

逆压电效应与电致伸缩效应

王裕奉 高汝伟

(山东大学物理系)

可能是由于顾名思义的缘故,人们^[1-4]常把电致伸缩效应称之为逆压电效应,认为逆压电效应就是电致伸缩效应。其实,逆压电效应与电致伸缩效应是截然不同的两种概念。

1880年,居里兄弟(Pierre and Jacques Curie)发现了压电效应,即某些不具有中心对称性结构的晶体,沿某些方向受压时,其表面产生束缚电荷,电荷量正比于所受的压力。历史上称该效应为正压电效应。1881年,居里兄弟又证实了Lippmann关于存在逆压电效应的预言,即具有正压电效应的晶体在外电场作用下会发生形变,形变与外场成正比,外场极性反转,形变符号也随之改变。人们称该效应为逆压电效应。事实上,两种效应是压电晶体的同一种物理现象的可逆性的表现,它们遵循着同一个压电方程。选用电位移 D 和应力 T 为自变量,压电方程^[5]为(CGS制)

$$S_{ij} = S_{ijkl}^p T_{kl} + q_{ijn} \delta_n, \quad (1)$$

$$E_m = -q_{mkl} T_{kl} + 4\pi\beta_{mn}^T \delta_n, \quad (2)$$

其中 S_{ij} 是应变分量, T_{kl} 是应力分量, $\delta_n = D_n/4\pi$, D_n 是电位移分量, E_m 是电场强度分量, S_{ijkl}^p 是电位移为零(或常数)时的弹性顺度常数, q_{ijn} 是压电常数, β_{mn}^T 是应力为零(或常数)时的介质隔离率。

(2)式的右端第一项是外力引起的电场部分,是正压电效应的体现。(1)式右端的第二项是电场引起的应变部分,是逆压电效应的体现。由于压电常数是一常量,所以正压电效应中应力与电场,逆压电效应中电场(电位移)与应变都是线性关系。

在外场作用下,电介质也存在因感生极化而引起的形变。该效应引起的形变与电场强度的平方成正比。曾有人^[5]称此效应为二次方压

电效应,后来人们^[6,7]称之为电致伸缩效应。

凡是电介质,不论它是晶体还是非晶体,也不论它是压电体还是非压电体,都具有电致伸缩效应。对于压电体,若考虑电致伸缩效应,(1),(2)两式变为

$$S_{ij} = S_{ijkl}^p T_{kl} + q_{ijn} \delta_n + Q_{ijn0} \delta_n \delta_0, \quad (3)$$

$$E_m = -q_{mkl} T_{kl} + 4\pi\beta_{mn}^T \delta_n - 2T_{kl} Q_{klm0} \delta_0, \quad (4)$$

其中 Q_{ijn0} 为电致伸缩常数。由(3)式右端的第三项可以看出,由于电致伸缩效应产生的应变与电位移的平方成正比,所以电场反向后,电致伸缩效应产生的应变并不变号。

不过,对于一般电介质,在一般情况下,电致伸缩效应是极其微弱的。仅当电场强度高达20000V/cm时,才能与逆压电效应相比较。也就是说,在通常条件下,压电体在外场下的应变主要是逆压电效应产生的。因此,文献[4]中所列举的电致伸缩效应的应用实质上都是逆压电效应的例子。

但是,对于某些高介电常数的铁电晶体,当它们的温度刚刚高出居里温度时,电致伸缩效应引起的应变会有足够的量值。由于此时铁电体的压电性消失,所以(3),(4)两式变为

$$S_{ij} = S_{ijkl}^p T_{kl} + Q_{ijn0} \delta_n \delta_0, \quad (5)$$

$$E_m = 4\pi\beta_{mn}^T \delta_n - 2T_{kl} Q_{klm0} \delta_0. \quad (6)$$

由此可见,压电性的消失并没有使电致伸缩效应消失。这说明两种效应是独立存在的。

由以上讨论可知,逆压电效应与电致伸缩效应有着根本的差别;对它们之间容易混淆之处,有必要加以澄清。

[1] C. Э. 福里斯等著,梁宝洪译,普通物理学(第二卷第一分册),人民教育出版社,(1979),105-107.

[2] 侯树仪,普通物理学(第二册),人民教育出版社,(1983),

- 245—247.
- [3] 曹萱龄等, 物理学(中册), 人民教育出版社, (1980), 98—99.
- [4] 赵凯华等, 电磁学(上册), 人民教育出版社, (1978), 155—156.

- [5] H. Mueller, *Phys. Rev.*, **53**(1940), 805.
- [6] W. P. Mason, *Piezoelectric Crystals and Their Application to Ultrasonics*, Van Nostrand, New York, (1950), 449, 289—290.
- [7] W. P. Mason, *Phys. Rev.*, **73**(1948), 1398.

小球状蛋白质的低频振动模式

蒋 最 敏

(中国科技大学基础物理中心)

蛋白质分子中原子振动的研究(包括理论计算和实验测量),对进一步弄清蛋白质功能的机制具有重要的意义。蛋白质的特征结构及其动力学性质是其执行生物功能所必须的。在一定温度下,蛋白质分子中的原子在其平衡位置发生振动。因此,研究蛋白质分子的空间结构及其活动性(尤其是蛋白质分子活性部分的活动性),对进一步了解蛋白质分子的结构、功能与动力学过程之间的联系具有重要的意义。大家知道,对于分子晶体,由于原子之间的键合情况和相互作用情况的不同,相应的振动光谱可分为内振动部分和外振动部分。内振动频率与相应的自由分子振动频率较接近,故振动频率较高,相应的动力学过程较快;而外振动却只具有较低的振动频率。因此,内振动部分和外振动部分分别形成两个不同的谱带,喇曼光谱能够很好地区分这两个谱带。和分子晶体相类似,蛋白质分子也具有不同的振动谱带,对应于不同类型的相互作用。例如,蛋白质分子的键长和键角的变化将引起体系较大能量的变化,它们具有较大的力常数,并且对应的振动频率较高。研究低频振动模式时,可以将键角和键长固定不变,使问题简单化。由于酶的催化作用主要涉及到较慢的动力学过程,因而人们对其低频振动模式的研究更感兴趣。本文主要介绍一种计算蛋白质分子低频振动模的方法,下面先简单地介绍一下蛋白质的空间结构。

蛋白质是由氨基酸通过肽键连接起来的生物大分子。蛋白质分子的构象是指蛋白质分子中所有原子在三维空间中的排布。蛋白质的分

子结构可以分为一级、二级、三级和四级结构^[1]。蛋白质分子的一级结构是指蛋白质分子中氨基酸的排列次序。蛋白质的功能不仅与氨基酸序列有关,而且与它们的空间结构有关。如果我们只了解蛋白质中氨基酸的次序,而不了解它们的空间结构,那末就不可能全面地阐明蛋白质结构与功能的关系。例如,胰凝乳蛋白酶中的三个活性氨基酸残基,虽然在肽链的氨基酸顺序上相距很远,但由于肽链的盘旋和折叠,使它们紧密接近,形成了一个凹形的活性部位。

对蛋白质分子的动力学过程的了解能进一步加深对蛋白质功能的认识。关于蛋白质分子振动模的计算已有许多报道^[2-4]。这里介绍牛胰蛋白酶抑制剂(bovine pancreatic trypsin inhibitor, 简称为BPTI)本征模的计算结果。图1为BPTI空间结构和它的两个本征模的原子位移矢量的立体图。用一挡板(如纸片等)隔开左右两部分。使左眼只看到左边部分,右眼只看到右边部分,然后耐心地反复调节眼睛焦距,使得左边部分和右边部分移到一块,这时就能看到立体图形。图1(a)为BPTI空间结构的立体图,其中粗线代表主链,细线代表侧链, C²原子由数字标出。图1(b)为所计算的第70个本征模的振动位移矢量,本征模的频率为 118.8 cm⁻¹。图1(c)为计算所得的第240个本征模的位移矢量图,本征模的频率为 6.9 cm⁻¹,图中的两本征模的位移矢量均已放大,以便看得清楚。

解决蛋白质分子的振动计算问题,首先要