

# Континуум Коссера и пьезоэлектричество<sup>1</sup>

## Введение

В 1880 г. братья Пьер и Жак Кюри впервые экспериментально продемонстрировали пьезоэлектрический характер поведения ряда кристаллов, включая кварц и сегнетову соль. Прямой пьезоэлектрический эффект возникает, когда деформирование материала вызывает электрическую поляризацию. Обратный пьезоэлектрический эффект возникает, когда вследствие приложения электрического поля материал деформируется. Использование этих взаимосвязанных эффектов позволило электронной индустрии наладить производство множества приборов, таких как пьезоэлектрические кристаллы, фильтры и резонаторы. Таким образом, кристаллические вещества с пьезоэлектрическими свойствами очень полезны с точки зрения их применения для различных научных и промышленных целей.

Современную технику невозможно представить без приборов, работающих на основе пьезоэффекта. Являясь непосредственными преобразователями энергии из электрической в механическую и обратно, такие приборы находят очень широкие сферы применения. Наиболее популярным является применение пластинок, вырезанных из пьезоэлектрического материала под

---

<sup>1</sup> Приложение написано Е. А. Ивановой и Я. Э. Колпаковым. Материал приложения основан на статье [181]: Ja. E. Kolpakov, P. A. Zhilin “Generalized continuum and linear theory of piezoelectric materials” (Proceedings of XXIX Summer School–Conference “Advanced Problems in Mechanics”. — St. Petersburg, Russia, 2002. — P. 364–375) и лекции [182]: Ja. E. Kolpakov, P. A. Zhilin “A micro-polar theory for piezoelectric materials” (Lecture at XXXIII Summer School–Conference “Advanced Problems in Mechanics”. — St. Petersburg, Russia, 2005). (*Примеч. ред.*)

определенным углом, для стабилизации частоты. Современные кварцевые резонаторы, работающие на объемных акустических волнах, позволяют изготавливать генераторы напряжения со стабильностью частоты порядка  $10^{-8}$  в год. Помимо стабилизации частоты, пьезоэлектрические резонаторы широко применяются для фильтрации частот в определенном диапазоне. В области высоких частот (от 60 МГц до 2 ГГц) используются резонаторы на поверхностных акустических волнах (ПАВ), а при еще более высоких частотах применяются резонаторы на тонких пьезоэлектрических пленках. Современный пьезоэлектрический резонатор представляет собой пластинку из материала, обладающего пьезоэлектрическими свойствами и покрытого проводящим слоем металла.

Другая область применения пьезоэлектричества — различные датчики (давления, температуры, ускорения). С помощью пьезоэлектрических датчиков можно измерить, например, давление внутри ствола орудия или двигателя внутреннего сгорания, ускорение космического корабля, температуру в нефтяной скважине или оперативно определить наличие и концентрацию определенных бактерий в окружающей среде. Пьезодатчики имеют большое преимущество перед механическими аналогами: это постоянство нулевой точки, практическое отсутствие потерь на трение, хорошая воспроизводимость показаний, высокая чувствительность, возможность дистанционных измерений. На основе пьезоэлементов создается большое количество медицинской аппаратуры, а также другие приборы: источники и приемники звуковых и ультразвуковых колебаний.

Одним из пьезоэлектриков, которые наиболее часто используются в промышленности, является  $\alpha$ -кварц. Его популярность обусловлена распространенностью в природе, относительной простотой изготовления (методом выращивания из щелочного раствора), высокой однородностью. Маленький коэффициент электромеханической связи (0,007) и высокая добротность кварца позволяют использовать его для создания различных устройств, например высокодобротных кварцевых резонаторов. Впервые пьезокристаллы на базе натурального  $\alpha$ -кварца были произведены Волтером Кади в 1923 г. К настоящему времени налажено производство пьезокристаллов с существенно улучшенными техническими характеристиками.

Первая попытка построить теорию пьезоэлектричества была предпринята Фойгтом в 1910 г. Сейчас существует несколько теорий пьезоэлектричества. Все известные теории незначительно отличаются друг от друга и сводятся к достаточно сложным системам уравнений. Точные решения этих уравнений можно найти только в частных случаях. Это одна из причин того, что задача

сравнения теоретических и экспериментальных результатов является весьма сложной. В настоящее время считается, что качественных расхождений между теорией и экспериментом нет. Вместе с тем, есть несколько серьезных теоретических проблем, необходимость решения которых требует расширения и обобщения теории пьезоэлектричества.

*Первая проблема.* В традиционных теориях вектор напряженности электрического поля  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  считается полярным. Однако этот факт не является строго доказанным. В электродинамике выбор типа вектора электрического поля не имеет значения (см., например, [151]). В пьезоэлектричестве тип вектора  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  важен. Поэтому далее мы рассмотрим теории, применимые в двух случаях:  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  — полярный вектор и  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  — аксиальный вектор.

*Вторая проблема.* Некоторые пьезоэлектрические материалы являются дипольными кристаллами. При создании теорий пьезоэлектричества, описывающих поведение подобных материалов, принципиально важным становится учет вращательных степеней свободы. Далее мы рассматриваем именно такие теории.

## Н.1. Классическая теория пьезоэлектричества

Все известные теории пьезоэлектричества [183–185] базируются на классической теории упругости с симметричным тензором напряжений. Далее представлены основные уравнения теории пьезоэлектричества.

Уравнения движения имеют вид

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{F} = \rho \ddot{\mathbf{u}}, \quad \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}^T, \quad (\text{Н.1})$$

где  $\boldsymbol{\tau}$  — тензор напряжений;  $\rho$  — объемная плотность массы;  $\mathbf{F}$  — массовая плотность внешней силы, действующая на единицу массы;  $\mathbf{u}$  — вектор перемещений.

Уравнение электростатики для кристалла имеет следующий вид:

$$\nabla \cdot \mathcal{D} = 0, \quad (\text{Н.2})$$

где  $\mathcal{D} = \varepsilon_0 \boldsymbol{\mathcal{E}} + \mathcal{P}^p$  — вектор электрической индукции;  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная;  $\boldsymbol{\mathcal{E}}$  — вектор напряженности электрического поля в среде;  $\mathcal{P}^p$  — вектор плотности поляризации.

Уравнение баланса энергии представлено в виде

$$\rho \dot{\mathcal{U}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\mathbf{g}} + \boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \dot{\mathcal{D}}, \quad (\text{Н.3})$$

где  $\mathcal{U}$  — массовая плотность внутренней энергии;  $\mathbf{g}$  — тензор линейной деформации, который равен симметричной части градиента вектора перемещений:  $\mathbf{g} = (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) / 2$ . Далее вводится понятие плотности электрической энтальпии

$$\rho \mathcal{F} = \rho \mathcal{U} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathcal{D}. \quad (\text{H.4})$$

С использованием (H.4) уравнение баланса энергии (H.3) переписывается в виде

$$\rho \dot{\mathcal{F}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathcal{D} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (\text{H.5})$$

В линейном приближении плотность электрической энтальпии  $\rho \mathcal{F}$  представляется в виде квадратичной формы

$$\rho \mathcal{F} = \rho \mathcal{F}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{g} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{g} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathcal{M} \cdot \mathbf{g} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (\text{H.6})$$

где  $\mathbf{C}$  — тензор упругости;  $\mathcal{M}$  — тензор пьезоэлектрических модулей;  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — тензор диэлектрической проницаемости. Заметим, что компонентами тензора  $\boldsymbol{\varepsilon}$  являются абсолютные диэлектрические проницаемости, имеющие размерность электрической постоянной  $\varepsilon_0$ . Определяющие уравнения, которые следуют из (H.5), (H.6), имеют вид

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{g} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathcal{M}, \quad (\text{H.7})$$

$$\mathcal{D} = \mathcal{M} \cdot \mathbf{g} + \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (\text{H.8})$$

Ранее в качестве независимых переменных использовались тензор деформаций и вектор электрического поля. Можно в качестве независимых переменных использовать тензор деформаций и вектор электрической индукции. В этом случае следует вернуться к уравнению баланса энергии в форме (H.3). Задав плотность внутренней энергии в виде квадратичной формы

$$\rho \mathcal{U} = \rho \mathcal{U}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{g} \cdot \mathbf{C}^{(c)} \cdot \mathbf{g} - \mathcal{D} \cdot \mathcal{M}^{(c)} \cdot \mathbf{g} + \frac{1}{2} \mathcal{D} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(c)} \cdot \mathcal{D}, \quad (\text{H.9})$$

получим определяющие уравнения следующего вида:

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{C}^{(c)} \cdot \mathbf{g} - \mathcal{D} \cdot \mathcal{M}^{(c)}, \quad (\text{H.10})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -\mathcal{M}^{(c)} \cdot \mathbf{g} + \boldsymbol{\varepsilon}^{(c)} \cdot \mathcal{D}. \quad (\text{H.11})$$

Тензоры  $\mathbf{C}^{(c)}$ ,  $\mathcal{M}^{(c)}$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}^{(c)}$  выражаются через  $\mathbf{C}$ ,  $\mathcal{M}$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}$  по формулам

$$\mathbf{C}^{(c)} = \mathbf{C} + \mathcal{M}^* \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{-1} \cdot \mathcal{M}, \quad \mathcal{M}^{(c)} = \boldsymbol{\varepsilon}^{-1} \cdot \mathcal{M}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{(c)} = \boldsymbol{\varepsilon}^{-1}. \quad (\text{H.12})$$

Знак “звездочка” применительно к тензору третьего ранга  $\mathbf{M}$  означает циклическую перестановку базисных векторов в триаде.

Классическая теория описывает большинство известных экспериментальных данных. Вместе с тем, в некоторых случаях наблюдаются разногласия между теорией и экспериментом. Подробную информацию об этом можно найти, например, в статье [186]. Причина разногласий между теорией и экспериментом [186] до конца не понятна. Не исключено, что причина заключается в погрешностях, допущенных в ходе эксперимента и при построении приближенного решения системы (Н.1)–(Н.7). Однако вполне возможно, что для более точного согласования с экспериментальными данными классическая теория (Н.1)–(Н.7) должна быть улучшена в некоторых пунктах. В первую очередь важным представляется учет вращательных степеней свободы, так как целый ряд пьезоэлектрических кристаллов представляет собой дипольную среду.

## Н.2. Уравнения баланса для континуума Коссера

Рассмотрим упругий континуум, состоящий из тел-точек — континуум Коссера. Пусть  $\mathbf{x}_s$  — материальные (лагранжевы) координаты и пусть  $\mathbf{r}(\mathbf{x}_s)$  и  $\mathbf{R}(\mathbf{x}_s)$  — радиус-векторы, определяющие положения точек среды в отсчетной и актуальной конфигурациях, соответственно. Плотность кинетической энергии среды, состоящей из тел-точек, представляется квадратичной формой скоростей

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{u}}^2 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{P}(\mathbf{t}) \cdot \mathbf{J} \cdot \mathbf{P}^T(\mathbf{t}) \cdot \boldsymbol{\omega}. \quad (\text{Н.13})$$

Здесь  $\mathbf{u} = \mathbf{R} - \mathbf{r}$  — вектор перемещений;  $\mathbf{J}$  — тензор инерции в отсчетной конфигурации;  $\mathbf{P}(\mathbf{t})$  — тензор поворота (собственно ортогональный тензор);  $\boldsymbol{\omega}$  — вектор угловой скорости. Здесь и далее мы предполагаем, что вектор перемещений  $\mathbf{u}$  мал, т. е. мы рассматриваем линейную теорию. В линейном приближении для тензора поворота  $\mathbf{P}$  можно использовать следующую аппроксимацию:

$$\mathbf{P} \approx \mathbf{E} + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{E}, \quad \boldsymbol{\varphi} = \varphi \mathbf{e}_\varphi, \quad (\text{Н.14})$$

где  $\boldsymbol{\varphi}$  — вектор малого поворота;  $\mathbf{E}$  — единичный тензор;  $\mathbf{e}_\varphi$  — единичный вектор, направленный по оси поворота;  $\varphi$  — угол поворота. Воспользовавшись уравнением Пуассона

$$\dot{\mathbf{P}} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{P} \quad (\text{Н.15})$$

и приближенным выражением для тензора поворота (Н.14), получим следующее выражение для вектора угловой скорости:

$$\boldsymbol{\omega} = \dot{\boldsymbol{\phi}}.$$

Плотность количества движения определяется как частная производная от плотности кинетической энергии по трансляционной скорости

$$\mathbf{K}_1 = \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial \dot{\mathbf{u}}} = \dot{\mathbf{u}}.$$

Уравнение баланса количества движения имеет вид

$$\frac{d}{dt} \int_{(V)} \rho \mathbf{K}_1 dV = \int_{(V)} \rho \mathbf{F} dV + \int_{(S)} \mathbf{T}_{(n)} dS, \quad (\text{Н.16})$$

где  $\rho = V^{-1} \sum_V m_i$  — объемная плотность массы ( $V$  — материальный объем);  $\mathbf{F}$  — массовая плотность внешних сил;  $\mathbf{T}_{(n)}$  — вектор напряжений. Справедлива формула

$$\mathbf{T}_{(n)} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}, \quad (\text{Н.17})$$

где  $\mathbf{n}$  — единичный вектор нормали к поверхности контрольного объема в данной точке;  $\mathbf{T}$  — тензор напряжений Коши. Применяв теорему о дивергенции и приняв во внимание (Н.17), приведем уравнение (Н.16) к виду

$$\int_{(V)} (\rho \ddot{\mathbf{u}} - \rho \mathbf{F} - \nabla \cdot \mathbf{T}) dV = \mathbf{0}. \quad (\text{Н.18})$$

На основании стандартных рассуждений получим локальную форму уравнения баланса количества движения

$$\nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{F} = \rho \ddot{\mathbf{u}}. \quad (\text{Н.19})$$

Тензор напряжений можно разложить на симметричную и антисимметричную части

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{2} \mathbf{q} \times \mathbf{E}, \quad \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}^T, \quad \mathbf{q} = \mathbf{T}_\times, \quad (\text{Н.20})$$

где вектор  $\mathbf{q}$  определяет антисимметричную часть тензора напряжений. Воспользовавшись представлением (Н.20), перепишем уравнение (Н.19) в форме

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{q} + \rho \mathbf{F} = \rho \ddot{\mathbf{u}}. \quad (\text{Н.21})$$

Плотность кинетического момента определяется как сумма плотности момента количества движения и плотности собственного кинетического момента, который в свою очередь определяется как частная производная от плотности кинетической энергии по угловой скорости

$$\mathcal{K}_2 = \mathbf{R} \times \mathcal{K}_1 + \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial \boldsymbol{\omega}}.$$

При малых  $\mathbf{u}$  и  $\boldsymbol{\omega}$  выражение для  $\mathcal{K}_2$  принимает вид

$$\mathcal{K}_2 = \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{u}} + \mathbf{J} \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}}. \quad (\text{H.22})$$

Уравнение баланса кинетического момента записывается следующим образом:

$$\frac{d}{dt} \int_{(V)} \rho \mathcal{K}_2 dV = \int_{(V)} \rho (\mathbf{r} \times \mathbf{F} + \mathbf{L}) dV + \int_{(S)} (\mathbf{r} \times \mathbf{T}_{(n)} + \boldsymbol{\mu}_{(n)}) dS, \quad (\text{H.23})$$

где  $\mathbf{L}$  — массовая плотность внешних моментов;  $\boldsymbol{\mu}_{(n)}$  — вектор моментных напряжений. Формула Коши, посредством которой вводится в рассмотрение тензор моментных напряжений  $\boldsymbol{\mu}$ , имеет вид

$$\boldsymbol{\mu}_{(n)} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu}. \quad (\text{H.24})$$

Воспользуемся формулой (H.24), теоремой о дивергенции и уравнением баланса количества движения (H.21) и путем стандартных преобразований уравнения (H.23) получим локальную форму уравнения баланса кинетического момента

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\mu} + \mathbf{q} + \rho \mathbf{L} = \rho \mathbf{J} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}. \quad (\text{H.25})$$

Уравнения (H.21) и (H.25) хорошо известны в теории микрополярных сред.

В дальнейшем будем рассматривать антисимметричный тензор моментных напряжений, задав его с помощью сопутствующего вектора  $\mathbf{m}$ ,

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{m} \times \mathbf{E}. \quad (\text{H.26})$$

Подставив (H.26) в уравнение (H.25), получим

$$\nabla \times \mathbf{m} + \mathbf{q} + \rho \mathbf{L} = \rho \mathbf{J} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}. \quad (\text{H.27})$$

Перейдем к обсуждению уравнения баланса энергии. Интегральная форма этого уравнения имеет вид

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_{(V)} \left( \frac{1}{2} \rho \dot{\mathbf{u}}^2 + \frac{1}{2} \rho \dot{\boldsymbol{\phi}} \cdot \mathbf{J} \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}} + \rho \mathcal{U} \right) dV = \\ & = \int_{(V)} \left( \rho \mathbf{F} \cdot \dot{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{L} \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}} + \mathcal{Q} \right) dV + \int_{(S)} \left( \mathbf{T}_{(n)} \cdot \dot{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\mu}_{(n)} \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}} + \mathbf{h}_{(n)} \right) dS. \end{aligned} \quad (\text{H.28})$$

Здесь  $\mathcal{U}$  — массовая плотность внутренней энергии;  $\mathbf{h}_{(n)}$  — скорость подвода энергии через границу объема;  $\mathcal{Q}$  — скорость подвода энергии в единицу объема. Воспользовавшись теоремой о дивергенции и соотношением  $\mathbf{h}_{(n)} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{h}$ , где  $\mathbf{h}$  — вектор потока энергии, приведем уравнение (H.28) к виду

$$\begin{aligned} & \int_{(V)} \left[ \rho \dot{\mathcal{U}} + (\rho \ddot{\mathbf{u}} - \rho \mathbf{F} - \nabla \cdot \mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{u}} + (\rho \mathbf{J} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}} - \rho \mathbf{L} - \nabla \cdot \boldsymbol{\mu}) \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}} - \right. \\ & \left. - \mathbf{T}^T \cdot \cdot \nabla \dot{\mathbf{u}} - \boldsymbol{\mu}^T \cdot \cdot \nabla \dot{\boldsymbol{\phi}} - \nabla \cdot \mathbf{h} - \mathcal{Q} \right] dV = 0. \end{aligned} \quad (\text{H.29})$$

Руководствуясь стандартными рассуждениями и приняв во внимание законы динамики (H.21), (H.25), получим локальную форму уравнения баланса энергии

$$\rho \dot{\mathcal{U}} = \mathbf{T}^T \cdot \cdot \nabla \dot{\mathbf{u}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}} + \boldsymbol{\mu}^T \cdot \cdot \nabla \dot{\boldsymbol{\phi}} + \nabla \cdot \mathbf{h} + \mathcal{Q}. \quad (\text{H.30})$$

Не вызывает затруднений доказательство тождества

$$\mathbf{T}^T \cdot \cdot \nabla \dot{\mathbf{u}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}},$$

где

$$\mathbf{g} \equiv \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad \boldsymbol{\theta} \equiv \boldsymbol{\phi} - \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u}. \quad (\text{H.31})$$

Симметричный тензор  $\mathbf{g}$  называется тензором линейной деформации, вектор  $\boldsymbol{\theta}$  называется вектором сдвига. С учетом приведенного тождества уравнение (H.30) принимает вид

$$\rho \dot{\mathcal{U}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} + \boldsymbol{\mu}^T \cdot \cdot \nabla \dot{\boldsymbol{\phi}} + \nabla \cdot \mathbf{h} + \mathcal{Q}. \quad (\text{H.32})$$

Воспользовавшись представлением (H.26) для тензора моментных напряжений, перепишем уравнение баланса энергии (H.32) в форме

$$\rho \dot{\mathcal{U}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m} \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} + \nabla \cdot \mathbf{h} + \mathcal{Q}, \quad (\text{H.33})$$

где использовано обозначение

$$\boldsymbol{\gamma} = \nabla \times \boldsymbol{\varphi}. \quad (\text{Н.34})$$

Полученные в этом разделе уравнения будут использоваться далее для построения различных версий теории пьезоэлектричества.

### Н.3. Модификация классической теории пьезоэлектричества

Обобщенная теория пьезоэлектричества строится на основе линейной моментной теории упругости. Основные уравнения, описывающие механическое поведение среды Коссера, представлены в предыдущем разделе. Для того чтобы наделить этот континуум пьезоэлектрическими свойствами, необходимо учесть влияние электрического поля. Воздействие электрического поля на материальную среду можно моделировать двумя способами: либо посредством распределенных сил и моментов в уравнениях баланса количества движения и кинетического момента, соответственно, либо посредством тех слагаемых в уравнении баланса энергии, которые связаны с энергией немеханического происхождения. Второй способ близок к классическому подходу, и именно он реализован в этом разделе.

Основное отличие разработанной в этом разделе теории от классической заключается в следующем. Поскольку континуум Коссера обладает дополнительными степенями свободы, указанная теория содержит дополнительные тензорные характеристики свойств материальной среды, в том числе и дополнительные тензоры, отвечающие за пьезоэлектрические свойства. При определении структуры тензоров пьезоэлектрических модулей для кристаллов, обладающих различной симметрией, рассмотрены два случая: вектор напряженности электрического поля — полярный и вектор напряженности электрического поля — аксиальный.

#### Н.3.1. Приведенное уравнение баланса энергии

Уравнение баланса энергии в форме (Н.32) содержит слагаемые  $\nabla \cdot \mathbf{h} + \mathcal{Q}$ , которые характеризуют обмен энергией немеханического происхождения между соседними частями среды и подвод энергии немеханического происхождения от внешнего источника. Будем считать, что эти слагаемые характеризуют обмен энергией с электрическим полем. Введем в рассмотрение два

вектора  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и  $\boldsymbol{\mathcal{D}}$ , такие, что

$$\nabla \cdot \mathbf{h} + \mathcal{Q} = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \dot{\boldsymbol{\mathcal{D}}}. \quad (\text{H.35})$$

Здесь векторам  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и  $\boldsymbol{\mathcal{D}}$  придается смысл вектора напряженности электрического поля и вектора электрической индукции, соответственно. Подставив (H.35) в (H.32), получим следующую форму уравнения баланса энергии:

$$\rho \dot{\mathcal{U}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} + \boldsymbol{\mu}^T \cdot \nabla \dot{\varphi} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \dot{\boldsymbol{\mathcal{D}}}. \quad (\text{H.36})$$

Согласно уравнению (H.36) объемная плотность внутренней энергии  $\rho \mathcal{U}$  зависит от аргументов  $\mathbf{g}$ ,  $\boldsymbol{\theta}$ ,  $\nabla \varphi$  и  $\boldsymbol{\mathcal{D}}$ .

Во многих случаях вместо вектора  $\boldsymbol{\mathcal{D}}$  удобнее использовать в качестве независимой переменной вектор  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Для того чтобы это сделать, так же как и в классической теории пьезоэлектричества, следует ввести в рассмотрение плотность электрической энтальпии (H.4). При использовании (H.4) уравнение баланса энергии (H.36) записывается в форме

$$\rho \dot{\mathcal{F}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} + \boldsymbol{\mu}^T \cdot \nabla \dot{\varphi} - \boldsymbol{\mathcal{D}} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (\text{H.37})$$

Согласно (H.37) плотность электрической энтальпии  $\rho \mathcal{F}$  является функцией аргументов  $\mathbf{g}$ ,  $\boldsymbol{\theta}$ ,  $\nabla \varphi$  и  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Следовательно,

$$\rho \dot{\mathcal{F}} = \left( \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \mathbf{g}} \right)^T \cdot \dot{\mathbf{g}} + \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} + \left( \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \nabla \varphi} \right)^T \cdot \nabla \dot{\varphi} + \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (\text{H.38})$$

Сравнивая уравнения (H.37) и (H.38) и принимая во внимание упругость рассматриваемой среды, получаем соотношения Коши–Грина

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \mathbf{g}}, \quad \mathbf{q} = - \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\theta}}, \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \nabla \varphi}, \quad \boldsymbol{\mathcal{D}} = - \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (\text{H.39})$$

Далее принимается гипотеза натурального состояния. Это означает, что при нулевых деформациях напряжения отсутствуют. В данном случае плотность электрической энтальпии можно представить в форме

$$\begin{aligned} \rho \mathcal{F} = & \rho \mathcal{F}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{g} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{g} \cdot \mathbf{N} \cdot \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\mathcal{M}} \cdot \mathbf{g} - \\ & - \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{2} \nabla \varphi \cdot \boldsymbol{\Phi}^\mu \cdot \nabla \varphi + \boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{\Phi}^\times \cdot \nabla \varphi + \\ & + \mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\Phi}^\tau \cdot \nabla \varphi - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\Phi}^\varepsilon \cdot \nabla \varphi. \end{aligned} \quad (\text{H.40})$$

Тензоры  $\mathbf{C}$ ,  $\boldsymbol{\epsilon}$ ,  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{X}$ ,  $\mathbf{Y}$ ,  $\Phi^\mu$ ,  $\Phi^\times$ ,  $\Phi^\tau$  и  $\Phi^\varepsilon$  характеризуют физические свойства рассматриваемого материала. На указанные тензоры накладываются определенные ограничения, которые вытекают из условий положительной определенности внутренней энергии.

Подставив выражение (Н.40) в соотношения Коши–Грина (Н.39), получим

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \mathbf{g}} = \mathbf{C} \cdot \cdot \mathbf{g} + \mathbf{N} \cdot \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{M} + \Phi^\tau \cdot \cdot \nabla \varphi, \quad (\text{Н.41})$$

$$\mathbf{q} = -\frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = -\mathbf{g} \cdot \cdot \mathbf{N} - \mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{X} - \Phi^\times \cdot \cdot \nabla \varphi, \quad (\text{Н.42})$$

$$\boldsymbol{\mu}^\tau = \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \nabla \varphi} = \mathbf{g} \cdot \cdot \Phi^\tau + \boldsymbol{\theta} \cdot \Phi^\times - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \Phi^\varepsilon + \Phi^\mu \cdot \cdot \nabla \varphi, \quad (\text{Н.43})$$

$$\mathcal{D} = -\frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{g} + \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \Phi^\varepsilon \cdot \nabla \varphi. \quad (\text{Н.44})$$

Далее, в целях упрощения теории, примем предположение (Н.26). Тогда уравнение баланса энергии (Н.37) приобретает форму

$$\rho \dot{\mathcal{F}} = \boldsymbol{\tau} \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q} \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m} \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} - \mathcal{D} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (\text{Н.45})$$

Следствием (Н.45) являются соотношения Коши–Грина

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \mathbf{g}}, \quad \mathbf{q} = -\frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\theta}}, \quad \mathbf{m} = -\frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\gamma}}, \quad \mathcal{D} = -\frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (\text{Н.46})$$

Для плотности электрической энтальпии вместо (Н.40) примем более простое выражение

$$\begin{aligned} \rho \mathcal{F} = \rho \mathcal{F}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{g} \cdot \cdot \mathbf{C} \cdot \cdot \mathbf{g} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{2} \chi \boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\gamma} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \\ + \mathbf{g} \cdot \cdot \mathbf{N} \cdot \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{g} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\theta}, \end{aligned} \quad (\text{Н.47})$$

где  $\chi$  — физическая константа. В результате упрощения формул вместо (Н.41)–(Н.43) получим определяющие уравнения следующего вида:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \mathbf{g}} = \mathbf{C} \cdot \cdot \mathbf{g} + \mathbf{N} \cdot \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{M}, \quad (\text{Н.48})$$

$$\mathbf{q} = -\frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = -\mathbf{g} \cdot \cdot \mathbf{N} - \mathbf{Y} \cdot \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{X}, \quad (\text{Н.49})$$

$$\mathbf{m} = -\frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\gamma}} = -\chi \boldsymbol{\gamma}, \quad (\text{Н.50})$$

$$\mathbf{D} = -\frac{\partial \rho \mathcal{F}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{g} + \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (\text{H.51})$$

Для дальнейшей конкретизации теории необходимо определить общий вид тензоров  $\mathbf{C}$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}$ ,  $\mathbf{Y}$ ,  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{X}$ , что можно сделать, воспользовавшись теорией симметрии.

### Н.3.2. Теория симметрии тензорных величин

При использовании теории симметрии необходимо принять во внимание тот факт, что существуют тензорные величины двух типов: полярные и аксиальные. Полярные тензоры не зависят от выбора ориентации в трехмерном пространстве. Аксиальные тензоры меняют знак при изменении ориентации в трехмерном пространстве. В рассматриваемой теории пьезоэлектричества свойства материала характеризуются тензорами различного типа. При этом, как показывает несложный анализ выражения (H.47), тип тензоров  $\mathbf{M}$  и  $\mathbf{X}$  зависит от типа вектора напряженности электрического поля  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Если  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — полярный вектор, то тензор  $\mathbf{M}$  — полярный, а тензор  $\mathbf{X}$  — аксиальный. Если  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — аксиальный вектор, то тензор  $\mathbf{M}$  — аксиальный, а тензор  $\mathbf{X}$  — полярный. В связи с этим в рассмотренной теории пьезоэлектричества, так же как и в классической теории, тип вектора электрического поля имеет принципиальное значение.

Воспользуемся определением ортогонального преобразования, принятым в четвертой главе.

**Определение 1.** Ортогональным преобразованием тензора  $\mathbf{S}$  ранга  $k$  называется тензор  $\mathbf{S}'$

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= S^{i_1 \dots i_k} \mathbf{e}_{i_1} \otimes \dots \otimes \mathbf{e}_{i_k} \quad \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathbf{S}' &\equiv (\det \mathbf{Q})^\alpha \underset{1}{\otimes}^k \mathbf{Q} \cdot \mathbf{S} \equiv (\det \mathbf{Q})^\alpha S^{i_1 \dots i_k} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_{i_1} \otimes \dots \otimes \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_{i_k}, \end{aligned} \quad (\text{H.52})$$

где  $\alpha = 0$ , если тензор  $\mathbf{S}$  — полярный, и  $\alpha = 1$ , если тензор  $\mathbf{S}$  — аксиальный. Тензор  $\mathbf{Q}$  является ортогональным тензором.

Примерами ортогональных тензоров служат тензор инверсии  $\mathbf{Q} = -\mathbf{E}$ , тензор зеркального отражения

$$\mathbf{Q} = \mathbf{E} - 2\mathbf{n} \otimes \mathbf{n},$$

где  $\mathbf{n}$  — единичный вектор, и тензор поворота

$$\mathbf{Q}(\alpha \mathbf{n}) = (1 - \cos \alpha) \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} + \cos \alpha \mathbf{E} + \sin \alpha \mathbf{n} \times \mathbf{E},$$

где  $\alpha$  — угол поворота;  $\mathbf{n}$  — единичный вектор, определяющий направление оси поворота.

Воспользуемся определением группы симметрии тензора  $\mathbf{S}$ , принятым в четвертой главе.

**Определение 2.** Группой симметрии тензора  $\mathbf{S}$  называется набор ортогональных тензоров  $\mathbf{Q}_s$ , являющихся решениями уравнения

$$(\det \mathbf{Q})^\alpha \underset{1}{\otimes}^k \mathbf{Q} \cdot \mathbf{S} = \mathbf{S}, \quad (\text{H.53})$$

где  $\mathbf{S}$  — заданный тензор.

Если известен тензор  $\mathbf{S}$ , группа симметрии этого тензора находится из решения уравнения (H.53). Обратная задача возникает, когда известна группа симметрии тензора  $\mathbf{S}$  и требуется найти общий вид этого тензора. Именно обратная задача представляет интерес для практических приложений. Как правило, известна группа симметрии реального физического объекта. Для того чтобы определить группу симметрии некоторого тензора, характеризующего свойства этого объекта, необходимо использовать принцип Кюри–Неймана.

**Принцип Кюри–Неймана.** Группа симметрии причины есть подгруппа группы симметрии следствия.

Рассмотрим конкретный пьезоэлектрический кристалл, например  $\alpha$ -кварц. В соответствии с принципом Кюри–Неймана, группа симметрии тензоров, характеризующих механические и физические свойства кристалла, либо совпадает с группой симметрии кристалла, либо шире ее. Дополнительные элементы симметрии могут возникнуть вследствие различных причин, например, как следствие формы кристалла. Так как рассматриваемая среда считается бесконечной и однородной, представляется возможным найти общий вид тензоров  $\mathbf{C}$ ,  $\boldsymbol{\epsilon}$ ,  $\mathbf{Y}$ ,  $\mathbf{N}$ ,  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{X}$ , используя инвариантность относительно всех элементов симметрии, свойственных данной структуре. Численные значения физических констант должны быть определены экспериментальным путем.

В качестве примера рассмотрим тензор второго ранга  $\mathbf{X}$  и тензор третьего ранга  $\mathbf{M}$ . Представим их в следующей форме:

$$\mathbf{X} = X^{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \quad \mathbf{M} = M^{ijk} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k.$$

Ортогональные преобразования этих тензоров имеют вид

$$\mathbf{X}' = (\det \mathbf{Q})^\alpha X^{ij} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_j, \quad \mathbf{M}' = (\det \mathbf{Q})^\alpha M^{ijk} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_k.$$

Если  $\mathbf{Q}$  является одним из элементов симметрии кристалла, то должны выполняться равенства  $\mathbf{X}' = \mathbf{X}$ ,  $\mathbf{M}' = \mathbf{M}$ , которые можно записать в виде

$$\mathbf{X}^{ij} [(\det \mathbf{Q})^\alpha \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_j - \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j] = \mathbf{0}, \quad (\text{H.54})$$

$$\mathbf{M}^{ijk} [(\det \mathbf{Q})^\alpha \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}_k - \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k] = \mathbf{0}.$$

Воспользуемся условиями (H.54) для определения структуры тензоров  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{M}$ . Пусть некоторый кристалл имеет своим элементом симметрии тензор инверсии  $(-\mathbf{E})$ . Допустим, что вектор  $\boldsymbol{\varepsilon}$  является полярным вектором. В таком случае тензор  $\mathbf{X}$  — аксиальный, тензор  $\mathbf{M}$  — полярный и согласно условиям (H.54)  $\mathbf{X} = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{M} = \mathbf{0}$ . Это означает, что пьезоэффект для данного типа кристалла невозможен. Если вектор  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — аксиальный вектор, то тензор  $\mathbf{X}$  — полярный, а тензор  $\mathbf{M}$  — аксиальный. В этом случае условия (H.54) выполняются тождественно. Это означает, что пьезоэффект для данного типа кристалла возможен. Основываясь на данных фактах, можно предложить способ экспериментального определения типа вектора напряженности электрического поля. Если обнаружится пьезоэлектрический материал с центральной симметрией, тогда можно будет сделать вывод, что вектор  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — аксиальный.

Хорошо известно, что существуют пьезоэлектрические материалы с двумя плоскостями зеркальной симметрии. Пусть тензоры

$$\mathbf{Q}_1 = \mathbf{E} - 2\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1, \quad \mathbf{Q}_2 = \mathbf{E} - 2\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 \quad (\text{H.55})$$

являются элементами симметрии некоторого кристалла. Согласно принципу Кюри–Неймана, эти тензоры должны принадлежать группе симметрии тензоров  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{M}$ . Если  $\mathbf{X}$  — аксиальный тензор, а  $\mathbf{M}$  — полярный, то они имеют следующую структуру:

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}^{12} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{X}^{21} \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1,$$

$$\mathbf{M} = (\mathcal{M}^{113} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathcal{M}^{223} \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathcal{M}^{333} \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3) \otimes \mathbf{e}_3 + \quad (\text{H.56})$$

$$+ \mathcal{M}^{131} (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1) \otimes \mathbf{e}_1 + \mathcal{M}^{232} (\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_2) \otimes \mathbf{e}_2.$$

Если  $\mathbf{X}$  — полярный тензор, а  $\mathbf{M}$  — аксиальный, то эти тензоры могут быть представлены следующим образом:

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}^{11} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{X}^{22} \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{X}^{33} \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3,$$

$$\mathbf{M} = \mathcal{M}^{231} (\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_2) \otimes \mathbf{e}_1 + \quad (\text{H.57})$$

$$+ \mathcal{M}^{132} (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1) \otimes \mathbf{e}_2 + \mathcal{M}^{123} (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1) \otimes \mathbf{e}_3.$$

В классической теории пьезоэлектричества вектор  $\boldsymbol{\varepsilon}$  считается полярным, и поэтому для тензоров  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{M}$  используются выражения (Н.56). Однако, если окажется, что вектор  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — аксиальный, для описания свойств реального кристалла нужно будет использовать выражения (Н.57).

Если группа симметрии кристалла содержит только повороты, то тип вектора  $\boldsymbol{\varepsilon}$  не имеет значения. Приведем результаты анализа системы (Н.54) для  $\alpha$ -кварца, принадлежащего классу 32. У структуры класса 32 есть два элемента симметрии: поворот вокруг оси  $x_3$  на угол  $2\pi/3$  и поворот вокруг оси  $x_1$  на угол  $\pi$ . Любой тензор второго ранга, характеризующий свойства  $\alpha$ -кварца, например тензор  $\mathbf{X}$ , имеет следующую структуру:

$$\mathbf{X} = X_1 \mathbf{E} + (X_2 - X_1) \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3. \quad (\text{Н.58})$$

Любой тензор третьего ранга, характеризующий свойства  $\alpha$ -кварца, например тензор  $\mathbf{M}$ , может быть представлен в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{M} = & \mathcal{M}_0 (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{a} - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{b}) + \mathcal{M}_1 \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{c} + \mathcal{M}_2 \mathbf{c} \otimes \mathbf{e}_3 + \\ & + \mathcal{M}_3 (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1), \\ \mathbf{a} = & \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2, \quad \mathbf{b} = \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1, \\ \mathbf{c} = & \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1. \end{aligned} \quad (\text{Н.59})$$

Тензор четвертого ранга, характеризующий свойства  $\alpha$ -кварца, имеет достаточно сложную форму и содержит 14 независимых компонент. Тензор упругости имеет более простой вид, так как благодаря симметрии тензора напряжений и тензора деформаций он содержит только 6 независимых компонент.

### Н.3.3. Простейшая пьезоэлектрическая среда

Выпишем полную систему пьезоэлектрических уравнений. Уравнения динамики выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{q} + \rho \mathbf{F} &= \rho \ddot{\mathbf{u}}, \\ \nabla \times \mathbf{m} + \mathbf{q} + \rho \mathbf{L} &= \rho \mathbf{J} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}, \quad \nabla \cdot \mathcal{D} = 0. \end{aligned} \quad (\text{Н.60})$$

Соотношения Коши–Грина имеют вид (Н.46). Обсуждение теории пьезоэлектричества в общей форме применительно к реальным кристаллам в данном случае оставим без внимания. Ограничимся рассмотрением простейшего

выражения для плотности электрической энтальпии

$$\begin{aligned} \rho\mathcal{F} = & \mu \mathbf{g} \cdot \cdot \mathbf{g} + \frac{1}{2} \lambda (\text{tr } \mathbf{g})^2 + \frac{1}{2} c \boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{2} \chi \boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\gamma} - \\ & - \frac{1}{2} \epsilon \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\mathcal{M}} \cdot \cdot \mathbf{g} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\theta}. \end{aligned} \quad (\text{H.61})$$

В выражении (H.61) в общей форме представлены только те слагаемые, которые связаны с пьезоэффектом. Подставив (H.61) в соотношения Коши–Грина (H.46), получим определяющие уравнения

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} = 2\mu \mathbf{g} + \lambda (\text{tr } \mathbf{g}) \mathbf{E} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\mathcal{M}}, \quad \mathbf{q} = -c \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{X}, \\ \mathbf{m} = -\chi \boldsymbol{\gamma}, \quad \boldsymbol{\mathcal{D}} = \epsilon \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\mathcal{M}} \cdot \cdot \mathbf{g} + \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\theta}. \end{aligned} \quad (\text{H.62})$$

Тензор и векторы деформации имеют вид

$$\mathbf{g} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\varphi} - \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \nabla \times \boldsymbol{\varphi}. \quad (\text{H.63})$$

В классической теории пьезоэлектричества применяются уравнения (H.60)–(H.63) при следующих ограничениях:

$$\boldsymbol{\varphi} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u}, \quad \mathbf{X} = \mathbf{0}, \quad \chi = 0, \quad \mathbf{J} = \mathbf{0}. \quad (\text{H.64})$$

Таким образом, в уравнения (H.60)–(H.63) пьезоэффект попадает двумя путями, которые связаны с наличием перекрестных членов в выражении для плотности электрической энтальпии (H.61).

*Вариант 1:*  $\boldsymbol{\mathcal{M}} \neq \mathbf{0}, \quad \mathbf{X} = \mathbf{0}.$

Этот случай — классический. Здесь пьезоэффект связан с симметричной частью тензора напряжений.

*Вариант 2:*  $\boldsymbol{\mathcal{M}} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{X} \neq \mathbf{0}.$

Этот случай — неклассический. Здесь пьезоэффект связан исключительно с антисимметричной частью тензора напряжений. В общем случае и тензор  $\boldsymbol{\mathcal{M}}$ , и тензор  $\mathbf{X}$  могут быть отличны от нуля.

Пусть группа симметрии пьезоэлектрических свойств содержит тензоры (H.55) и тензор поворота на любой угол вокруг оси  $\mathbf{e}_3$ .

Если  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — полярный вектор, то тензор  $\boldsymbol{\mathcal{M}}$  — полярный, а тензор  $\boldsymbol{\mathcal{X}}$  — аксиальный. В этом случае тензоры  $\boldsymbol{\mathcal{M}}$  и  $\boldsymbol{\mathcal{X}}$  могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mathcal{M}} &= [\mathcal{M}_1 \mathbf{E} + (\mathcal{M}_2 - \mathcal{M}_1) \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3] \otimes \mathbf{e}_3 + \\ &+ \mathcal{M}_3 [\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \otimes (\mathbf{E} - \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3)], \quad (\text{H.65}) \\ \boldsymbol{\mathcal{X}} &= \mathcal{X}_1 \mathbf{e}_3 \times \mathbf{E}. \end{aligned}$$

Если  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — аксиальный вектор, то тензор  $\boldsymbol{\mathcal{M}}$  — аксиальный, а тензор  $\boldsymbol{\mathcal{X}}$  — полярный. В этом случае тензоры  $\boldsymbol{\mathcal{M}}$  и  $\boldsymbol{\mathcal{X}}$  имеют вид

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mathcal{M}} &= \mathcal{M}_1 [\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 \times \mathbf{E}], \quad (\text{H.66}) \\ \boldsymbol{\mathcal{X}} &= \mathcal{X}_1 \mathbf{E} + (\mathcal{X}_2 - \mathcal{X}_1) \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3. \end{aligned}$$

Сравнивая выражения (H.65) и (H.66), мы видим существенное различие между ними. Важно, что это различие может быть установлено экспериментально, а следовательно появляется возможность экспериментального определения типа вектора напряженности электрического поля  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Для того чтобы использовать экспериментальные данные, необходимо решить конкретные задачи. Один из возможных подходов заключается в анализе дисперсионных соотношений. Этот путь ведет к достаточно сложным уравнениям, поскольку построенная теория содержит шесть дисперсионных кривых — три акустических и три оптических. (В классической теории есть только акустические дисперсионные кривые.)

В качестве иллюстрации рассмотрим простейший случай, когда тензор  $\boldsymbol{\mathcal{M}}$  равен нулю. Рассмотрим два варианта теории.

*Вариант 1.* Вектор напряженности электрического поля  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — полярный. Тогда соотношения между напряжениями и деформациями (H.62) принимают вид

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &= 2\mu \mathbf{g} + \lambda(\text{tr } \mathbf{g}) \mathbf{E}, \quad \mathbf{q} = -c \boldsymbol{\theta} + \mathcal{X}_1 \boldsymbol{\varepsilon} \times \mathbf{e}_3, \quad (\text{H.67}) \\ \mathbf{m} &= -\chi \boldsymbol{\gamma}, \quad \boldsymbol{\mathcal{D}} = \epsilon \boldsymbol{\varepsilon} + \mathcal{X}_1 \mathbf{e}_3 \times \boldsymbol{\theta}. \end{aligned}$$

*Вариант 2.* Вектор напряженности электрического поля  $\boldsymbol{\varepsilon}$  — аксиальный. В этом случае соотношения между напряжениями и деформациями (H.62) представлены следующим образом:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &= 2\mu \mathbf{g} + \lambda(\text{tr } \mathbf{g}) \mathbf{E}, \quad \mathbf{q} = -c \boldsymbol{\theta} + \mathcal{X}_1 \boldsymbol{\varepsilon} + (\mathcal{X}_2 - \mathcal{X}_1)(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{e}_3) \mathbf{e}_3, \quad (\text{H.68}) \\ \mathbf{m} &= -\chi \boldsymbol{\gamma}, \quad \boldsymbol{\mathcal{D}} = \epsilon \boldsymbol{\varepsilon} + \mathcal{X}_1 \boldsymbol{\theta} + (\mathcal{X}_2 - \mathcal{X}_1)(\boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{e}_3) \mathbf{e}_3. \end{aligned}$$

Если направление вектора  $\boldsymbol{\varepsilon}$  совпадает с направлением вектора  $\mathbf{e}_3$ , то в случае (H.67) пьезоэффекта не будет, а в случае (H.68) он будет иметь место.

Если найдется кристалл со свойствами (Н.68), то будет установлено, что вектор напряженности электрического поля  $\mathbf{E}$  является аксиальным. Данное обстоятельство очень важно с теоретической точки зрения. Очевидно, что дисперсионные кривые в случаях (Н.67) и (Н.68) будут различными. В настоящее время неизвестно, существуют ли пьезоэлектрические кристаллы с подобными свойствами. Но существование таких кристаллов теоретически возможно.

## Н.4. Микрополярная теория дипольной пьезоэлектрической среды

В этом разделе рассматривается теория, предназначенная для описания поведения пьезоэлектрических кристаллов, являющихся дипольными кристаллами. Как отмечалось ранее, воздействие электрического поля на кристалл можно моделировать двумя способами: либо посредством распределенных сил и моментов в уравнениях баланса количества движения и кинетического момента, соответственно, либо посредством подвода энергии немеханического происхождения. Далее предлагается теория, которая включает в себя оба механизма взаимодействия материальной среды с электрическим полем. Однако обмен энергией между материальной средой и электрическим полем моделируется здесь иначе, чем в классической теории пьезоэлектричества.

### Н.4.1. Модель дипольной частицы

Рассмотрим среду, каждая частица которой является нейтральным диполем с зарядами  $\mathbf{q}_+ = \mathbf{q}$  и  $\mathbf{q}_- = -\mathbf{q}$ , способным перемещаться в пространстве и поворачиваться, а также изменять свою величину, т. е. растягиваться или сжиматься. Пусть отсчетное положение диполя (рис. Н.1) определяется следующими величинами:  $\mathbf{r}^+$  и  $\mathbf{r}^-$  — радиус-векторы зарядов  $\mathbf{q}^+$  и  $\mathbf{q}^-$ , соответственно,  $\mathbf{l}_0 = \mathbf{r}^+ - \mathbf{r}^-$  — вектор, определяющий относительное расположение зарядов в диполе,  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор центра диполя. При переходе в актуальное положение заряды  $\mathbf{q}^+$  и  $\mathbf{q}^-$  перемещаются в точки пространства, определяемые соответственно радиус-векторами  $\mathbf{R}^+$  и  $\mathbf{R}^-$ , центр частицы-диполя перемещается в точку, определяемую радиус-вектором  $\mathbf{R}$ . Вектор, определяющий относительное расположение зарядов в диполе в актуальной конфигурации, вычисляется по формуле  $\mathbf{l} = \mathbf{R}^+ - \mathbf{R}^-$ . Величины, характеризующие перемещение центра диполя и составляющих его зарядов, определяются сле-

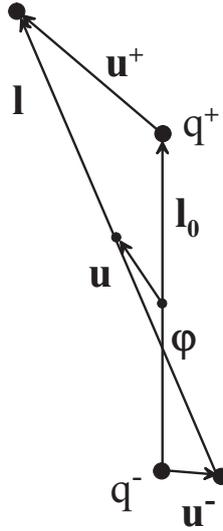


Рис. Н.1. Тело-точка как пара зарядов

дующим образом:

$$\mathbf{u} = \mathbf{R} - \mathbf{r}, \quad \mathbf{u}^+ = \mathbf{R}^+ - \mathbf{r}^+, \quad \mathbf{u}^- = \mathbf{R}^- - \mathbf{r}^-. \quad (\text{H.69})$$

Введем в рассмотрение дипольные моменты частицы в отсчетном и актуальном положениях, обозначив их соответственно  $\mathbf{d}_0$  и  $\mathbf{d}$ ,

$$\mathbf{d}_0 = q\mathbf{l}_0 = q(\mathbf{r}^+ - \mathbf{r}^-), \quad \mathbf{d} = q\mathbf{l} = q(\mathbf{R}^+ - \mathbf{R}^-). \quad (\text{H.70})$$

Пусть  $\mathbf{p}$  — изменение дипольного момента,  $\xi$  — относительное изменение абсолютной величины диполя

$$\mathbf{p} = \mathbf{d} - \mathbf{d}_0, \quad |\mathbf{d}| = |\mathbf{d}_0|(1 + \xi). \quad (\text{H.71})$$

После несложных преобразований получим следующее представление для вектора  $\mathbf{p}$ :

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad \mathbf{p}_1 = \xi\mathbf{d}_0, \quad \mathbf{p}_2 = \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{d}_0, \quad (\text{H.72})$$

где  $\boldsymbol{\varphi}$  — вектор поворота диполя. Формулы (H.72) получены в предположении малости поворота и растяжения диполя. Такое предположение оправдано, поскольку далее рассматривается линейная теория.

Запишем выражение для скорости подвода энергии, передаваемой диполю через электрическое поле в веществе,

$$\dot{\mathcal{U}} = \mathbf{F}^+ \cdot \dot{\mathbf{u}}^+ + \mathbf{F}^- \cdot \dot{\mathbf{u}}^-. \quad (\text{H.73})$$

Воспользовавшись формулой Лоренца для силы, действующей на заряженную частицу, проделаем следующие преобразования:

$$\begin{aligned}\dot{U} &= q^+ \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{R}^+) \cdot \dot{\mathbf{u}}^+ + q^- \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{R}^-) \cdot \dot{\mathbf{u}}^- = \\ &= q (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{R}^+) - \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{R}^-)) \cdot \dot{\mathbf{u}} + q \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{R}^+) \cdot \frac{1}{2q} \dot{\mathbf{p}} + q \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{R}^-) \cdot \frac{1}{2q} \dot{\mathbf{p}} = \\ &= \mathbf{d}_0 \cdot (\nabla \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \dot{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \dot{\mathbf{p}}.\end{aligned}$$

С помощью уравнений (Н.72) вычислим производную от вектора поляризации

$$\dot{\mathbf{p}} = \dot{\xi} \mathbf{d}_0 + \dot{\boldsymbol{\varphi}} \times \mathbf{d}_0. \quad (\text{Н.74})$$

Таким образом, скорость подвода энергии имеет вид

$$\dot{U} = \mathbf{d}_0 \cdot (\nabla \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \dot{\mathbf{u}} + (\mathbf{d}_0 \times \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} + (\mathbf{d}_0 \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \dot{\xi}. \quad (\text{Н.75})$$

#### Н.4.2. Уравнения дипольной пьезоэлектрической среды

Введем в рассмотрение плотность спонтанной поляризации сплошной среды  $\mathcal{P}^s$ , определив ее следующей формулой,

$$\mathcal{P}^s = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\sum_{k \in \Delta V} \mathbf{d}_{0k}}{\Delta V}. \quad (\text{Н.76})$$

Определим плотность пьезоэлектрической поляризации сплошной среды  $\mathcal{P}^p$  как предел отношения

$$\mathcal{P}^p = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\sum_{k \in \Delta V} \mathbf{P}_k}{\Delta V} = \mathcal{P}_1^p + \mathcal{P}_2^p, \quad (\text{Н.77})$$

где

$$\mathcal{P}_1^p = \xi \mathcal{P}^s, \quad \mathcal{P}_2^p = \boldsymbol{\varphi} \times \mathcal{P}^s. \quad (\text{Н.78})$$

Вектор  $\mathcal{P}^p$  представлен в виде суммы поляризаций, имеющих разную природу: одна часть поляризации связана с поворотом дипольного момента среды, а другая — с изменением его абсолютной величины. Векторы двух составляющих поляризации взаимно ортогональны, и это позволяет однозначно разложить произвольный вектор  $\mathcal{P}^p$  по двум указанным типам поляризации.

Воспользовавшись формулой (Н.76), запишем аналог формулы (Н.75) для сплошной среды

$$\dot{U} = \mathcal{P}^s \cdot (\nabla \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \dot{\mathbf{u}} + (\mathcal{P}^s \times \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} + (\mathcal{P}^s \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \dot{\xi}. \quad (\text{Н.79})$$

Пусть влияние электрического поля представляет собой внешнее воздействие. Тогда мощность этого внешнего воздействия мы можем вычислить двумя способами. С одной стороны, мощность внешних воздействий, приходящихся на единицу объема сплошной среды, равна  $\rho(\mathbf{F} \cdot \dot{\mathbf{u}} + \mathbf{L} \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}})$ . С другой стороны, мощность внешних воздействий равна той части скорости подвода энергии  $\dot{\mathcal{U}}$ , которая зависит от скоростей  $\dot{\mathbf{u}}$  и  $\dot{\boldsymbol{\phi}}$ . Таким образом, получаем

$$\rho \mathbf{F} \cdot \dot{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{L} \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}} = \mathcal{P}^s \cdot (\nabla \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \dot{\mathbf{u}} + (\mathcal{P}^s \times \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}}. \quad (\text{H.80})$$

Сравнивая левую и правую части уравнения (H.80), приходим к выводу, что коэффициент при  $\dot{\mathbf{u}}$  в правой части уравнения можно отождествить с объемной силой, а коэффициент при  $\dot{\boldsymbol{\phi}}$  в правой части уравнения можно отождествить с объемным моментом

$$\rho \mathbf{F} = \mathcal{P}^s \cdot \nabla \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \rho \mathbf{L} = \mathcal{P}^s \times \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (\text{H.81})$$

Итак, смысл первых двух слагаемых в правой части выражения (H.79) определен. Последнее слагаемое можно отождествить с величиной  $\mathcal{Q}$ , характеризующей подвод энергии от внешнего источника (см. уравнение баланса энергии (H.33)),

$$\mathcal{Q} = (\mathcal{P}^s \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \dot{\xi}. \quad (\text{H.82})$$

Уравнения движения (H.21), (H.27) с учетом выражений для объемных сил и моментов (H.81) принимают вид

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{q} + \mathcal{P}^s \cdot \nabla \boldsymbol{\varepsilon} = \rho \ddot{\mathbf{u}}, \quad (\text{H.83})$$

$$\nabla \times \mathbf{m} + \mathbf{q} + \mathcal{P}^s \times \boldsymbol{\varepsilon} = \rho \mathbf{J} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}. \quad (\text{H.84})$$

Введем в рассмотрение вектор электрической индукции  $\mathcal{D}$ . Воспользовавшись хорошо известной формулой, выразим вектор  $\mathcal{D}$  через вектор электрического поля в веществе и вектор плотности пьезоэлектрической поляризации

$$\mathcal{D} = \varepsilon_0 \boldsymbol{\varepsilon} + \mathcal{P}^p. \quad (\text{H.85})$$

Вектор  $\boldsymbol{\varepsilon}$  в формуле (H.85) — это вектор напряженности электрического поля в веществе, который зависит от плотности спонтанной поляризации  $\mathcal{P}^s$ . Поэтому в выражении для вектора электрической индукции  $\mathcal{D}$  второе слагаемое представляет собой плотность пьезоэлектрической поляризации  $\mathcal{P}^p$ , а не суммарную плотность поляризации  $\mathcal{P} = \mathcal{P}^s + \mathcal{P}^p$ .

Воспользовавшись формулами (H.77), (H.78), перепишем выражение (H.85) в форме

$$\mathcal{D} = \varepsilon_0 \boldsymbol{\varepsilon} + \xi \mathcal{P}^s + \boldsymbol{\varphi} \times \mathcal{P}^s. \quad (\text{H.86})$$

Уравнение электростатики (Н.2) с учетом выражения (Н.86) принимает вид

$$\nabla \cdot [\varepsilon_0 \mathbf{E} + \xi \mathcal{P}^s + \boldsymbol{\varphi} \times \mathcal{P}^s] = 0. \quad (\text{Н.87})$$

Согласно уравнению (Н.87), принятое в классической теории пьезоэлектричества соотношение Коши–Грина, связывающее между собой  $\mathcal{D}$  и  $\mathbf{E}$ , в рассматриваемой теории является излишним, и его следует заменить соотношением Коши–Грина, связывающим между собой величину  $\xi$  и проекцию вектора  $\mathbf{E}$  на вектор плотности спонтанной поляризации. В этом заключается одно из существенных отличий микрополярной теории дипольной пьезоэлектрической среды от классической теории пьезоэлектричества.

Для того чтобы получить соотношения Коши–Грина, проведем следующие преобразования уравнения баланса энергии (Н.33). Представим  $\boldsymbol{\tau}$ ,  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{m}$  в виде

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_e + \boldsymbol{\tau}_f, \quad \mathbf{q} = \mathbf{q}_e + \mathbf{q}_f, \quad \mathbf{m} = \mathbf{m}_e + \mathbf{m}_f, \quad (\text{Н.88})$$

где  $\boldsymbol{\tau}_e$ ,  $\mathbf{q}_e$ ,  $\mathbf{m}_e$  представляют собой упругие (не зависящие от скоростей деформаций) составляющие силовых и моментных напряжений, а  $\boldsymbol{\tau}_f$ ,  $\mathbf{q}_f$  и  $\mathbf{m}_f$  определяют диссипативные составляющие этих напряжений. Приняв во внимание (Н.88) и выражение для скорости подвода энергии (Н.82), запишем уравнение баланса энергии (Н.33) в форме

$$\begin{aligned} \rho \dot{u} = & \boldsymbol{\tau}_e \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q}_e \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m}_e \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} + (\mathbf{E} \cdot \mathcal{P}^s) \dot{\xi} + \\ & + \nabla \cdot \mathbf{h} + \boldsymbol{\tau}_f \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}}. \end{aligned} \quad (\text{Н.89})$$

Введем в рассмотрение две скалярных величины  $\vartheta$  и  $\mathcal{H}$ , удовлетворяющих уравнению

$$\vartheta \dot{\mathcal{H}} = \nabla \cdot \mathbf{h} + \boldsymbol{\tau}_f \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}}, \quad (\text{Н.90})$$

и назовем их температурой и энтропией, соответственно. Для вектора теплового потока  $\mathbf{h}$  можно использовать определяющее уравнение

$$\mathbf{h} = \mathbf{k} \nabla \vartheta, \quad (\text{Н.91})$$

где  $\mathbf{k}$  — коэффициент теплопроводности среды. Подставив (Н.91) в (Н.90), получим уравнение теплопроводности

$$\mathbf{k} \Delta \vartheta - \vartheta \dot{\mathcal{H}} = -\boldsymbol{\tau}_f \cdot \cdot \dot{\mathbf{g}} + \mathbf{q}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} + \mathbf{m}_f \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}}. \quad (\text{Н.92})$$

Слагаемые в правой части уравнения (Н.92) характеризуют производство тепла, связанное с диссипативными процессами в кристалле.

Воспользовавшись соотношением (Н.90), перепишем уравнение баланса энергии (Н.33) в форме

$$\rho \dot{\mathcal{U}} = \boldsymbol{\tau}_e \cdot \dot{\mathbf{g}} - \mathbf{q}_e \cdot \dot{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{m}_e \cdot \dot{\boldsymbol{\gamma}} + (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\mathcal{P}}^s) \dot{\xi} + \vartheta \dot{\mathcal{H}}. \quad (\text{Н.93})$$

Теперь можно записать соотношения Коши–Грина в следующей форме:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_e &= \frac{\partial \rho \mathcal{U}}{\partial \mathbf{g}}, & \mathbf{q}_e &= -\frac{\partial \rho \mathcal{U}}{\partial \boldsymbol{\theta}}, & \mathbf{m}_e &= -\frac{\partial \rho \mathcal{U}}{\partial \boldsymbol{\gamma}}, \\ \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\mathcal{P}}^s &= \frac{\partial \rho \mathcal{U}}{\partial \xi}, & \vartheta &= \frac{\partial \rho \mathcal{U}}{\partial \mathcal{H}}. \end{aligned} \quad (\text{Н.94})$$

Примем гипотезу натурального состояния и представим внутреннюю энергию в виде положительно определенной квадратичной формы

$$\begin{aligned} \rho \mathcal{U} &= \rho \mathcal{U}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{g} \cdot \mathbf{C}^{(g)} \cdot \mathbf{g} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{C}^{(\theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{C}^{(\gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + \\ &+ \frac{1}{2} \mathbf{C}^{(\xi)} \xi^2 + \frac{1}{2} \mathcal{C}^{(\mathcal{H})} \mathcal{H}^2 + \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{C}^{(\theta g)} \cdot \mathbf{g} + \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{C}^{(\gamma g)} \cdot \mathbf{g} + \xi \mathbf{C}^{(\xi g)} \cdot \mathbf{g} + \\ &+ \mathcal{H} \mathbf{C}^{(\mathcal{H} g)} \cdot \mathbf{g} + \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{C}^{(\gamma \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \xi \mathbf{C}^{(\xi \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \mathcal{H} \mathbf{C}^{(\mathcal{H} \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \\ &+ \xi \mathbf{C}^{(\xi \gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + \mathcal{H} \mathbf{C}^{(\mathcal{H} \gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + \mathbf{C}^{(\xi \mathcal{H})} \xi \mathcal{H}. \end{aligned} \quad (\text{Н.95})$$

Подставив выражение для внутренней энергии (Н.95) в соотношения Коши–Грина (Н.94), получим определяющие уравнения

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_e &= \mathbf{C}^{(g)} \cdot \mathbf{g} + \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{C}^{(\theta g)} + \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{C}^{(\gamma g)} + \mathbf{C}^{(\xi g)} \xi + \mathcal{C}^{(\mathcal{H} g)} \mathcal{H}, \\ -\mathbf{q}_e &= \mathbf{C}^{(\theta g)} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}^{(\theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{C}^{(\gamma \theta)} + \mathbf{C}^{(\xi \theta)} \xi + \mathcal{C}^{(\mathcal{H} \theta)} \mathcal{H}, \\ -\mathbf{m}_e &= \mathbf{C}^{(\gamma g)} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}^{(\gamma \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \mathbf{C}^{(\gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + \mathbf{C}^{(\xi \gamma)} \xi + \mathcal{C}^{(\mathcal{H} \gamma)} \mathcal{H}, \\ \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\mathcal{P}}^s &= \mathbf{C}^{(\xi g)} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}^{(\xi \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \mathbf{C}^{(\xi \gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + \mathbf{C}^{(\xi)} \xi + \mathcal{C}^{(\xi \mathcal{H})} \mathcal{H}, \\ \vartheta &= \mathcal{C}^{(\mathcal{H} g)} \cdot \mathbf{g} + \mathcal{C}^{(\mathcal{H} \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \mathcal{C}^{(\mathcal{H} \gamma)} \cdot \boldsymbol{\gamma} + \mathcal{C}^{(\xi \mathcal{H})} \xi + \mathcal{C}^{(\mathcal{H})} \mathcal{H}. \end{aligned} \quad (\text{Н.96})$$

В целях замыкания системы (Н.31), (Н.34), (Н.83), (Н.84), (Н.87), (Н.88), (Н.92), (Н.96) необходимо сформулировать определяющие уравнения для диссипативных составляющих силовых и моментных напряжений  $\boldsymbol{\tau}_f$ ,  $\mathbf{q}_f$ ,  $\mathbf{m}_f$ .

Следует отметить, что предложенная микрополярная теория дипольной пьезоэлектрической среды не чувствительна к изменению типа вектора напряженности электрического поля. Это обусловлено тем, что во всех уравнениях вектор напряженности электрического поля  $\boldsymbol{\varepsilon}$  умножается на вектор плотности спонтанной поляризации  $\boldsymbol{\mathcal{P}}^s$ . Поскольку вектор плотности поляризации и вектор напряженности электрического поля всегда должны быть векторами одного типа, изменение типа вектора  $\boldsymbol{\varepsilon}$  влечет за собой изменение типа вектора  $\boldsymbol{\mathcal{P}}^s$ . В результате скалярное произведение  $\boldsymbol{\mathcal{P}}^s$  на  $\boldsymbol{\varepsilon}$  всегда будет полярным скаляром, а векторное произведение  $\boldsymbol{\mathcal{P}}^s$  на  $\boldsymbol{\varepsilon}$  всегда будет аксиальным вектором.

### Н.4.3. Простейшая теория дипольной пьезоэлектрической среды

Пренебрежем инерцией вращения и моментными взаимодействиями, предположив, что  $\mathbf{J} = \mathbf{0}$  и  $\mathbf{m} = \mathbf{0}$ . Тогда уравнение баланса кинетического момента (Н.84) примет вид

$$\mathbf{q} = -\boldsymbol{\mathcal{P}}^s \times \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (\text{Н.97})$$

Подставив (Н.97) в уравнение баланса количества движения (Н.83), получим

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \frac{1}{2} \nabla \times (\boldsymbol{\mathcal{P}}^s \times \boldsymbol{\varepsilon}) + \boldsymbol{\mathcal{P}}^s \cdot \nabla \boldsymbol{\varepsilon} = \rho \ddot{\mathbf{u}}. \quad (\text{Н.98})$$

Пренебрежем диссипативными и температурными эффектами. В этом случае с учетом принятого ранее предположения об отсутствии моментных напряжений и соотношения (Н.97) определяющие уравнения (Н.96) принимают вид

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &= \mathbf{C}^{(g)} \cdot \cdot \mathbf{g} + \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{C}^{(\theta g)} + \mathbf{C}^{(\xi g)} \boldsymbol{\xi}, \\ \boldsymbol{\mathcal{P}}^s \times \boldsymbol{\varepsilon} &= \mathbf{C}^{(\theta g)} \cdot \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}^{(\theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \mathbf{C}^{(\xi \theta)} \boldsymbol{\xi}, \end{aligned} \quad (\text{Н.99})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\mathcal{P}}^s = \mathbf{C}^{(\xi g)} \cdot \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}^{(\xi \theta)} \cdot \boldsymbol{\theta} + \mathbf{C}^{(\xi)} \boldsymbol{\xi},$$

где индекс  $\mathbf{e}$  у тензора  $\boldsymbol{\tau}$  опущен, поскольку диссипативная составляющая отсутствует. За пьезоэффект в определяющих уравнениях (Н.99) отвечают аксиальный тензор третьего ранга  $\mathbf{C}^{(\theta g)}$  и полярный тензор второго ранга  $\mathbf{C}^{(\xi g)}$ . Ранее была определена структура тензоров такого типа для материалов, обладающих определенной симметрией. Воспользуемся этими результатами. Если материал обладает двумя плоскостями зеркальной симметрии (Н.55), то структура тензоров  $\mathbf{C}^{(\theta g)}$  и  $\mathbf{C}^{(\xi g)}$  определяется формулами (Н.57).

Если группа симметрии материала содержит две плоскости зеркальной симметрии (Н.55) и тензор поворота на любой угол вокруг оси  $\mathbf{e}_3$ , то структура тензоров  $\mathbf{C}^{(\theta g)}$  и  $\mathbf{C}^{(\xi g)}$  определяется формулами (Н.66). Если у материала есть два элемента симметрии: поворот вокруг оси  $\mathbf{x}_3$  на угол  $2\pi/3$  и поворот вокруг оси  $\mathbf{x}_1$  на угол  $\pi$ , то структура тензоров  $\mathbf{C}^{(\theta g)}$  и  $\mathbf{C}^{(\xi g)}$  определяется формулами (Н.58), (Н.59).

Уравнение электростатики (Н.87) с учетом соотношения между углами  $\boldsymbol{\varphi}$  и  $\boldsymbol{\theta}$  принимает вид

$$\nabla \cdot \left[ \varepsilon_0 \boldsymbol{\varepsilon} + \xi \mathcal{P}^s + \boldsymbol{\theta} \times \mathcal{P}^s + \frac{1}{2} (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathcal{P}^s \right] = 0. \quad (\text{Н.100})$$

Таким образом, система уравнений (Н.98)–(Н.100) представляет собой формулировку простейшей теории дипольной пьезоэлектрической среды. Основными неизвестными здесь являются вектор перемещений  $\mathbf{u}$ , вектор сдвига  $\boldsymbol{\theta}$  и величина  $\xi$ , характеризующая деформацию диполя.

#### Н.4.4. Сравнение с классической теорией

Для того чтобы сравнить систему уравнений (Н.98)–(Н.100) с классической теорией пьезоэлектричества, следует получить соотношения, связывающие величины  $\boldsymbol{\tau}$  и  $\mathcal{D}$  с величинами  $\mathbf{g}$  и  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Для получения этих соотношений проделаем следующие преобразования. Решим второе и третье уравнения системы (Н.99) относительно величин  $\boldsymbol{\theta}$  и  $\xi$ . Затем подставим найденные выражения в формулу (Н.99) для  $\boldsymbol{\tau}$  и в формулу для  $\mathcal{D}$  — выражение в квадратных скобках в формуле (Н.100). В результате получим

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{C} \cdot \cdot \mathbf{g} - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathcal{M}, \quad \mathcal{D} = \mathcal{M} \cdot \cdot \mathbf{g} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{2} \mathcal{P}^s \times (\nabla \times \mathbf{u}). \quad (\text{Н.101})$$

В данном случае тензоры  $\mathbf{C}$ ,  $\mathcal{M}$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}$  вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} \mathbf{C} = & \mathbf{C}^{(g)} - \frac{\mathbf{C}^{(\xi g)} \otimes \mathbf{C}^{(\xi g)}}{\mathbf{C}^{(\xi)}} + \\ & + \left( \mathbf{C}^{(\theta g)*} - \frac{\mathbf{C}^{(\xi g)} \otimes \mathbf{C}^{(\xi \theta)}}{\mathbf{C}^{(\xi)}} \right) \cdot \boldsymbol{\Lambda} \cdot \left( \mathbf{C}^{(\theta g)} - \frac{\mathbf{C}^{(\xi \theta)} \otimes \mathbf{C}^{(\xi g)}}{\mathbf{C}^{(\xi)}} \right), \end{aligned} \quad (\text{Н.102})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M} = & - \frac{\mathcal{P}^s \otimes \mathbf{C}^{(\xi g)}}{\mathbf{C}^{(\xi)}} + \\ & + \left( \mathcal{P}^s \times \mathbf{E} + \frac{\mathcal{P}^s \otimes \mathbf{C}^{(\xi \theta)}}{\mathbf{C}^{(\xi)}} \right) \cdot \boldsymbol{\Lambda} \cdot \left( \mathbf{C}^{(\theta g)} - \frac{\mathbf{C}^{(\xi \theta)} \otimes \mathbf{C}^{(\xi g)}}{\mathbf{C}^{(\xi)}} \right), \end{aligned} \quad (\text{Н.103})$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\epsilon} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \frac{\mathcal{P}^s \otimes \mathcal{P}^s}{C^{(\xi)}} \left( 1 + \frac{C^{(\xi\theta)} \cdot \boldsymbol{\Lambda} \cdot C^{(\xi\theta)}}{C^{(\xi)}} \right) - \mathcal{P}^s \times \boldsymbol{\Lambda} \times \mathcal{P}^s + \\ + \frac{1}{C^{(\xi)}} \left( \mathcal{P}^s \otimes \mathcal{P}^s \times \boldsymbol{\Lambda} \cdot C^{(\xi\theta)} + \mathcal{P}^s \times \boldsymbol{\Lambda} \cdot C^{(\xi\theta)} \otimes \mathcal{P}^s \right), \end{aligned} \quad (\text{H.104})$$

где тензор  $\boldsymbol{\Lambda}$  вычисляется по формуле

$$\boldsymbol{\Lambda} = \left( C^{(\theta)} - \frac{C^{(\xi\theta)} \otimes C^{(\xi\theta)}}{C^{(\xi)}} \right)^{-1}.$$

Знак “звездочка” применительно к тензору третьего ранга  $C^{(\theta g)}$  означает циклическую перестановку базисных векторов в триаде.

Сравнительный анализ определяющих уравнений (H.101) и соответствующих уравнений классической теории (H.7), (H.8) показал, что определяющие уравнения для  $\boldsymbol{\tau}$  совпадают, а определяющие уравнения для  $\boldsymbol{D}$  отличаются тем, что выражение для  $\boldsymbol{D}$  в мультиполярной теории содержит дополнительное слагаемое, зависящее от ротора вектора перемещений.

Уравнение движения в микрополярной теории (H.98) отличается от классического уравнения (H.1) наличием двух слагаемых, моделирующих воздействие электрического поля. Уравнение электростатики имеет одинаковый вид в обеих теориях.

## Заклучение

Микрополярная теория пьезоэлектричества обладает некоторыми важными преимуществами по сравнению с классической теорией.

Во-первых, в этой теории показан способ, посредством которого электрическое поле влияет на материю.

Во-вторых, в рамках указанной теории есть возможность рассматривать неоднородные среды, задавая поле  $\mathcal{P}^s(\mathbf{r})$ .

Микрополярная теория пьезоэлектричества предназначена для описания процессов, происходящих в полярных пьезоэлектриках, т. е. материалах, у которых вектор спонтанной поляризации  $\mathcal{P}^s$  отличен от нуля. Можно существенно упростить микрополярную теорию, исключив из рассмотрения вращательные степени свободы. Однако даже после этого упрощения рассмотренная теория остается несимметричной, чем она, в частности, отличается от классической.