

УДК 537.61:537.226.4

И.Р. КЫЗЫРГУЛОВ*, А.Т. ХУСАИНОВ**, М.Х. ХАППАСОВ**

КАЛИБРОВОЧНАЯ ТЕОРИЯ СЕГНЕТОУПРУГОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КРИСТАЛЛАХ С МНОГОАТОМНОЙ РЕШЕТКОЙ

Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций в кристаллах с многоатомной решеткой обобщена на случай сегнетоупругого взаимодействия. В качестве модели реального кристалла в этой работе используется безграничная изотропная сплошная среда, содержащая дислокации, дисклинации на основе калибровочной группы $SO(3N) \lambda T(3N)$, где N – число атомов в элементарной ячейке, λ – знак полупрямого произведения.

Ключевые слова: тензор магнитоэлектрики, тензор анизотропии, тетрагональный кристалл, континуум, многоатомная решетка, условие интегрируемости, калибровочная группа, сегнетоупругое взаимодействие.

В настоящее время для описания упругих и магнитоупругих явлений используется разложение свободной энергии системы по так называемым инвариантам – комбинациям динамических переменных и их производных, не меняющихся под действием операций симметрии кристалла [1]. Этот метод хорошо работает для идеальных кристаллов и для кристаллов с одиночными дислокациями и дисклинациями. Попытки его использования при учете полей непрерывно распределенных дислокаций и дисклинаций успеха не имели.

В данной работе для решения таких задач используются методы калибровочных полей. Эти методы были успешно применены для описания упругих [2], магнитоупругих [3] и сегнетоупругих [4] сред с непрерывно распределенными дислокациями и дисклинациями. Ниже показано, каким образом удастся включить сегнетоэлектрическую подсистему сегнетоупругого кристалла с многоатомной решеткой в схему расчета, предложенную в [2–4]. Многоатомная решетка образуется из N различных взаимодействующих подконтинуумов, а именно из N вставленных подрешеток. В настоящей работе мы используем модель Борна: моделируем кристалл со сложной решеткой, содержащей N атомов в элементарной ячейке, совокупностью N вставленных друг в друга взаимопроницающих подконтинуумов. Можно записать уравнения отдельно для каждого подконтинуума, тогда мы получим N уравнений. Вместо этого можно перейти к $3N$ -мерным индексам и объединить все эти уравнения в одно. Вводится понятие $3N$ -мерного вектора смещения частиц среды, вектора поляризации и магнитного момента: первые три компоненты этого вектора характеризуют частицу первого подконтинуума, следующие три – второго и т.д. Введение таких индексов было обосновано в работе [5]. Так же, как и в [5], данная модель рассматривается на основе калибровочной группы $SO(3N) \lambda T(3N)$, где λ – знак полупрямого произведения.

Рассмотрим электроупругую среду с учетом смешанных взаимодействий. Запишем лагранжиан среды, инвариантный относительно неоднородных пространственных вращений и трансляций [3, 4]. Для этого необходимо ввести ковариантные производные для эйлеровых координат x , вектора поляризации θ единицы массы. Ковариантная производная для x получена в [2] и имеет вид

$$D_j x^i = \frac{\partial x^i}{\partial a^j} + \gamma_{\alpha k}^i V_j^\alpha x^k + \varphi_j^i; \quad j = 1, 2, 3, \quad i, k = 1, \dots, 3N, \quad (1)$$

где $\alpha = 1, \dots, \frac{3N(3N-1)}{2}$ и γ_α – генераторы группы вращений $SO(3N)$; V_j^α и φ_j^i – компенсирующие поля, возникающие при неоднородных преобразованиях группы $SO(3N)$ и трансляций $T(3N)$ соответственно. При этом под действием элементов группы G , описывающих всевозможные вращения и трансляции среды, ковариантная производная (1) испытывает следующее преобразование:

$$D_j x' = A(a) D_j x. \quad (2)$$

Аналогично в сегнетоэлектрической подсистеме ковариантная производная для θ запишется в виде [4]

$$\nabla_k \theta^i = \frac{\partial}{\partial a^k} \theta^i + \gamma_{\alpha j}^i X_k^\alpha \theta^j, \quad (3)$$

где $i=1, \dots, 3N$, $\alpha=1, \dots, \frac{3N(3N-1)}{2}$, $k=0, 1, 2, 3$; X^α – компенсирующие поля, возникающие при неоднородных поворотах θ . Закон преобразования θ при неоднородных преобразованиях группы вращений такой:

$$\nabla_k \theta' = A(a) \nabla_k \theta. \quad (4)$$

Будем считать, что неоднородные трансляции не изменяют векторы θ ни по величине, ни по направлению. Поэтому в (3) нет компенсирующего поля, связанного с зависящим от координат перемещением вектора θ . Неизменность θ по величине следует из того, что деформации, вызванные неоднородными трансляциями среды, не меняют массу. Отсутствие же переориентации θ связано с тем, что в этом случае элементы среды, которыми определяется направление θ , не испытывают вращений. Ясно, что это обоснование справедливо лишь в том случае, если энергия рассматриваемых процессов не превосходит энергию внутриатомных взаимодействий, определяющих величину θ .

Потенциальная энергия U сегнетоэлектрика из условия калибровочной инвариантности должна состоять из комбинаций, инвариантных относительно группы G . Такими инвариантами являются следующие:

$$\eta_{ij} = \frac{1}{2} (D_i x^k \delta_{kl} D_j x^l - \delta_{ij}), \quad \theta_i^* = \theta^k \delta_{kl} D_i x^l, \quad (5)$$

$$S_{ij} = \nabla_i \theta^k \delta_{kl} \nabla_j \theta^l.$$

Используя (5), можно записать калибровочно-инвариантный лагранжиан сегнетоэлектрика в виде

$$L = T_y + T_p - [\rho_0 U(\eta_{ij}, \theta_i^*, S_{ij}) + L_V + L_\Phi + L_X], \quad (6)$$

где ρ_0 – плотность среды; T_y – кинетическая энергия упругой подсистемы; T_p – кинетическая энергия сегнетоэлектрической подсистемы; L_V , L_Φ , L_X – лагранжианы калибровочных полей V^α , Φ_i , X^α соответственно. В (6) T_y , L_V имеют вид [2]

$$T_y = \frac{1}{2} \rho_{ij} D_4^i D_4^j, \quad D_4^i = \frac{\partial}{\partial t} x^i + \gamma_{\alpha j}^i V_4^\alpha x^j + \Phi_4^i,$$

$$L_\Phi = \frac{s_1}{2} \varsigma_{ij} D_{cb}^i r^{cd} r^{bl} D_{dl}^j, \quad L_V = \frac{s_2}{2} c_{\alpha\beta} \Phi_{bc}^\alpha g^{bd} g^{cl} \Phi_{dl}^\beta,$$

$$c_{\alpha\beta} = c_{\alpha\gamma}^\delta c_{\beta\delta}^\gamma,$$

$$D_{bc}^i = \partial_b \Phi_c - \partial_c \Phi_b + \gamma_{\alpha j}^i (V_b^\alpha \Phi_c^j - V_c^\alpha \Phi_b^j + \Phi_{bc}^\alpha x^j),$$

$$\Phi_{bc}^\alpha = \partial_b V_c^\alpha - \partial_c V_b^\alpha + c_{\beta\gamma}^\alpha V_b^\beta V_c^\gamma,$$

$$\partial_b = \frac{\partial}{\partial a^b} \quad (b=1, 2, 3), \quad \partial_b = \frac{\partial}{\partial t} \quad (b=4),$$

где $s_1 > 0$, $s_2 > 0$ – произвольные постоянные; $c_{\beta\gamma}^\alpha$ – структурные постоянные алгебры Ли группы $SO(3N)$; r^{bc} , g^{bc} – тензоры, приведенные в [2], а ς_{ij} полагается равным единичной матрице $\varsigma_{ij} = \delta_{ij}$. Здесь $i, j=1, \dots, 3N$, $b, c, d, l=1, \dots, 4$, а греческие от 1 до $\frac{3N(3N-1)}{2}$.

Лагранжиан L_X , учитывающий сегнетоэлектрическую подсистему, имеет вид

$$L_X = \frac{s_3}{2} c_{\alpha\beta} N_{bc}^\alpha g^{bd} g^{cl} N_{dl}^\beta, \quad N_{bc}^\alpha = \partial_b X_c^\alpha - \partial_c X_b^\alpha + c_{\beta\gamma}^\alpha X_b^\beta X_c^\gamma, \quad (7)$$

где s_3 – положительная константа; T_p задает кинетическую энергию этой подсистемы [5]:

$$T_p = \frac{1}{2} \chi_{ij} \nabla_4 \theta^i \nabla_4 \theta^j, \quad \nabla_4 \theta^i = \frac{\partial}{\partial t} \theta^i + \gamma_{\alpha j}^i X_4^\alpha \theta^j.$$

В дальнейшем ограничимся случаем, когда модуль вектора поляризации сохраняется. Тогда, используя лагранжиан (6), из вариационного принципа стационарного действия получаем уравнения движения для смещения, магнитного момента и вектора поляризации θ , а также компенсирующих полей. Заметим, что вследствие того, что $\theta^2 = \text{const}$, к вариации действия нужно добавить член

$$\int_{t_0}^t dt \int_{V_0} dV_0 [p \theta \delta \theta + P_m (\theta \delta \nabla_m \theta + \nabla_m \theta \delta \theta)], \quad (8)$$

причем p , P_m – произвольные постоянные.

Используя лагранжиан (6), из вариационного принципа стационарного действия получаем уравнения движения для смещения, вектора поляризации θ , а также компенсирующих полей.

Для того чтобы записать уравнения более компактно, введем обозначения

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial (\partial_b x^i)} &= Z_i^b, & R_i^{bc} &= \frac{\partial L}{\partial D_{bc}^i}, & G_\alpha^{bc} &= -\frac{\partial L}{\partial \Phi_{bc}^\alpha}, \\ \frac{\partial L}{\partial (\nabla_k \theta^i)} &= Z_i^{(P)k}, & \Xi_k^{(P)} &= \frac{\partial L}{\partial \theta^k} - \frac{1}{\theta_0^2} \frac{\partial L}{\partial \theta^r} \theta^r \delta_{kl} \theta^l, \\ B_\alpha^{bc} &= -\frac{\partial L}{\partial N_{bc}^\alpha}, \end{aligned} \quad (9)$$

а также учтем, что при изменениях ϕ^i , V^α , X^α , равных $\delta \phi^i = \varepsilon \xi^i$, $\delta V^\alpha = \varepsilon \zeta^\alpha$ и $\delta X^\alpha = \varepsilon \omega^\alpha$, индуцируются вариации [2]

$$\begin{aligned} \delta D^i &= \varepsilon (d\zeta^i + \Gamma_j^i \wedge \zeta^j), & \delta \Phi^\alpha &= \varepsilon (d\zeta^\alpha + c_{\beta\gamma}^\alpha V^\beta \wedge \zeta^\gamma), \\ \delta N^\alpha &= \varepsilon (d\omega^\alpha + c_{\beta\gamma}^\alpha X^\beta \wedge \omega^\gamma). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь знак $\wedge$ означает внешнее произведение, $\Gamma_j^i = V_b^\alpha \gamma_{aj}^i da^b$.

Используя обозначения (9) и равенства (10), можем получить уравнения для динамических переменных и компенсирующих полей [2–6], причем рассмотрение сегнетоэлектрической подсистемы приводит к появлению дополнительных выражений:

$$\begin{aligned} \partial_b Z_i^b - Z_j^b V_b^\alpha \gamma_{ai}^j - \gamma_{ai}^j \Phi_{bc}^\alpha R_j^{bc} &= 0, \\ \partial_b R_j^{bc} - \gamma_{aj}^i V_b^\alpha R_i^{bc} &= \frac{1}{2} Z_j^c, \\ J_\alpha^b &= 2 \gamma_{aj}^i R_i^{bc} D_b^j, \quad (D_b^j = D_b x^j), \\ \partial_b B_\alpha^{bc} - c_{\gamma\alpha}^\beta X_b^\gamma B_\beta^{bc} &= \frac{1}{2} J_\alpha^{(P)c}, \quad J_\alpha^{(P)b} = \frac{\partial L}{\partial X_b^\alpha}, \\ \varepsilon^{kpi} \delta_{pr} \theta^r [Z_j^{(P)s} \gamma_{ak}^j X_s^\alpha - \partial_l Z_k^{(P)l} + \Xi_k^{(P)}] &= 0, \end{aligned} \quad (11)$$

где индексы bc изменяются от 1 до 4, все остальные, латинские, от 1 до $3N$, а греческие от 1 до $\frac{3N(3N-1)}{2}$.

Для получения этих условий удобно записать (11) в компактном виде через дифференциальные формы, для этого введем 3-форму $J_\alpha^{(P)} = J_\alpha^{(P)b} \pi_b$ и 2-форму $B_\alpha = \frac{1}{2} B_\alpha^{bc} \pi_{bc}$. В этом случае уравнения движения примут вид [3–8]

$$DR = \frac{1}{2}Z, \quad DG = \frac{1}{2}J, \quad DB = \frac{1}{2}J^{(P)}. \quad (12)$$

Дифференцируя внешним образом еще раз уравнения (12), получим окончательные условия интегрируемости

$$DJ = 2(\Theta \wedge G - G \wedge \Theta), \quad DJ^{(P)} = 2(\Theta \wedge B - B \wedge \Theta). \quad (13)$$

Было показано, что наличие в среде дислокаций и дисклинаций приводит к необходимости рассматривать не только упругие, но и сегнетоэлектрические степени свободы среды на основе калибровочной теории. Дело в том, что компенсирующие поля, описывающие дислокации и дисклинации, обеспечивают инвариантность лагранжиана упругой подсистемы среды относительно локальных вращений и трансляций решетки. Однако в сегнетоэлектриках смещения атомов сопровождается изменением ориентации вектора поляризации [4–8]. Это означает, что лагранжиан среды не должен изменяться при совместных локальных вращениях и трансляциях решетки, вектора поляризации.

Построенная теория в случае отсутствия в среде дислокаций и дисклинаций переходит в обычную теорию сегнетоупругого взаимодействия.

В работе вариационным методом получены уравнения движения для калибровочных полей и вектора поляризации единицы массы.

Сегнетоупругая связь между упругими и сегнетоэлектрическими волнами ярко проявляется вблизи ориентационных фазовых переходов в сегнетоэлектриках, поэтому одним из возможных приложений уравнений является изучение распространения сегнетоупругих волн при наличии дефектов решетки вблизи ориентационных фазовых переходов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. Спиновые волны. – М.: Наука, 1967. – 368 с.
2. Кадич А., Эделен Д. Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций. – М.: Мир, 1987. – 168 с.
3. Меньшенин В.В. // ФТТ. – 1991. – № 33. – С. 1518–1520.
4. Харрасов М.Х., Кызыргулов И.Р., Хусаинов А.Т. // ДАН. – 2008. – Т. 421. – № 3. – С. 329–331.
5. Мусиенко А.И., Копчик В.А. // Кристаллография. – 1996. – Т. 41. – № 4. – С. 586–590.
6. Плюшко Н.Я., Чупис И.Е. // УФЖ. – 1974. – Т. 19. – № 5. – С. 824–833.
7. Смоленский Г.А., Боков В.А., Исупов В.А. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. – Л.: Наука, 1971. – 476 с.
8. Katanaev M.O. Geometric theory of defects. Lectures given at summer school «Vortices: a unifying concept in Physics». – N.Y., 2004. – P. 210.

*Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак, Россия

**Башкирский госуниверситет, г. Уфа, Россия

E-mail: KizirgulovIR@mail.ru

khusainov324@mail.ru

Поступила в редакцию 06.10.08,
после доработки – 02.07.09.

Кызыргулов Ильгиз Раянович, к.ф.-м.н., доцент, проректор по учебной работе и связям с общественностью Стерлитамакской государственной педагогической академии;

Хусаинов Айдар Танаевич, аспирант БашГУ;

Харрасов Мухамет Хадисович, д.ф.-м.н., профессор, ректор БашГУ.