ниския симетричен клас – триклинният без център на симетрия.

3 еластични модули и константи за кристали с кубична симетрия.

2 за изотропни тела.