

ВЛИЯНИЕ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ НА СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

© 2005 С.В. Григорьев, Б.М. Даринский

Воронежский государственный технический университет

Поступила в редакцию 22.09.05

Предложен теоретико-групповой метод исследования влияния диссипативных процессов на строение кристалла, основанный на рассмотрении диссипативной функции в качестве базиса представления черно-белой группы. В качестве примера получено нелинейное соотношение между электрическим полем и намагниченностью кристалла кубической симметрии.

В этой работе планируется разработать новый метод, основанный на применении диссипативной функции, представляющей собой t -нечетный скаляр, в качестве базиса представления черно-белых групп, позволяющий исследовать влияние диссипативных процессов на строение кристалла.

Если в кристалле протекает какой-либо диссипативный процесс, то в нем появляются силы, действующие на атомы и электроны кристалла со стороны частиц, являющихся носителями этого процесса. Эти силы приводят к некоторому изменению положений ядер в кристаллической решетке, волновых функций валентных электронов и атомных токов. В результате возникает влияние одних характеристик кристалла на другие. В настоящей главе предлагается метод определения параметров, взаимодействующих в этом процессе, и описания этого явления методами теории кристаллографических групп, который зарекомендовал себя как плодотворный метод в различных вопросах теории кристаллов [1-3].

В качестве причины, порождающей релаксационные процессы в кристалле, рассмотрим однородные внешние классические поля, а именно, электрическое поле, напряженность которого E_i является t -четным полярным вектором; магнитное поле с индукцией B_i , являющейся t -нечетным аксиальным вектором; поле механических напряжений, характеризуемых t -четным симметричным тензором $\hat{r}P_{ij}$. Примем также во

внимание возможность наличия в кристалле поля момента сил, который в моментных теориях упругости представляется антисимметричным тензором второго ранга. Плотность K момента сил является t -четным аксиальным вектором. В качестве конкретного примера рассмотрим кристаллы серой группы O_h . В кристаллах этой группы девятнадцать нетривиальных представлений и, соответственно, столько же возможных структурных фазовых переходов. В таблице 1 приведены элементы группы, их характеры, классы и тензорные базисы наименьшего ранга для белой группы O_h [4]. Аналогичная таблица для серой группы, являющейся прямым произведением белой группы на операцию отражения времени, получается добавлением соответствующих групповых операций и t -нечетных базисов.

Здесь x_i – компоненты полярного вектора, φ_i – компоненты аксиального вектора, u_{ij} – компоненты тензора деформации, γ_{ij} – компоненты аксиального тензора второго ранга, b_{ijl} – компоненты полярного тензора третьего ранга, τ_{ijl} – компоненты аксиального тензора третьего ранга.

В таблице 1 незатемненными полосами показаны представления, которые рассматривались в связи с изучением структурных фазовых переходов различных типов. По представлению T_{1u} происходят сегнетоэлектрические переходы, по представлениям E_g и T_{2g} – сегнетоэластические, по T_{1g} – ротационные.

Представления, характеры и базисы для группы O_h

	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C_2$	I	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6S_4$	$6\sigma_d$	Базис представления
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$u_{11} + u_{22} + u_{33}$
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	$\tau_{123} + \tau_{213} + \tau_{312}$
E_g	2	-1	2	0	0	2	-1	2	0	0	$[2u_{33} - u_{11} - u_{22}, u_{11} - u_{22}]$
T_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	0	-1	1	-1	$[\phi_1, \phi_2, \phi_3]$
T_{2g}	3	0	-1	-1	1	3	0	-1	-1	1	$[u_{23}, u_{13}, u_{12}]$
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	$\gamma_{11} + \gamma_{22} + \gamma_{33}$
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	$b_{123} + b_{213} + b_{312}$
E_u	2	-1	2	0	0	-2	1	-2	0	0	$[2\gamma_{33} - \gamma_{11} - \gamma_{22}, \gamma_{11} - \gamma_{22}]$
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	0	1	-1	1	$[x_1, x_2, x_3]$
T_{2u}	3	0	-1	-1	1	-3	0	1	1	-1	$[\gamma_{23}, \gamma_{13}, \gamma_{12}]$

Остальные фазовые переходы не привлекли внимания исследователей, хотя основные идеи о ферроиках высокого порядка в настоящее время уже сформированы [4-5]. Отметим, что в t -нечетном базисе рассматривались только магнитные переходы по представлению T_{1g} .

Зависимость макроскопических характеристик кристалла, отражающих наличие диссипативных процессов, от внешних силовых полей можно найти с помощью формулировки диссипативной функции ψ , которая является t -нечетным скаляром. Она преобразуется по представлению, имеющему положительные характеры для всех элементов группы, не содержащим отражения времени, и отрицательные в противоположном случае. Очевидно, базис такого представления должен содержать нечетные степени компонент t -нечетных тензоров различного ранга.

В качестве примера рассмотрим эффект воздействия тока проводимости на поляризацию кристалла. Представим выражение для диссипативной функции в следующем виде:

$$\psi = \sigma i^2 - E_i i_1, \quad (i^2 = i_1 i_1), \quad (1)$$

где σ - проводимость кристалла, являющаяся t -нечетным скаляром.

Дифференцируя это выражение по компонентам плотности тока i_1 и, полагая про-

изводную нулю, получаем закон Ома $i_1 = \sigma E_1$. Заметим, что левая правая части закона Ома преобразуются по одному представлению T_{1u} . По этому же представлению преобразуется t -нечетный вектор с компонентами γP_1 , где γ есть t -нечетный скаляр. Отсюда следует при подходящем выборе величины γ соотношение $\gamma P_1 = i_1$, отражающее эффект увлечения ионов решетки потоком носителей электрического заряда в кристалле. Этот эффект можно рассматривать как один из механизмов влияния диссипативных потоков на строение кристаллической решетки кристаллов группы O_h .

В качестве другого примера рассмотрим эффект влияния тока на магнитный момент кристалла. Естественной причиной возникновения намагниченности в кристалле является внешнее магнитное поле. Компоненты t -нечетных аксиальных векторов намагниченности M_i и индукции магнитного поля V_i преобразуется представлению T_{1g} , поэтому они находятся в линейной зависимости $M_i = \chi V_i$, где χ - магнитная восприимчивость кристалла, являющаяся t -четным скаляром. Существует еще одна причина возникновения магнитного поля, а именно, диссипативные потоки заряженных частиц. Компоненты i_1 t -четного полярного вектора электрического тока преобразуют-

Произведения представлений для групп Oh (Th), Oh (O), Oh (Td)

Oh (Th), Oh (O), Oh (Td)	A _{1g}	A _{2g}	E _g	T _{1g}	T _{2g}	A _{1u}	A _{2u}	E _u	T _{1u}	T _{2u}
A _{1g}	A _{1g}	A _{2g}	E _g	T _{1g}	T _{2g}	A _{1u}	A _{2u}	E _u	T _{1u}	T _{2u}
A _{2g}	A _{2g}	A _{1g}	E _g	T _{2g}	T _{1g}	A _{2u}	A _{1u}	E _u	T _{2u}	T _{1u}
E _g	E _g	E _g	A _{1g} + A _{2g} +E _g	T _{1g} +T _{2g}	T _{1g} +T _{2g}	E _u	E _u	A _{1u} + A _{2u} +E _u	T _{1u} +T _{2u}	T _{1u} +T _{2u}
T _{1g}	T _{1g}	T _{2g}	T _{1g} +T _{2g}	A _{1g} +E _g + T _{1g} +T _{2g}	A _{2g} +E _g + T _{1g} +T _{2g}	T _{1u}	T _{2u}	T _{1u} +T _{2u}	A _{1u} +E _u + T _{1u} +T _{2u}	A _{2u} +E _u + T _{1u} +T _{2u}
T _{2g}	T _{2g}	T _{1g}	T _{1g} +T _{2g}	A _{2g} +E _g + T _{1g} +T _{2g}	A _{1g} +E _g + T _{1g} +T _{2g}	T _{2u}	T _{1u}	T _{1u} +T _{2u}	A _{2u} +E _u + T _{1u} +T _{2u}	A _{1u} +E _u + T _{1u} +T _{2u}
A _{1u}	A _{1u}	A _{2u}	E _u	T _{1u}	T _{2u}	A _{1g}	A _{2g}	E _g	T _{1g}	T _{2g}
A _{2u}	A _{2u}	A _{1u}	E _u	T _{2u}	T _{1u}	A _{2g}	A _{1g}	E _g	T _{2g}	T _{1g}
E _u	E _u	E _u	A _{1u} + A _{2u} +E _u	T _{1u} +T _{2u}	T _{1u} +T _{2u}	E _g	E _g	A _{1g} + A _{2g} +E _g	T _{1g} +T _{2g}	T _{1g} +T _{2g}
T _{1u}	T _{1u}	T _{2u}	T _{1u} +T _{2u}	A _{1u} +E _u + T _{1u} +T _{2u}	A _{2u} +E _u + T _{1u} +T _{2u}	T _{1g}	T _{2g}	T _{1g} +T _{2g}	A _{1g} +E _g + T _{1g} +T _{2g}	A _{2g} +E _g + T _{1g} +T _{2g}
T _{2u}	T _{2u}	T _{1u}	T _{1u} +T _{2u}	A _{2u} +E _u + T _{1u} +T _{2u}	A _{1u} +E _u + T _{1u} +T _{2u}	T _{2g}	T _{1g}	T _{1g} +T _{2g}	A _{2g} +E _g + T _{1g} +T _{2g}	A _{1g} +E _g + T _{1g} +T _{2g}

ся по представлению T_{1u} , поэтому линейная связь между M_i и i_i не возможна. Квадратичная зависимость между этими компонентами, как будет показано ниже, оказывается также запрещенной симметричными ограничениями. Для этого рассмотрим декартов квадрат представления T_{1u} .

Как видно из таблицы 2 для произведений представлений группы O_h , $(T_{1u})^2 = A_{1g} + E_g + T_{1g} + T_{2g}$. Поскольку в этой сумме присутствует представление T_{1g} , следовало бы найти ненулевой базис, компоненты которого пропорциональны j_i . Нетрудно предъяснить единственно возможный базис в явном виде: это будет векторное произведение вектора самого на себя, которое равно нулю. Поэтому такой базис в декартовом квадрате рассматриваемого представления не существует. Это означает отсутствие эффекта возникновения намагниченности кристалла, пропорциональной квадрату напряженности электрического поля. Обращаем внимание на то, что в декартовом квадрате присутствует представление T_{2g} . Базис этого представления, очевидно, имеет следующий вид: $[x_2x_3, x_3x_1, x_1x_2]$.

Заметим, что отсюда следует, что наличие потока зарядов сопровождается появлением компонент u_{23}, u_{13}, u_{12} деформации и тензора диэлектрической проницаемости кристалла. Умножим представление T_{2g} еще раз на себя. В результате, в соответствии с таблицей 2 получим сумму представлений $A_{2u} + E_u + T_{1u} + T_{2u}$. Базис представления T_{1u} имеет вид $[x_1(x_2^2 + x_3^2), x_2(x_3^2 + x_1^2), x_3(x_1^2 + x_2^2)]$ и не совпадает с исходным. Умножая это представление еще раз на T_{1u} , найдем базис представления T_{1g} в следующем виде: $[x_2x_3(x_2^2 - x_3^2), x_3x_1(x_3^2 - x_1^2), x_1x_2(x_1^2 - x_2^2)]$. Отсюда можно сделать вывод, что при условии наличия в кристалле соответствующего t -нечетного скаляра v в кристалле появляется намагниченность, пропорциональная четвертой степени тока и электрического поля.

Зависимость компонент намагниченности дается следующими формулами:

$$\begin{aligned}
 M_1 &= vE_2E_3(E_2^2 - E_3^2), \\
 M_2 &= vE_3E_1(E_3^2 - E_1^2), \\
 M_3 &= vE_1E_2(E_1^2 - E_2^2).
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

При наличии тока в материале возникает индуцированное магнитное поле и намагниченность кристалла, пропорциональная первой степени напряженности электрического поля. Намагниченность, определяемая формулами (2), отличается от нее специфической ориентационной зависимостью. В частности, она инвариантна относительно инверсии электрического поля.

В заключении сформулируем основные результаты данной работы. Предложен новый метод, основанный на применении диссипативной функции, представляющей собой t -нечетный скаляр, в качестве базиса представления черно-белых групп, позволяющий исследовать влияние диссипативных процессов на строение кристалла. Показано, что базисы представлений групп позволят получить соотношения между различными макроскопическими величинами (полевые

соотношения) в диссипативных процессах. Наличие диссипативных процессов, в частности, может привести к появлению зависимости намагниченности от четвертой степени напряженности электрического поля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. VIII. Электродинамика сплошных сред. М. Наука. 1982. 620 с.
2. Lubarskii G. Ya. The Application of group Theory in Physics. London. 1960.
3. Изюмов Ю.А., Сыромятников М.Т. Фазовые переходы и симметрия в кристаллах. М. Наука. 1984. 247 с.
4. Вустер У. Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов. М.: Мир. 1973. 383 с.
5. Адамов В.А., Даринский Б.М., Чаплыгин М. Н. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2003. Т. 5. № 3. С. 297-302.