

PC V: Physikalische Chemie der Festkörper

WS 2009/10

1. Einführung

Kristallsymmetrie und physikalische Eigenschaften, Neumannsches Prinzip

2. Thermodynamik fester Körper

Phänomenologische Thermodynamik (Potentiale, Flüsse, Kräfte, Suszeptibilitäten),

[Thermodynamik des elastischen Festkörpers im elektrischen Feld](#), thermodynamische Behandlung von Phasenumwandlungen, Kritik der Ehrenfestschen Klassifikation

3. Dielektrische Eigenschaften

Polarisierbarkeit, Dipolmoment, induzierte Polarisation (inneres Feld, Clausius-Mosotti-Beziehung, Debye-Gleichung), Dispersion und Absorption (quasi-elastisch gebundenes Elektron, Debye-Relaxation, Orientierungs-, Atom- und elektronische Polarisation, dielektrische Spektroskopie, Kramers-Kronig-Relation), spontane Polarisation (Piezo-, Pyro- und Ferroelektrika, Landau-Theorie ferroelektrischer Phasenumwandlungen)

4. Grenzflächeneigenschaften

Thermodynamik der Grenzflächen, Oberflächenspannung, Kontaktwinkel und Benetzung, 2D-Oberflächenfilme, Adsorption an Oberflächen (Physi- und Chemisorption, Langmuir-, Freundlich- und BET-Isotherme, isostere Adsorptionenthalpie)

*5. Festkörperelektrochemie: Phasengrenzen, Doppelschichten, Elektrokapillarität, Ionenleitung in Festelektrolyten, Impedanzspektroskopie, Protonenleitung, Brennstoffzellen

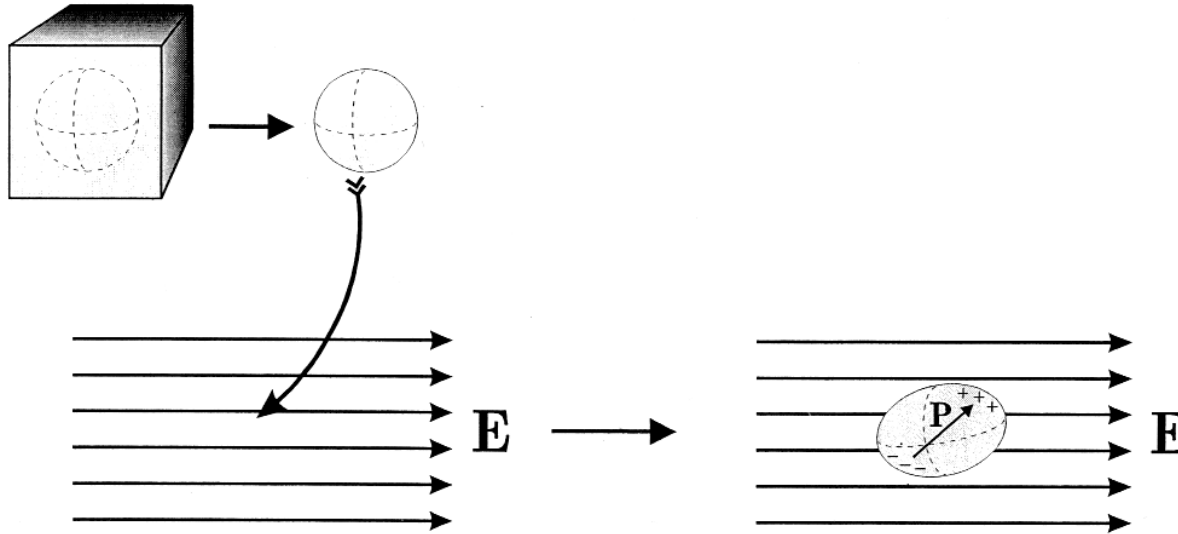
2.1 Thermodynamische Potentiale, Kräfte und Suszeptibilitäten

	$\delta W = \sum \lambda_i dl_i$	
	Arbeitskoeffizient general. Kräfte	Arbeitskoordinate generalisierte Verschiebungen
<u>Arbeitsformen</u>	λ_i	l_i
mechanisch (Druck-Volumen)	-p [Nm ⁻²]	V [m ³]
mechanisch (Elastizität)	$\sigma (=F/A)$ [Nm ⁻²]	$\varepsilon_V = \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$ [m ³]
magnetisch	\vec{B} [V s m ⁻²]	$\vec{M}_V = V * \vec{M}$ [A m ²]
elektrisch	\vec{E} [V s m ⁻²]	$\vec{P}_V = \mathbf{V} \cdot \vec{P}$ [A s m]
chemisch	μ_j [J mol ⁻¹]	n_j [mol]

"thermodynamisch konjugierte Größen"
Produkt hat die Dimension "Energie"

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

Eine kugelförmige Probe eines dielektrischen Festkörpers wird in elektrisches Feld gebracht ($T, \mathbf{E}, \sigma_{ij} = \text{const.}$)



Feldeffekte

(a) elektrische Polarisation des FK \rightarrow elektrische Arbeit $dW = V \cdot E_i dP_i$

mit V : Volumen, E_i : elektr. Feldvektor, P_i : elektr. Polarisationsvektor

(b) elastische Gestaltsänderung des FK \rightarrow mechanische Arbeit $dW = V \cdot \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}$

mit V : Volumen, σ_{ij} : Spannungstensor, ε_{ij} : Dehnungstensor

- isotrope Volumenänderung: "Elektrostriktion" $\sim E^2$

- anisotrope Volumenänderung: "Piezoelektrizität" $\sim E$

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

Eine kugelförmige Probe eines dielektrischen Festkörpers wird in elektrisches Feld gebracht (\mathbf{T} , \mathbf{E} , $\sigma_{ij} = \text{const.}$)

Feldeffekte

(a) elektrische Polarisation des FK \rightarrow elektrische Arbeit $dW = V \cdot E_i dP_i$
mit V : Volumen, E_i : elektr. Feldvektor, P_i : elektr. Polarisationsvektor

(b) elastische Gestaltsänderung des FK \rightarrow mechanische Arbeit $dW = V \cdot \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}$
mit V : Volumen, σ_{ij} : Spannungstensor, ε_{ij} : Dehnungstensor
- isotrope Volumenänderung: "Elektrostriktion" $\sim E^2$
- anisotrope Volumenänderung: "Piezoelektrizität" $\sim E$

(c) Temperatur- bzw. Entropieänderung (adiabatische bzw. isotherme Elektrisierung)
 \rightarrow Wärme $dQ = T dS$

+ Kreuzeffekte: z.B. induzierte Polarisation (\rightarrow Dipolordnung) ändert auch die Entropie: "elektrokalorischer Effekt"

- thermodynamische Beschreibung aller auftretenden Effekte ?
- Anzahl unabhängiger relevanter Materialparameter ?

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

Wähle als unabhängige Zustandsvariablen σ_{ij} , E_i , T (intensiv)

Änderung der extensiven Arbeitskoordinaten ε_{ij} , P_i , und der Entropie S :

$$d\varepsilon_{ij} = \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{kl}} \right)_{E,T} d\sigma_{kl} + \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial E_k} \right)_{\sigma,T} dE_k + \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial T} \right)_{\sigma,E} dT$$

Elastizität
inverser Piezoeffekt
thermische Ausdehnung

$$dP_i = \left(\frac{\partial P_i}{\partial \sigma_{jk}} \right)_{E,T} d\sigma_{jk} + \left(\frac{\partial P_i}{\partial E_j} \right)_{\sigma,T} dE_j + \left(\frac{\partial P_i}{\partial T} \right)_{\sigma,E} dT$$

direkter Piezoeffekt
elektrische Suszeptibilität
Pyroelektrizität

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial \sigma_{ij}} \right)_{E,T} d\sigma_{ij} + \left(\frac{\partial S}{\partial E_i} \right)_{\sigma,T} dE_i + \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\sigma,E} dT$$

piezokalorischer Effekt
elektrokalorischer Effekt
Wärmekapazität

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

Hauptdiagonale: "**direkte Effekte**" thermodynamisch konjugierter Variablen,

Elastizität (σ - ε), elektr. Suszeptibilität (E-P), Wärmekapazität (T-S)

Nebendiagonalen: "**Kreuzeffekte**"

- **elektromechanische Effekte: direkte und inverse Piezoelektrizität**

- **elektrothermische Effekte: Pyroelektrizität, elektrokalorischer Effekt**

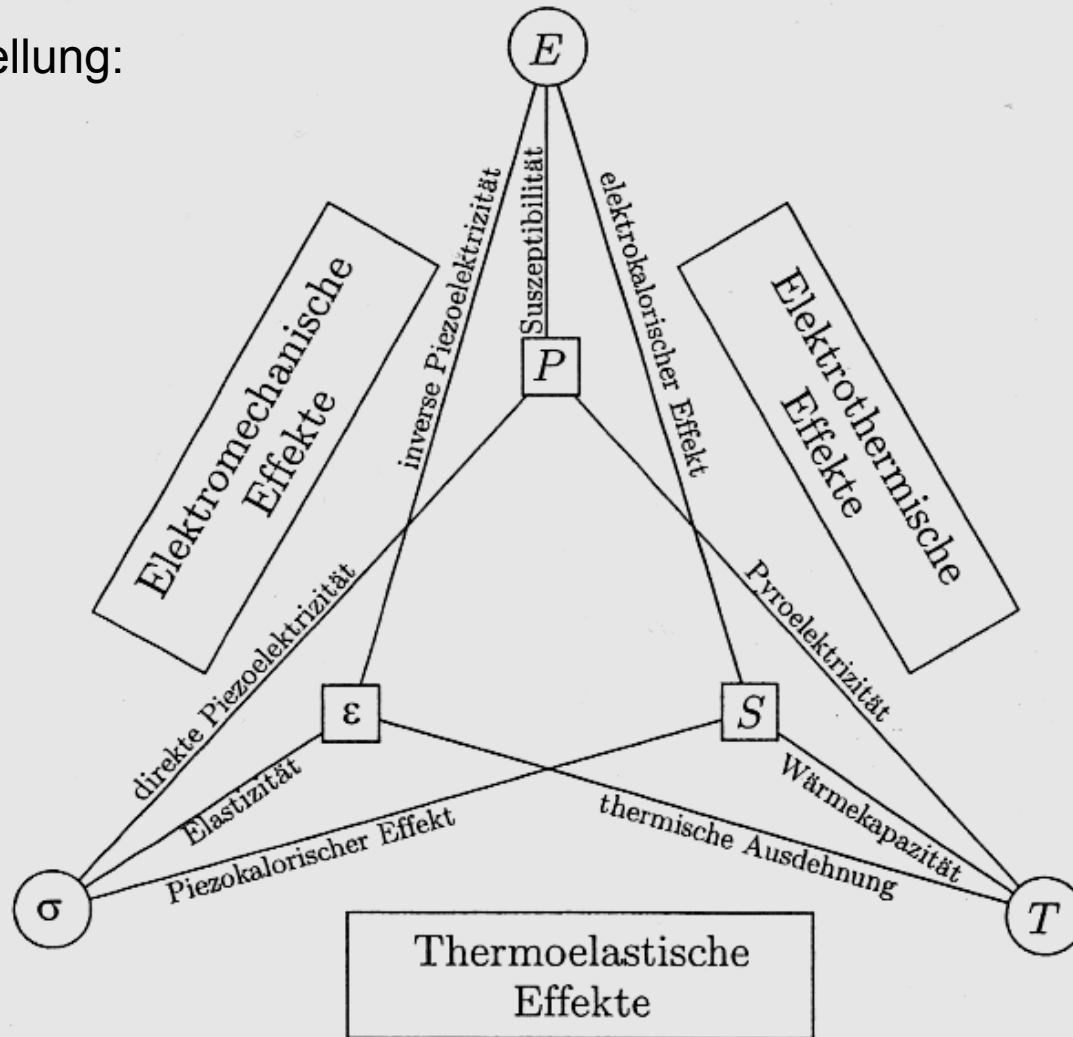
- **thermoelastische Effekte: therm. Ausdehnung, piezokalorischer Effekt**

$$\begin{aligned}
 d\varepsilon_{ij} &= \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{kl}} \right)_{E,T} d\sigma_{kl} + \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial E_k} \right)_{\sigma,T} dE_k + \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial T} \right)_{\sigma,E} dT \\
 &\quad \text{Elastizität} \qquad \qquad \qquad \text{inverser Piezoeffekt} \qquad \qquad \qquad \text{thermische Ausdehnung} \\
 dP_i &= \left(\frac{\partial P_i}{\partial \sigma_{jk}} \right)_{E,T} d\sigma_{jk} + \left(\frac{\partial P_i}{\partial E_j} \right)_{\sigma,T} dE_j + \left(\frac{\partial P_i}{\partial T} \right)_{\sigma,E} dT \\
 &\quad \text{direkter Piezoeffekt} \qquad \qquad \qquad \text{elektrische Suszeptibilität} \qquad \qquad \qquad \text{Pyroelektrizität} \\
 dS &= \left(\frac{\partial S}{\partial \sigma_{ij}} \right)_{E,T} d\sigma_{ij} + \left(\frac{\partial S}{\partial E_i} \right)_{\sigma,T} dE_i + \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\sigma,E} dT \\
 &\quad \text{piezokalorischer Effekt} \qquad \qquad \qquad \text{elektrokalorischer Effekt} \qquad \qquad \qquad \text{Wärmekapazität}
 \end{aligned}$$

The diagram illustrates the thermodynamic relationships between strain (ε_{ij}), polarization (P_i), and entropy (S). The equations are arranged in three rows, with terms representing different physical effects. Color-coded lines connect the terms across the equations to highlight cross-effects: a green line connects the inverse piezoelectric term in the first equation to the direct piezoelectric term in the second; a blue line connects the direct piezoelectric term in the second equation to the piezoelectric term in the third; a red line connects the electrocaloric term in the third equation to the pyroelectric term in the second; and a dotted line connects the thermal expansion term in the first equation to the piezoelectric term in the second. Labels below each term identify the physical effect: Elasticity, inverse piezoelectric effect, thermal expansion, direct piezoelectric effect, electric susceptibility, pyroelectricity, piezocaloric effect, electrocaloric effect, and heat capacity.

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

Alternative Darstellung:



vgl.: J. F. Nye: "Physical Properties of Crystals", Oxford (Clarendon) 1985.

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

Formulierung über das thermodynamische Potential Φ

1. Hauptsatz: $dU = T dS + \sum \lambda_i dl_i$ ← elastische und elektrische Arbeit

$$dU = T dS + \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ij} d\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} + \mathbf{V} \cdot \mathbf{E}_i dP_i \quad | :V$$

einfachere Alternative - **Volumendichte** der Inneren Energie: $\hat{U} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{U}{V}$

→ **Volumendichte** der Entropie:

$$\hat{S} = \frac{S}{V}$$

mit $G = H - TS = U - \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ij} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} - \mathbf{V} \cdot \mathbf{E}_i P_i - TS$

→ **Volumendichte** der Freien Enthalpie:

$$\hat{G} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{G}{V}$$

$$\hat{G} = \hat{U} - \boldsymbol{\sigma}_{ij} \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} - \mathbf{E}_i P_i - T\hat{S}$$

Legendre Transformation mit $d\hat{U} = Td\hat{S} + \boldsymbol{\sigma}_{ij} d\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} + \mathbf{E}_i dP_i$

→ $d\hat{G}(T, \boldsymbol{\sigma}_{ij}, \mathbf{E}_i) = -\hat{S}dT - \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} d\boldsymbol{\sigma}_{ij} - P_i dE_i$

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

$$\hat{G} = \hat{U} - \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} - E_i P_i - T\hat{S}$$

$$d\hat{G}(T, \sigma_{ij}, E_i) = d\hat{U} - \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij} d\sigma_{ij} - E_i dP_i - P_i dE_i - Td\hat{S} - \hat{S}dT$$

Legendre Transformation mit $d\hat{U} = Td\hat{S} + \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} + E_i dP_i$

$$d\hat{G}(T, \sigma_{ij}, E_i) = \cancel{d\hat{U}} - \cancel{\sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}} - \varepsilon_{ij} d\sigma_{ij} - \cancel{E_i dP_i} - P_i dE_i - \cancel{Td\hat{S}} - \hat{S}dT$$

$$\rightarrow d\hat{G}(T, \sigma_{ij}, E_i) = -\hat{S}dT - \varepsilon_{ij} d\sigma_{ij} - P_i dE_i$$

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

$$d\hat{G}(T, \sigma_{ij}, E_i) = -\hat{S}dT - \varepsilon_{ij}d\sigma_{ij} - P_i dE_i$$

- Partielle Ableitungen des Potentials: $\hat{G}(T, \sigma_{ij}, E_i)$

$$\hat{S} = - \left(\frac{\partial \hat{G}}{\partial T} \right)_{\sigma, E}$$

Entropie

$$\varepsilon_{ij} = - \left(\frac{\partial \hat{G}}{\partial \sigma_{ij}} \right)_{T, E}$$

Dehnungstensor

$$P_i = - \left(\frac{\partial \hat{G}}{\partial E_i} \right)_{T, \sigma}$$

Polarisationsvektor

1. Ableitung (Verschiebungen)

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

$$d\hat{G}(T, \sigma_{ij}, E_i) = -\hat{S}dT - \varepsilon_{ij}d\sigma_{ij} - P_i dE_i$$

- Partielle Ableitungen des Potentials: $\hat{G}(T, \sigma_{ij}, E_i)$

$$\hat{S} = - \left(\frac{\partial \hat{G}}{\partial T} \right)_{\sigma, E} \quad \hat{c}_p = T \left(\frac{\partial \hat{S}}{\partial T} \right)_{\sigma, E} = -T \left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial T \partial T} \right)_{\sigma, E}$$

Entropie Wärmekapazität

$$\varepsilon_{ij} = - \left(\frac{\partial \hat{G}}{\partial \sigma_{ij}} \right)_{T, E} \quad s_{ijkl} = \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \sigma_{kl}} \right)_{T, E} = - \left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial \sigma_{kl} \partial \sigma_{ij}} \right)_{T, E}$$

Dehnungstensor elast. Konstanten

$$P_i = - \left(\frac{\partial \hat{G}}{\partial E_i} \right)_{T, \sigma} \quad \chi_{ij} = \left(\frac{\partial P_i}{\partial E_j} \right)_{T, \sigma} = - \left(\frac{\partial \hat{G}}{\partial E_j \partial E_i} \right)_{T, \sigma}$$

Polarisationsvektor elektr. Suszeptibilitäten

1. Ableitung (Verschiebungen)

2. Ableitung (Suszeptibilitäten)

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

$$d\hat{G}(T, \sigma_{ij}, E_i) = -\hat{S}dT - \varepsilon_{ij}d\sigma_{ij} - P_idE_i$$

• Maxwell-Beziehungen:

$$\left(\frac{\partial P_i}{\partial \sigma_{jk}}\right)_{E,T} = -\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial \sigma_{jk} \partial E_i} = -\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial E_k \partial \sigma_{ij}} = \left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial E_k}\right)_{\sigma,T} = d_{ijk} \quad (\text{Piezomoduln})$$

direkter Piezoeffekt
←
→
inverser Piezoeffekt

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial T}\right)_{\sigma,E} = -\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial T \partial \sigma_{ij}} = -\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial \sigma_{ij} \partial T} = \left(\frac{\partial S}{\partial \sigma_{ij}}\right)_{E,T} = \alpha_{ij} \quad (\text{Ausdehnungskoeffizienten})$$

thermische Ausdehnung
piezokalorischer Effekt

$$\left(\frac{\partial P_i}{\partial T}\right)_{\sigma,E} = -\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial T \partial E_i} = -\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial E_i \partial T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E_i}\right)_{\sigma,T} = \gamma_i \quad (\text{Pyroelektrische Koeffizienten})$$

Pyroelektrizität
elektrok calorischer Effekt

→ 2 elektromechanische Effekte:
 2 elektrothermische Effekte :
 2 thermoelastische Effekte :

d_{ijk}
 γ_i
 α_{ij}

jeweils gleiche Materialsuszeptibilitäten

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

$$d\hat{G}(T, \sigma_{ii}, E_i) = -\hat{S}dT - \varepsilon_{ii}d\sigma_{ii} - P_idE_i$$

• Zustandsgleichungen:

mechanisch:	$d\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} d\sigma_{kl} + d_{ijk} dE_k + \alpha_{ij} dT$		
	Elastizität	inverser Piezoeffekt	thermische Ausdehnung
elektrisch:	$dP_i = d_{ijk} d\sigma_{jk} + \chi_{ij} dE_j + \gamma_i dT$		
	direkter Piezoeffekt	elektrische Suszeptibilität	Pyroelektrizität
kalorisch:	$d\hat{S} = \alpha_{ij} d\sigma_{ij} + \gamma_i dE_i + \frac{\hat{c}_p}{T} dT$		
	piezokalorischer Effekt	elektrokalorischer Effekt	Wärmekapazität

Koeffizientenmatrix ist symmetrisch.

Anzahl unabhängiger
Materialparameter ?

$$\begin{pmatrix} d\varepsilon \\ dP \\ dS \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s & d & \alpha \\ d & \chi & \gamma \\ \alpha & \gamma & \frac{\hat{c}_p}{T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\sigma \\ dE \\ dT \end{pmatrix}$$

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

$$-T \left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial T^2} \right)_{\sigma, E} = \hat{c}_p \quad \text{Wärmekapazität} \quad 1$$

$$- \left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial \sigma_{kl} \partial \sigma_{ij}} \right)_{T, E} = s_{ijkl} \quad \begin{array}{l} \text{elastische} \\ \text{Konstanten} \end{array} \quad 21 \quad \text{Tensor 4. Stufe}$$

Tensor 4. Stufe \rightarrow 6 x 6 Matrix
symmetrisch

\rightarrow 21 unabhängige Variablen

$$\begin{array}{c}
 kl \rightarrow \\
 \downarrow \\
 \begin{pmatrix}
 \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\
 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \\
 & & \bullet & \bullet & \bullet & \\
 & & & \bullet & \bullet & \\
 & & & & \bullet & \bullet \\
 & & & & & \bullet
 \end{pmatrix}
 \end{array}$$

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

$-T \left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial T^2} \right)_{\sigma, E}$	$= \hat{c}_p$	Wärmekapazität	1	
$- \left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial \sigma_{kl} \partial \sigma_{ij}} \right)_{T, E}$	$= s_{ijkl}$	elastische Konstanten	21	<i>Tensor 4. Stufe</i>
$- \left(\frac{\partial \hat{G}}{\partial E_j \partial E_i} \right)_{T, \sigma}$	$= \chi_{ij}$	elektrische Suszeptibilitäten	6	<i>Tensor 2. Stufe</i>
$\left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial T \partial \sigma_{ij}} \right)_E = \left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial \sigma_{ij} \partial T} \right)_E$	$= \alpha_{ij}$	Ausdehnungs- koeffizienten	6	<i>Tensor 2. Stufe</i>
$\left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial T \partial E_i} \right)_\sigma = \left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial E_i \partial T} \right)_\sigma$	$= \gamma_i$	Pyroelektrische Koeffizienten	3	<i>Tensor 1. Stufe</i>
$\left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial \sigma_{jk} \partial E_i} \right)_T = \left(\frac{\partial^2 \hat{G}}{\partial E_k \partial \sigma_{ij}} \right)_T$	$= d_{ijk}$	Piezomoduln	18	<i>Tensor 3. Stufe</i>

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

Tensoren

1. Stufe \rightarrow 1 x 3 Matrix \rightarrow Vektor; 3 unabhängige Variablen x,y,z

2. Stufe \rightarrow 3 x 3 Matrix \rightarrow $\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet \\ & \bullet & \bullet \\ & & \bullet \end{pmatrix}$ 6 unabhängige Variablen xx,xy,xz
 symmetrisch yy,yz
 zz

$kl \rightarrow$

3. Stufe \rightarrow 3 x 6 Matrix \rightarrow $i \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \downarrow & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \rightarrow$ 18 unabhängige Variablen

$kl \rightarrow$

4. Stufe \rightarrow 6 x 6 Matrix \rightarrow $ij \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & \bullet & \bullet & \bullet \\ & & & & \bullet & \bullet \\ & & & & & \bullet \end{pmatrix} \rightarrow$ 21 unabhängige Variablen
 symmetrisch

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

- Symmetriereduktion

Beispiel: Gas oder Flüssigkeit (isotrop)

<i>Suszeptibilität</i>	<i>Reduktion</i>	<i>unabhängige Komp. (max.)</i>
Wärmekapazität	$\hat{c}_\sigma \rightarrow \hat{c}_p$	1
elastische Konstanten	$s_{ijkl} \rightarrow \kappa$ (Kompressibilität)	1
elektrische Suszeptibilitäten	$\chi_{ij} \rightarrow \chi$	1
Ausdehnungskoeffizienten	$\alpha_{ij} \rightarrow \alpha$	1
Pyroelektrische Koeffizienten	$\gamma_i \rightarrow 0$ (Symmetrieverbot)	0
Piezomoduln	$d_{ijk} \rightarrow 0$ (Symmetrieverbot)	0

Anzahl unabhängiger Materialgrößen:

4

2.2 Thermodynamik des polarisierten elastischen Festkörpers

Beispiel: Punktgruppen

triklin, C_1 (1)	55	} unabhängige Materialgrößen (Suszeptibilitäten)
monoklin, C_{2v} ($mm2$)	↓ 22	
Flüssigkeit, Gas (<i>isotrop</i>)	↓ 4	

Guggenheim-Quadrat (Merkschema für Maxwell-Gleichungen)

S	U	V
-H		F
p	G	T

Man findet die Relation indem man aus den Ecken einer (horizontalen oder vertikalen) Seite des Schemas zwei Variablen abliest, damit eine Seite der Maxwellgleichung formuliert und die andere Seite der Gleichung aus der gegenüberliegenden Seite in gleicher Weise entnimmt.

Zum Beispiel entnimmt man S und p, woraus der Ausdruck dS/dp folgt. Gegenüber liegen dann V und T, was zu dem Ausdruck dV/dT führt. Wenn man auf einer Seite des Gleichheitszeichens S und p stehen hat, ist eine Seite der Relation negativ (in o.g. Beispiel $-(dS/dp)=(dV/dT)$). Die konstant gehaltene Variable findet sich stets im Nenner der anderen Seite der Relation wieder.

Table 1. Tensors representing physical properties

Property or effect	Tensor notation	Tensor rank	Maximum no. of independent components	Defining equation	Physical quantities in the defining equation	
Density	ρ	0	1	$\Delta m = \rho \Delta V$	Δm mass	ΔV volume
Specific heat	c	0	1	$\Delta S = \frac{c}{T} \Delta T$	ΔS entropy	T temperature
Pyroelectricity	$[p_i]$	1	3	$\Delta P_i = p_i \cdot \Delta T$	$[P_i]$ dielectric polarization	T temperature
Electrocaloric effect	$[p_i]$	1	3	$\Delta S = p_i \Delta E_i$	ΔS entropy	$[E_i]$ electric field
Dielectric permittivity	$[\epsilon_{ij}]$	2	6	$D_i = \epsilon_{ij} E_j$	$[D_i]$ electric displacement	$[E_j]$ electric field
Magnetic permeability	$[\mu_{ij}]$	2	6	$B_i = \mu_{ij} H_j$	$[B_i]$ magnetic induction	$[H_j]$ magnetic field
Electrical conductivity	$[\sigma_{ik}]$	2	6	$j_i = \sigma_{ik} E_k$	$[j_i]$ current density	$[E_k]$ electric field
Electrical resistivity	$[\rho_{ik}]$	2	6	$E_i = \rho_{ik} \cdot j_k$	$[E_i]$ electric field	$[j_k]$ current density
Thermal conductivity	$[k_{ij}]$	2	6	$h_i = -k_{ij}(\partial T/\partial x_j)$	$[h_i]$ heat flux	$[\partial T/\partial x_j]$ temperature gradient
Thermal expansion	$[\alpha_{ij}]$	2	6	$\epsilon_{ij} = \alpha_{ij} \Delta T$	$[\epsilon_{ij}]$ strain	T temperature
Seebeck-effect	$[\beta_{ik}]$	2	9	$E_i = -\beta_{ik}(\partial T/\partial x_k)$	$[E_i]$ electric field	$[\partial T/\partial x_k]$ temperature gradient
Peltier-effect	$[\pi_{ik}]$	2	9	$h_i = \pi_{ik} j_k$	$[h_i]$ heat flux	$[j_k]$ current density
Hall-effect	$[\rho_{ikt}]$	3	9	$E_i = \rho_{ikt} \cdot j_k \cdot H_t$	$[E_i]$ electric field	$[j_k]$ current density $[H_t]$ magn. field
Direct piezo-electric effect	$[d_{ijk}]$	3	18	$P_i = d_{ijk} \cdot \sigma_{jk}$	$[P_i]$ dielectric polarization	$[\sigma_{jk}]$ stress

Converse piezo-electric effect	$[d_{ijk}]$	3	18	$\epsilon_{jk} = d_{ijk}E_i$	$[\epsilon_{jk}]$ strain	$[E_i]$ electric field
Piezomagnetic effect	$[q_{lij}]$	3	18	$M_i = q_{lij}\sigma_{ij}$	$[M_i]$ magnetic polarization	$[\sigma_{ij}]$ stress
Electro-optical effect	$[r_{ijk}]$	3	18	$\Delta a_{ij} = r_{ijk}E_k$	$[a_{ij}]$ dielectric impermeability	$[E_k]$ electric field
Second Harmonic Generation	$[d_{ijk}]$	3	18	$P_i^{2\omega} = d_{ijk}E_jE_k$	$[P_i^{2\omega}]$ dielectric polarization at frequency 2ω	$[E_j], [E_k]$ electric field
Second-order elastic stiffnesses	$[c_{ijkl}]$	4	21	$\sigma_{ij} = c_{ijkl}\epsilon_{kl}$	$[\sigma_{ij}]$ stress	$[\epsilon_{kl}]$ strain
Second-order elastic compliances	$[s_{ijkl}]$	4	21	$\epsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}$	$[\epsilon_{ij}]$ strain	$[\sigma_{kl}]$ stress
Piezooptic effect	$[\pi_{ijkl}]$	4	36	$\Delta a_{ij} = \pi_{ijkl}\sigma_{kl}$	$[a_{ij}]$ dielectric impermeability	$[\sigma_{kl}]$ stress
Quadratic electrooptic effect	$[R_{ijkl}]$	4	36	$\Delta a_{ij} = R_{ijkl}E_kE_l$	$[a_{ij}]$ dielectric impermeability	$[E_k], [E_l]$ electric field
Electrostriction	$[\gamma_{ijk}]$	4	36	$\epsilon_{jk} = \mu_{ijk}E_iE_l$	$[\epsilon_{jk}]$ strain	$[E_i], [E_l]$, electric field
Third-order elastic stiffnesses	$[c_{ijklmn}]$	6	56	$\Phi = \frac{1}{2}c_{ijkl} \cdot \eta_{ij} \cdot \eta_{kl} + \frac{1}{6}c_{ijklmn} \cdot \eta_{ij} \cdot \eta_{kl} \cdot \eta_{mn}$	Φ , energy of deformation, $[c_{ijkl}]$ second-order stiffnesses	$[\eta_{ij}], [\eta_{ij}], [\eta_{mn}]$ the Lagrange finite strain components

An Introduction to Crystal Physics

aus:

by
Ervin Hartmann