چرخش در حالت هاي مختلف حوزه ساختماني مواد فروكشسان

احمد پيردواني
دانشگاه شهيد رجايي

چكيده

در اين مقاله به زاويه هاي افزايشي مواد فروكشسان مربوط به انتقال فاز پرداخته شده و براي شش فاز مختلف مواد فروكشسان در مواردي كه تنها امكان افزايش يك زاويه وجود دارد ، محاسباتي انجام گرفته است. استفاده از تانسور تنش خود بخودي و روشهاي جبري و هندسي در محاسبات مورد نظر بوده است. اين روش را مي توان براي هر نوع زاوية افزايشي فروكشسان و در تمام حالتهاي ممكن به كار برد .

مقدمه

در چند سال اخير مطالعاتي بنيادي درزمينة مواد فروكشسان و فرومغناطيس انجام گرفته است. بررسي تنش، تئوري انرژي آزاد گينربرگ ـ لاندو[۱]، انتقال فاز و همنه‌هاي مربوط در شرايط مرزي دراثر گرما [۲]، پيشنهاد مدلهايي با روشهاي عددي در انتقال فاز، مطالعه مواد فروكشسان، رشد بلور، محاسبة ثابت پيزوالكتريك و تخمين دماي محدود ظاهري و پيشرفت در روشهاي مختلف و جديد، بررسي تقارن و نكاتي در مورد تخمين مرز ديواره‌هاي حقيقي در اشكال هندسي و مدلهاي تجربي [۳] از جملة موارد اين مطالعات است.

در ساختمان مواد فروكشسان حالتهاي مختلفي مي‌تواند ايجاد شود [٤]، اما در تمام اين حالتها، ساختمان كريستالي يكسان است، تنها تفاوت مشهود در تعيين موقعيت نسبت به دستگاه مختصات در فاز پاراكشسان است . تمام حالتها از نظر انرژي معادل‌اند و مي‌توانند به صورت بلورهاي مشابه در كنار هم باشند . حوزة فروكشسان و ديواره‌هاي آن را مي توان در نور قطبي شدهء ميكروسكوپ ، به خوبي ملاحظه نمود [٥]. وقتي كه يك حوزه ساختماني فروكشسان شكل گيرد حالت نفوذي تنها در تعيين موقعيت بلورها اهميت دارد. در ساختمان چند نفوذي، موقعيت حالتهاي نفوذي در مطابقت با حالتهاي نفوذي كامل تفاوت دارد.

ديواره‌هاي بين حوزه‌هاي دو فروكشسان كه در شرايط كشش سازگاري دارند، از ديواره‌هاي نفوذي مجاز ترجيح داده مي‌شوند . اين ديواره‌هاي نفوذي بايد شامل تمام جهتها و براي تغييرات جزيي طول، مربوط به كشش خود بخودي و در دو حوزه مجاور برابر باشند [٤]. اگر ديواره‌هاي مجاز بين حوزه‌ها وجود داشته باشد، هميشه دو صفحه در ديوارة مجاز حوزه مي‌تواند شكل گيرند و اين دو صفحه بر هم عمود مي‌باشند [٤]. در صورتي

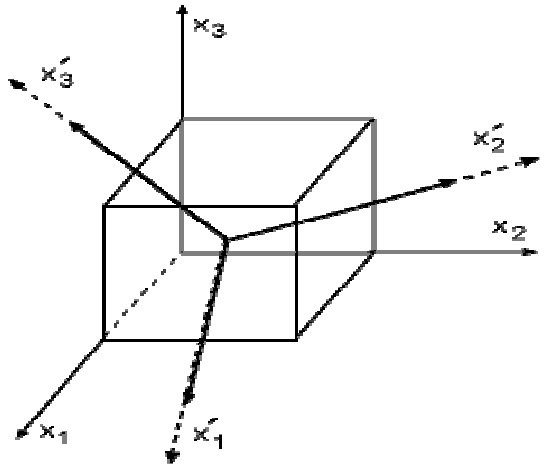
[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

كه ديوارهٔ مجاز بين حوزه‌ها وجود نداشته باشد، دو حوزه در اثر كشش خارجي به هم متصل مي‌شوند. مرزهاي بين دو حالت حوزه، وقتي صفحه ها خوب تعريف نشوند، اغلب منحني و توزيع غير عادي با كشش داخلي و جابجايي ايجاد مي كند.

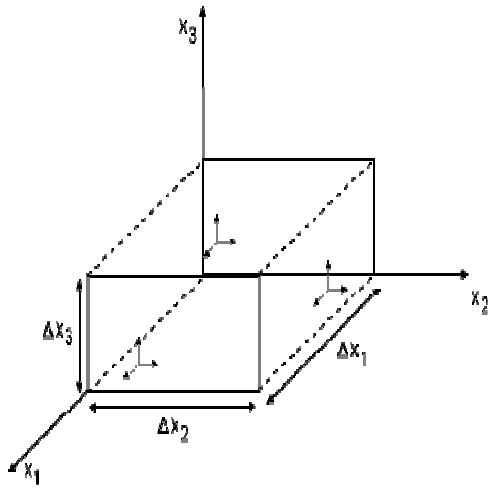
در شكل گيري بين دو ديوار حوزه فروكشسان، چرخش معيني از حالت هاي حوزه مجاور طبق حالتهاي كامل مورد نياز است [٦ و٧]. هدف اين مقاله محاسبه، تمام زواياي ممكن افزايش يافته در حالتهاي حوزه كامل در چرخش هاي مجاز ديوارهاي حوزه است. اندازه اين زاويه ها به كشش خود بخودي و ارتباط بين حوزه دو ديوار بستگي دارد.

تانسور كشش خود بخودي

يك جز كوچك مكعبي مطابق شكل در نظر ميگيريم.



شكل (١)



شكل (٢)

و فرض ميكنيم تا $\boldsymbol{\tau}_3, \boldsymbol{\tau}_2, \boldsymbol{\tau}_1$ به ترتيب بردارهاي كشش در امتداد محورهاي مختصات كارتزين x_3', x_2', x_1' باشند ملاحظه مي‌شود. $\boldsymbol{\tau} = \tau_1 \mathbf{e}_1' + \tau_2 \mathbf{e}_2' + \tau_3 \mathbf{e}_3'$ همنه‌هاي بردار $\boldsymbol{\tau}_1$ در امتداد محورهاي x_3, x_2, x_1 به ترتيب $\delta_{13}, \delta_{12}, \delta_{11}$ مي‌ناميم. $\boldsymbol{\tau}_1 = \delta_{11}\mathbf{e}_1 + \delta_{12}\mathbf{e}_2 + \delta_{13}\mathbf{e}_3$ اين روابط را مي‌توان براي $\boldsymbol{\tau}_3, \boldsymbol{\tau}_2$ بطور مشابه نوشت، با استفاده از علائم شاخص داريم : $\boldsymbol{\tau}_i = \delta_{ij}\mathbf{e}_j \, (i, j = 1,2,3)$

نه همنه كشش كه بصورت δ_{ij} نمايش داده ميشود، بنام تاسور كشش خوانده ميشود.

تانسور كشش خود به خودي به اين صورت تعريف ميشود كه حجم نخستين نمونه پس از كشش تغيير نكند، در حقيقت تغيير حجم به انبساط حرارتي مربوط مي شود. تانسور كشش خود بخودي فقط براي تغيير در ساختمان بلوري به حساب مي آيد.اين شرايط در رابطه زير بيان مي شود [٨].

$$\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = 0 \qquad (١)$$

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

كه در آن ε_{ii}، همنه هاي قطر اصلي در تانسور كشش خود بخودي است. شكل تانسور كشش خود بخودي فقط به تقارن گروهي P از نخستين نمونه فاز و E فاز فروكشسان مربوط مي‌شود [۹]. عملكرد F را، كه عملكردي در P است ولي در E نيست تعريف مي شود، عملكرد F تقارني را نشان ميدهد كه نتيجه آن انتقال فاز است. بعضي حالتهاي نفوذي در ساختمان فروكشسان‌ها همگي تقارن‌هايي در گروه تقارني E دارند.

عملكرد F حالتي نفوذي به ساير حالتهاي نفوذي ديگر انتقال مي دهد. درجدول شكلهاي تانسور كشش خود بخودي براي تمام حالتهاي نفوذي در هر انتقال فاز فروكشسان آورده شده است[۱۰].

بطور كلي بيشتر از يك عملكرد در انتقال از يك حالت نفوذي معين S^1 به حالت نفوذي ديگر S^2 وجود دارد. اگر يك عملكرد F يك آينه تخت يا محور دو برابر كننده باشد، اين صفحه با صفحه عمود بر محور دو برابر كننده تا ديوار مجاز نفوذي W ادامه دارد، زيرا در تمام شرايط صدق مي‌كند. ديوارW تا عمود بودن بر ديوار W ادامه دارد. تعيين موقعيت كامل در ديوارW به مقادير همنه هاي كامل تانسور كشش خود بخودي مربوط مي‌شود[٤].

در موقع محاسبه زاويه افزايشي در حالتهاي نفوذي كامل، تانسور كشش خود بخودي δ_{ij} را معرفي مي‌كنند. تفاوت تانسور كشش خود بخودي در دو حالت مختلف نفوذي به صورت زير تعريف مي شود:

$$\delta = \varepsilon^1 - \varepsilon^2 \qquad (۲)$$

از دو رابطه (۱) و(۲) مي‌توان نتيجه گرفت كه:

$$\delta_{11} + \delta_{22} + \delta_{33} = 0 \qquad (۳)$$

تانسور كشش خود بخودي نقطة برگشت در عنصر تقارن است و به اين ترتيب تانسور كشش خود بخودي تمام شكلهاي بلوري متعلق به گروه لائو را دارد. و تنها تفاوت آنها در نقطة تقارن برگشتي است. در اينجا مي‌توان نتيجه گرفت كه نيازي به محاسبه براي انتقال فاز بلورها نيست و روشن مي شود تنها براي يازده گروه لائو صورت مي‌گيرد ؛ بنابراين محاسبه فقط براي يكي از انواع بلورها طبق انتقال فاز، صورت مي‌پذيرد و نتيجه آن براي ساير آنها نيز معتبر است . به عنوان مثال در انتقال فاز از مكعبي 1 به مربعي[۱] ۱ سه نوع امكان فروكشسان وجود دارد: m3mF4/mmm و $43mF42\bar{m}$ و 432F422. اگر در اين مثال براي سه نوع حداكثر تقارن را در نظر بگيريم محاسبه انتقال m3mF4/mmm مشابه دو نوع ديگر است .

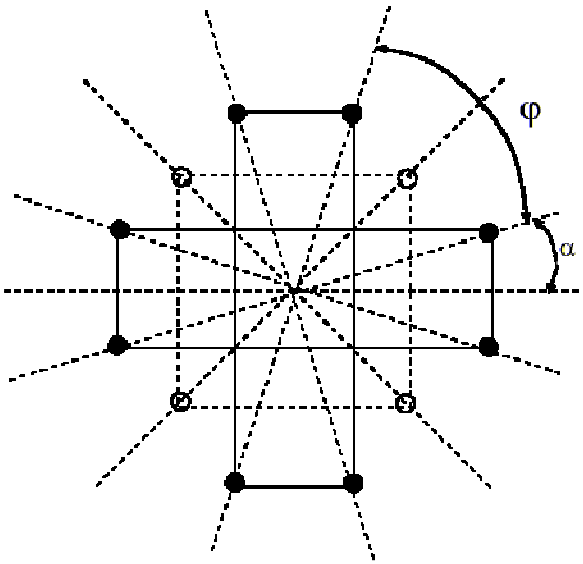
محاسبة زاويه افزايشي

زاويهة افزايشي φ براي دو حالت نفوذي در چرخش ديوارة نفوذي مجاز در شكل ۱ نشان داده شده است. $\Delta\varphi^1$ و $\Delta\varphi^2$ به ترتيب مبدأ زاويه‌اي (طبق عقربه‌هاي ساعت) كه از حالت نفوذي اول به حالت نفوذي دوم مي‌رسد زاويه φ خواهد شد:

$$\varphi = \Delta\varphi^2 - \Delta\varphi^1 \qquad (٤)$$

۱-Tetragonal

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]



۱

شكل (۳) - افزايش زاويه در حالت 4/mmmFmmm (اندازه كشش خيلي كمتر از مقدار واقعي است)

۱) روش هندسي

در محاسبة زاوية افزايشي با روش هندسي مثال حالت 4/mmmFmmm را در نظر مي گيريم ، و مي توانيم شكل تانسور كشش خود بخودي را براي حالت اول پيدا كنيم [۱۰]:

$$\varepsilon^1 = \begin{pmatrix} -a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

در ساختمان نمونة اصلي يك محور چهارتايي در جهت محور z ها دارد. در ساختمان فروكشسانها فقط يك محور دو تايي متقارن در جهت محور z وجود دارد. بنابراين يك عملكرد F براي مثال چرخشي حدود زاويه ۹۰ درجه نسبت به محور z دارد. با بكارگيري عملگر ε^1، شكل تانسور كشش خود بخودي براي حالت نفوذي ثانويه به دست مي‌آيد.

$$\varepsilon^2 = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

نقطة ساختماني نمونة اصلي با مختصات [x,y,z] بر اثر جابه جايي نقطه اي به مختصات [x`,y`,z`] در

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

ساختمان فروكشسان مي‌رسد . هر دو اين مختصات‌ها در دو حالت نفوذي بر حسب x,y,z در تانسور كشش خود بخودي بيان مي‌شود .

DS1 $x`=x(1-a)\ ,\ y`=y(1+a)\ ,\ z=z`$ (٥)

DS2 $x`=x(1+a)\ ,\ y`=y(1-a)\ ,\ z=z`$ (٦)

مي‌توانيم نتيجه بگيريم كه در جهت محور zكشش مكانيكي وجود ندارد ، بنابراين صفحة z=0 محدودة ملاحظات ما خواهد بود . براي محاسبه بهتر است مربعي را در صفحه در نظر بگيريم كه مركز آن مبداء باشد و اضلاع آن به ترتيب موازي با محورهاي x,y باشند . اين مربع به مستطيل تغيير شكل خواهد داد . موقعيت آنها در شكل ١ نشان داده شده است. مركز مربع داراي مختصات [٠,٠,٠] و مختصات راس راست بالايي [٠,١,١] است. ازاين محاسبة بالا مختصات نقطة حالت نفوذي اوليه [١-a,١+a,٠] و در حالت نفوذي ثانويه [+a,١-a ,٠] به دست مي‌آيد، واز روي شكل مي توان نوشت :

$$\varphi = 90 - 2\alpha \qquad (٧)$$

از اين معادله رابطة زير به دست مي آيد :

$$\tan(\varphi/2)=\tan(45-\alpha)=(1-\tan\alpha)/(1+\tan\alpha) \qquad (٨)$$

وقتي α بسياركوچك باشد مي توان به طور تقريبي نتيجه گرفت :

$$\varphi = 2\alpha \qquad (٩)$$

در روش هندسي بسختي مي توان به روش كلي رسيد وسرانجام به مشكل برخورد خواهيم كرد. بعنوان مثال در انتقال مكعبي به لوزي رخ[١] ، وقتي كه محور لوزي رخ موازي [١,١,١] است.

اين مثال بالا نشان مي دهد كه احتمالا ساده ترين حالت انتقال فاز است. و بنابراين ما نياز به روش كلي براي محاسبة زاوية افزايشي داريم .

٢) روش جبري

اجازه دهيد تانسور كشش خود بخودي ε^1 را براي حالت نفوذي اول و ε^2 را براي حالت نفوذي دوم در نظر بگيريم. حال ما فرض مي‌كنيم كه مي‌تواند حوزة ديوارة مجاز ميان اين دو حالت وجود داشته باشد. يك بردار اختياري x كه در حوزة ديوار قرار دارد در نظر مي‌گيريم. امتداد اين بردار بعد از كشش خود بخودي طبق نوشته انيشتين در حالتهاي نفوذي خاص خواهد شد:

DS1 : $\Delta x^1=\varepsilon^1_{ij}\, x_i\, x_j / |x|$ (١٠)

DS2 : $\Delta x^2=\varepsilon^2_{ij}\, x_i\, x_j / |x|$ (١١)

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

۱-Trigonal

به محض شكل گيري حوزه ديوارة مجاز، بايد

$$\Delta x^1 = \Delta x^2 \qquad (۱۲)$$

و معادله ديوارة مجاز خواهد شد :

$$(\varepsilon^1_{ij} - \varepsilon^2_{ij}) x_i x_j = ۰ \qquad (۱۳)$$

و بعد از قرار دادن در رابطه (۲) مي شود :

$$\delta_{ij} x_i x_j = ۰ \qquad (۱٤)$$

رابطة (۱٤) معادلة سطح يك مخروطي است ، كه راس آن در مبدا قرار دارد ؛ اما فرض مخروطي كه داراي نقطه تكين باشد ، از نظر فيزيكي قابل قبول نيست [٤] ؛ زيرا حوزة ديواره بايد مستقل از انتخاب مبدا باشد و بنابراين اين راه حل بايد رد شود و لازم است كه سطح مخروط به يك صفحه تبديل شود . اين شرط به صورت زير بيان مي شود :

$$|\delta_{ij}| = \begin{vmatrix} \delta_{11} & \delta_{12} & \delta_{13} \\ \delta_{21} & \delta_{22} & \delta_{23} \\ \delta_{31} & \delta_{32} & \delta_{33} \end{vmatrix} = 0 \qquad (۱۵)$$

در شكل گيري كوچك، زاوية افزايشي حالتهاي نفوذي با دادن مقادير ويژه تانسورهاي مختلف كشش خود بخودي امكان پذير است. اگر λ مقادير ويژه تانسورهاي مختلف كشش خود بخودي δ باشد، محاسبه جوابهاي معادلة عددي را مي‌توان پيدا كرد.

$$\lambda^3 - J_1\lambda^{2+} J_2\lambda - J_3 = 0 \qquad (۱۶)$$

كه در آن

$$J_1 = \delta_{11} + \delta_{22} + \delta_{33}$$

$$J_2 = \begin{vmatrix} \delta_{11} & \delta_{12} \\ \delta_{21} & \delta_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \delta_{22} & \delta_{23} \\ \delta_{32} & \delta_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \delta_{11} & \delta_{13} \\ \delta_{31} & \delta_{33} \end{vmatrix}, \quad J_3 = \begin{vmatrix} \delta_{11} & \delta_{12} & \delta_{13} \\ \delta_{21} & \delta_{22} & \delta_{23} \\ \delta_{31} & \delta_{32} & \delta_{33} \end{vmatrix}$$

در حالت ساده مورد نظر ما $J_1=0$ و طبق رابطه (۳) $J_3=0$ و طبق رابطه (۱۵) معادله (۱٦) به صورت زير در مي‌آيد:

$$\lambda^3 + J_2\lambda = 0 \qquad (۱۷)$$

و مقادير ويژه مورد نظر خواهد شد :

$$\lambda_1 = 0 \,,\ \lambda_{2,3} = \mp\sqrt{-J_2} \qquad (۱۸)$$

و بنابراين زاوية افزايشي مي‌شود :

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

$$\Phi = +\sqrt{J_2} \qquad (۱۹)$$

۳) محاسبة تمام زاويه هاي ممكن براي انتقال يك فاز

با روشي كه گفتيم تمام زاويه‌هاي افزايشي براي انتقال فاز تمام فروكشسانها محاسبه مي‌شود. براي هر انتقال فاز فروكشسان بايد تمام جفت حالتهاي نفوذي را در نظر گرفت. براي هر جفت نفوذي، محاسبه تانسور مختلف كشش خود بخودي لازم است تا معلوم شود آيا دترمينان آن صفر است يا خير ؟ و براي محاسبة زاوية افزايشي رابطه (۱۹) مورد استفاده قرار مي‌گيرد.

در فهرست نتايج كه در جاي خود آورده ايم ، تمام انواع انتقال فاز، كشش خود بخودي براي حالت نفوذي اول و تمام افزايش زاويه‌اي ممكن در هر انتقال فاز گزارش شده است .

يك مثال انتقال فاز مربعي۲ به سه شيب وجهي ۳ است. تانسورهاي كشش خودبخودي براي چهار حالت نفوذي ممكن به صورت زير است:

$$\varepsilon^1 = \begin{pmatrix} -a & b & c \\ b & a & d \\ c & d & 0 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon^2 = \begin{pmatrix} a & -b & -d \\ -b & -a & c \\ -d & c & 0 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon^3 = \begin{pmatrix} -a & b & -c \\ b & a & -d \\ -c & -d & 0 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon^4 = \begin{pmatrix} a & -b & d \\ -b & -a & -c \\ d & -c & 0 \end{pmatrix}$$

حال تانسورهاي كشش خودبخودي براي تمام جفت هاي ممكن تخمين مي زنيم :

$$\delta_{1,2} = \begin{pmatrix} -2a & 2b & c+d \\ 2b & 2a & d-c \\ c+d & d-c & 0 \end{pmatrix} \qquad \delta_{1,3} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2c \\ 0 & 0 & 2d \\ 2c & 2d & 0 \end{pmatrix}$$

$$\delta_{1,4} = \begin{pmatrix} -2a & 2b & c-d \\ 2b & 2a & c+d \\ c-d & c+d & 0 \end{pmatrix} \qquad \delta_{2,3} = \begin{pmatrix} 2a & -2b & c-d \\ -2b & -2a & c+d \\ c-d & c+d & 0 \end{pmatrix}$$

$$\delta_{2,4} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2d \\ 0 & 0 & 2c \\ -2d & 2c & 0 \end{pmatrix} \qquad \delta_{3,4} = \begin{pmatrix} -2a & 2b & -c-d \\ 2b & 2a & c-d \\ c-d & c+d & 0 \end{pmatrix}$$

تنها مواردي كه جفت حوزه‌هاي S1 , S2 , S3 , S4 باشد دترمينان صفر به دست مي‌آيد. براي اين جفتها نتايج مشابه و تنها زاويه‌ٔ ممكن براي اين نوع انتقال فاز به دست مي‌آيد . $\varphi = \pm 2\sqrt{c^2 + d^2}$

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

۳-Triclinic

فهرست نتايج

در جدول صفحهٔ بعدتمام نتايج ممكن آورده شده است .

نتايج

هدف اين مقاله محاسبهٔ زاويهٔ افزايشي حالتهاي نفوذي است ، در بهم پيوستن صفحه هاي نفوذي ديواره هاي مجاز ، چنانكه در تمام شرايط مكانيكي صدق كنند. فرمول حاصل از نتيجة تابع تانسور كشش خود بخودي در حالت اول نفوذي براي ۳۰ نوع ممكن انتقال فاز فروكشسان ، به دست آمده است كه در ديوار نفوذي جفت حالتهاي نفوذي متفاوت پيشنهاد مي شود . براي شش حالت ۱۰انتقال فاز نتايج حاصل با نتايج به دست مشترك شكل گرفته است . در مواقعي كه بيش از دو حالت نفوذي ممكن فروكشسان وجود داشته باشد، تمام آمده در مأخذ[۷] توافق دارد و ساير موارد در منابع وجود ندارد . ساير نتايج به دست آمده عبارتند از :

۱ – تنها حالتهايي مورد نظر است ، كه ديوارة حوزة مجاز بتواند شكل گيرد .

۲ – در تغييرات جزئي ، زاويه افزايش بستگي به مقادير ويژة تانسور كشش دارد .

۳ – تنها در دو حالت مكعبي 2 به مكعب مستطيل و لوزي رخ به سه شيب وجهي ديواره هاي نفوذي مجاز وجود ندارد .

منابع

1. A. Saxena,T. Lookman, A.R. Bishop (Los Alomos National Lab)[QC 30.01] Improper Ferroelastic Transitions. Role of Elastic Compatibility in Ferroelectric and Magnetoelastic Materials. (2000) http://www.eps.org/asp/meet/CENT99/BAPS/asb/S6265001.html
2. W. Cao (Penn State University), A. Saxsena (Los Alomos National Lab), D.M. Hatch (Bringham Young University),G.R. Barsch (Penn State University)[QC 30.02]Theory of Domain Walls Improper Ferroelastic Phase Transitions Driven by M-5 Zone Boundary Phonon. (2000) http://www.eps.org/asp/meet/CENT99/BAPS/asb/S6265002.html
3. R.E. Cohen. 1-56396-730-8.320pages. Illustratedcloth 6x9. (1998), 59500.
4. J.Sapriel, Phys. Rev. B 12,5128(1975).
5. H. Schmid, E.Burkhar dt, E. Walker, W. Brixel, M. Clin, J.P. Rivera , J-L. Jorda , M. Francois, Kyvon, Z. Phys.B, Condens.Matter72, (1988), 305.
6. V. Janovec, D.B. Litvin, L. Richterova, Ferroelectrics 157 , (1994), 75.
7. L.A. shuvalov, E.F.Dudnik, S.V. Wagin, Ferroelectrics 65, (1985), 143.
8. J.F. Nye, Physical Properties of Crystals, Clarendon , Oxford (1960).

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

9. J.C. Toledano, Ann. Telcommun. 29, (1974), 249.

10. K. Aizu, J. Phys. Soc. Jpn. 28, (1970), 706.

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-04-19]