Archive of SID

چرخش در حالت های مختلف حوزه ساختمانی مواد فروکشسان

احمد پیردوانی
دانشگاه شهید رجایی

چکیده

در این مقاله به زاویه های افزایشی مواد فروکشسان مربوط به انتقال فاز پرداخته شده و برای شش فاز مختلف مواد فروکشسان در مواردی که تنها امکان افزایش یک زاویه وجود دارد ، محاسباتی انجام گرفته است. استفاده از تانسور تنش خود بخودی و روشهای جبری و هندسی در محاسبات مورد نظر بوده است. این روش را می‌توان برای هر نوع زاویهٔ افزایشی فروکشسان و در تمام حالتهای ممکن به کار برد .

مقدمه

در چند سال اخیر مطالعاتی بنیادی درزمینهٔ مواد فروکشسان و فرومغناطیس انجام گرفته است. بررسی تنش، تئوری انرژی آزاد گینزبرگ ـ لاندو[۱]، انتقال فاز و همنه‌های مربوط در شرایط مرزی دراثر گرما [۲]، پیشنهاد مدلهایی با روشهای عددی در انتقال فاز، مطالعه مواد فروکشسان، رشد بلور، محاسبه ثابت پیزوالکتریک و تخمین دمای محدود ظاهری و پیشرفت در روشهای مختلف و جدید، بررسی تقارن و نکاتی در مورد تخمین مرز دیواره‌های حقیقی در اشکال هندسی و مدلهای تجربی [۳] از جمله موارد این مطالعات است.

در ساختمان مواد فروکشسان حالتهای مختلفی می‌تواند ایجاد شود [٤]، اما در تمام این حالتها، ساختمان کریستالی یکسان است، تنها تفاوت مشهود در تعیین موقعیت نسبت به دستگاه مختصات در فاز پاراکشسان است . تمام حالتها از نظر انرژی معادل‌اند و می‌توانند به صورت بلورهای مشابه در کنار هم باشند. حوزه فروکشسان و دیواره‌های آن را می‌توان در نور قطبی شدهٔ میکروسکوپ ، به خوبی ملاحظه نمود [٥]. وقتی که یک حوزه ساختمانی فروکشسان شکل گیرد حالت نفوذی تنها در تعیین موقعیت بلورها اهمیت دارد. در ساختمان چند نفوذی، موقعیت حالتهای نفوذی در مطابقت با حالتهای نفوذی کامل تفاوت دارد.

دیواره‌های بین حوزه‌های دو فروکشسان که در شرایط کشش سازگاری دارند، از دیواره‌های نفوذی مجاز ترجیح داده می‌شوند . این دیواره‌های نفوذی باید شامل تمام جهتها و برای تغییرات جزیی طول، مربوط به کشش خود بخودی و در دو حوزه مجاور برابر باشند [٤]. اگر دیواره‌های مجاز بین حوزه‌ها وجود داشته باشد، همیشه دو صفحه در دیواره مجاز حوزه می‌تواند شکل گیرند و این دو صفحه بر هم عمود می‌باشند [٤]. در صورتی

www.SID.ir

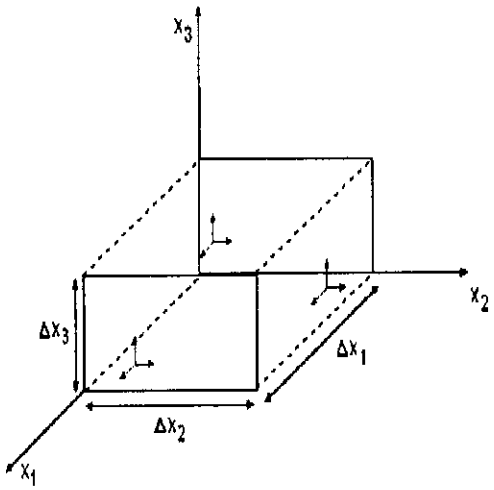
Archive of SID

بین دو حالت حوزه، وقتی صفحه ها خوب تعریف نشوند، اغلب منحنی و توزیع غیر عادی با کشش داخلی و جابجایی ایجاد می کند.

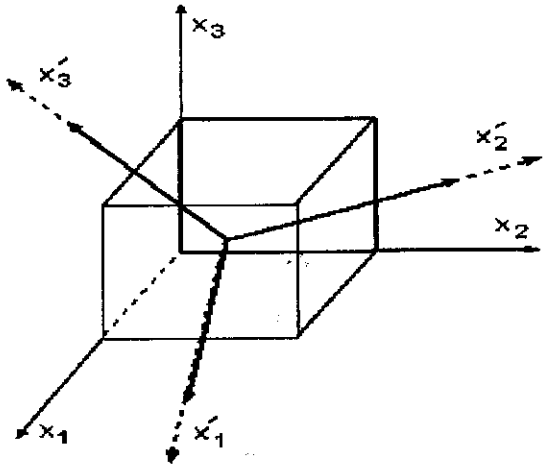
در شکل گیری بین دو دیوار حوزه فروکشسان، چرخش معینی از حالت های حوزه مجاور طبق حالتهای کامل مورد نیاز است [٦ و٧]. هدف این مقاله محاسبه، تمام زوایای ممکن افزایش یافته در حالتهای حوزه کامل در چرخش های مجاز دیوارهای حوزه است. اندازه این زاویه ها به کشش خود بخودی و ارتباط بین حوزه دو دیوار بستگی دارد.

تانسور کشش خود بخودی

یک جز کوچک مکعبی مطابق شکل در نظر میگیریم.



شکل (٢)



شکل (١)

و فرض میکنیم تا τ_1, τ_2, τ_3 به ترتیب بردارهای کشش در امتداد محورهای مختصات کارتزین x'_3, x'_2, x'_1 باشند ملاحظه می‌شود. $\tau = \tau_1 e'_1 + \tau_2 e'_2 + \tau_3 e'_3$ همنه‌های بردار τ_1 در امتداد محورهای x_3, x_2, x_1 به ترتیب $\delta_{13}, \delta_{12}, \delta_{11}$ می‌نامیم. $\tau_1 = \delta_{11} e_1 + \delta_{12} e_2 + \delta_{13} e_3$ این روابط را می‌توان برای τ_1, τ_2, τ_3 بطور مشابه نوشت، با استفاده از علائم شاخص داریم : $\tau_i = \delta_{ij} e_j (i, j = 1,2,3)$

نه همنه کشش که بصورت δ_{ij} نمایش داده میشود، به نام تانسور کشش خوانده میشود.

تانسور کشش خود به خودی به این صورت تعریف میشود که حجم نخستین نمونه پس از کشش تغییر نکند، در حقیقت تغییر حجم به انبساط حرارتی مربوط می شود. تانسور کشش خود بخودی فقط برای تغییر در ساختمان بلوری به حساب می آید.این شرایط در رابطه زیر بیان می شود [٨].

$$\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = 0 \qquad (1)$$

که در آن ε_{ii}، همنه های قطر اصلی در تانسور کشش خود بخودی است. شکل تانسور کشش خود بخودی فقط

www.SID.ir

Archive of SID

به تقارن گروهی P از نخستین نمونه فاز و E فاز فروکشسان مربوط می‌شود [۹]. عملکرد F را، که عملکردی در P است ولی در E نیست تعریف می شود، عملکرد F تقارنی را نشان می‌دهد که نتیجه آن انتقال فاز است. بعضی حالتهای نفوذی در ساختمان فروکشسان‌ها همگی تقارن‌هایی در گروه تقارنی E دارند.

عملکرد F حالتی نفوذی به سایر حالتهای نفوذی دیگر انتقال می دهد. درجدول شکلهای تانسور کشش خود بخودی برای تمام حالتهای نفوذی در هر انتقال فاز فروکشسان آورده شده است[۱۰]. بطور کلی بیشتر از یک عملکرد در انتقال از یک حالت نفوذی معین S^1 به حالت نفوذی دیگر S^2 وجود دارد. اگر یک عملکرد F یک آینه تخت یا محور دو برابر کننده باشد، این صفحه با صفحه عمود بر محور دو برابر کننده تا دیوار مجاز نفوذی W ادامه دارد، زیرا در تمام شرایط صدق می‌کند. دیوار ′W تا عمود بودن بر دیوار W ادامه دارد. تعیین موقعیت کامل در دیوار ′W به مقادیر همنه های کامل تانسور کشش خود بخودی مربوط می‌شود[٤].

در موقع محاسبه زاویه افزایشی در حالتهای نفوذی کامل، تانسور کشش خود بخودی δ_{ij} را معرفی می‌کنند. تفاوت تانسور کشش خود بخودی در دو حالت مختلف نفوذی به صورت زیر تعریف می شود:

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

از دو رابطه (۱) و(۲) می‌توان نتیجه گرفت که:

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

تانسور کشش خود بخودی نقطة برگشت در عنصر تقارن است و به این ترتیب تانسور کشش خود بخودی تمام شکلهای بلوری متعلق به گروه لائو را دارد. و تنها تفاوت آنها در نقطة تقارن برگشتی است. در اینجا می‌توان نتیجه گرفت که نیازی به محاسبه برای انتقال فاز بلورها نیست و روشن می شود تنها برای یازده گروه لائو صورت می‌گیرد ؛ بنابراین محاسبه فقط برای یکی از انواع بلورها طبق انتقال فاز، صورت می‌پذیرد و نتیجه آن برای سایر آنها نیز معتبر است . به عنوان مثال در انتقال فاز از مکعبی 1 به مربعی[۱] ۱ سه نوع امکان فروکشسان وجود دارد: m3mF4/mmm و $\bar{4}3mF42m$ و 432F422. اگر در این مثال برای سه نوع حداکثر تقارن را در نظر بگیریم محاسبه انتقال m3mF4/mmm مشابه دو نوع دیگر است .

محاسبه زاویه افزایشی

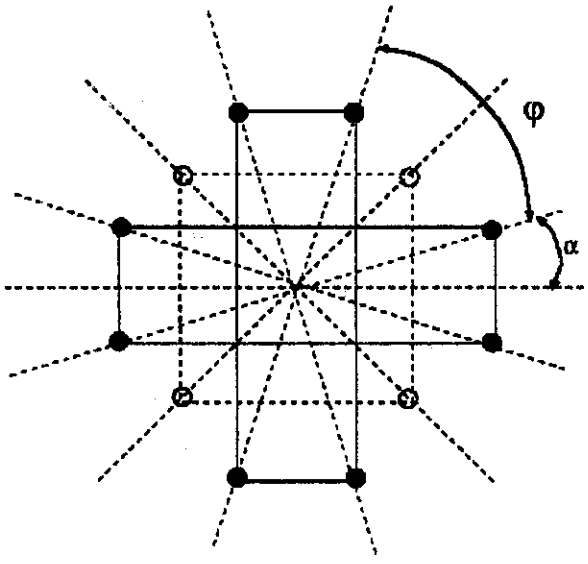
زاویه افزایشی φ برای دو حالت نفوذی در چرخش دیوارهٔ نفوذی مجاز در شکل ۳ نشان داده شده است. $\Delta\varphi^1$ و $\Delta\varphi^2$ به ترتیب مبدأ زاویه‌ای (طبق عقربه‌های ساعت) که از حالت نفوذی اول به حالت نفوذی دوم می‌رسد زاویه φ خواهد شد:

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

۱-Tetragonal

www.SID.ir

Archive of SID



شکل (۳) - افزایش زاویه در حالت 4/mmmFmmm (اندازه کشش خیلی کمتر از مقدار واقعی است)

۱) روش هندسی

در محاسبهٔ زاویهٔ افزایشی با روش هندسی مثال حالت 4/mmmFmmm را در نظر می گیریم ، و می توانیم شکل تانسور کشش خود بخودی را برای حالت اول پیدا کنیم [۱۰]:

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

در ساختمان نمونهٔ اصلی یک محور چهارتایی در جهت محور z ها دارد. در ساختمان فروکشسانها فقط یک محور دو تایی متقارن در جهت محور z وجود دارد. بنابراین یک عملکرد F برای مثال چرخشی حدود زاویه ۹۰ درجه نسبت به محور z دارد. با بکارگیری عملگر ε^1، شکل تانسور کشش خود بخودی برای حالت نفوذی ثانویه به دست می‌آید.

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

نقطهٔ ساختمانی نمونهٔ اصلی با مختصات [x,y,z] بر اثر جابه جایی نقطه ای به مختصات [x`,y`,z`] در

www.SID.ir

Archive of SID

ساختمان فروکشسان می‌رسد . هر دو این مختصات‌ها در دو حالت نفوذی بر حسب x,y,z در تانسور کشش خود بخودی بیان می‌شود .

DS1 $x`=x(1-a)\ ,\ y`=y(1+a)\ ,\ z=z`$ (۵)

DS2 $x`=x(1+a)\ ,\ y`=y(1-a)\ ,\ z=z`$ (۶)

می‌توانیم نتیجه بگیریم که در جهت محور zکشش مکانیکی وجود ندارد ، بنابراین صفحه z=0 محدوده ملاحظات ما خواهد بود . برای محاسبه بهتر است مربعی را در صفحه در نظر بگیریم که مرکز آن مبداء باشد و اضلاع آن به ترتیب موازی با محورهای x,y باشند . این مربع به مستطیل تغییر شکل خواهد داد . موقعیت آنها در شکل ۳ نشان داده شده است. مرکز مربع دارای مختصات [۰،۰،۰] و مختصات راس راست بالایی [۱،۱،۰] است. از این محاسبه بالا مختصات نقطه حالت نفوذی اولیه [۰،۱+a،۱-a] و در حالت نفوذی ثانویه [+a،۱-a ،۰] به دست می‌آید، واز روی شکل می توان نوشت :

$$\varphi = 90 - 2\alpha \qquad (۷)$$

از این معادله رابطه زیر به دست می آید :

$$\tan(\varphi/2)=\tan(45-\alpha)=(1-\tan\alpha)/(1+\tan\alpha) \qquad (۸)$$

وقتی α بسیارکوچک باشد می توان به طور تقریبی نتیجه گرفت :

$$\varphi = 2\alpha \qquad (۹)$$

در روش هندسی بسختی می توان به روش کلی رسید وسرانجام به مشکل برخورد خواهیم کرد. بعنوان مثال در انتقال مکعبی به لوزی رخ[۱] ، وقتی که محور لوزی رخ موازی [۱،۱،۱] است.

مثال بالا نشان می‌دهد که احتمالا ساده ترین حالت انتقال فاز است. و بنابراین ما نیاز به روش کلی برای محاسبه زاویه افزایشی داریم .

۲) روش جبری

اجازه دهید تانسور کشش خود بخودی ε^1 را برای حالت نفوذی اول و ε^2 را برای حالت نفوذی دوم در نظر بگیریم. حال ما فرض می‌کنیم که می‌تواند حوزهٔ دیواره مجاز میان این دو حالت وجود داشته باشد. یک بردار اختیاری x که در حوزه دیوار قرار دارد در نظر می‌گیریم. امتداد این بردار بعد از کشش خود بخودی طبق نوشته انیشتین در حالتهای نفوذی خاص خواهد شد:

DS1 : $\Delta x^1=\varepsilon^1_{ij}\, x_i\, x_j / |x|$ (۱۰)

DS2 : $\Delta x^2=\varepsilon^2_{ij}\, x_i\, x_j / |x|$ (۱۱)

۱-Trigonal

www.SID.ir

Archive of SID

به محض شکل گیری حوزه دیواره مجاز، باید

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

و معادله دیواره مجاز خواهد شد :

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

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

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

رابطهٔ (۱٤) معادله سطح یک مخروطی است ، که راس آن در مبدا قرار دارد ؛ اما فرض مخروطی که دارای نقطه تکین باشد ، از نظر فیزیکی قابل قبول نیست [٤] ؛ زیرا حوزه دیواره باید مستقل از انتخاب مبدا باشد و بنابراین این راه حل باید رد شود و لازم است که سطح مخروط به یک صفحه تبدیل شود . این شرط به صورت زیر بیان می 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 شکل گیری کوچک، زاویه افزایشی حالتهای نفوذی با دادن مقادیر ویژه تانسورهای مختلف کشش خود بخودی امکان پذیر است. اگر λ مقادیر ویژه تانسورهای مختلف کشش خود بخودی δ باشد، محاسبه جوابهای معادلهٔ عددی را می‌توان پیدا کرد.

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

که 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 زیر در می‌آید:

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

و مقادیر ویژه مورد نظر خواهد شد :

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

و بنابراین زاویه افزایشی می‌شود:

$$\varphi = \pm\sqrt{J_2} \qquad (۱۹)$$

www.SID.ir

Archive of SID

۳) محاسبه تمام زاویه‌های ممکن برای انتقال یک فاز

با روشی که گفتیم تمام زاویه‌های افزایشی برای انتقال فاز تمام فروکشسانها محاسبه می‌شود. برای هر انتقال فاز فروکشسان باید تمام جفت حالتهای نفوذی را در نظر گرفت. برای هر جفت نفوذی، محاسبه تانسور مختلف کشش خود بخودی لازم است تامعلوم شود آیا دترمینان آن صفر است یا خیر ؟ و برای محاسبه زاویه افزایشی رابطه (۱۹) مورد استفاده قرار می‌گیرد.

در فهرست نتایج که در جای خود آورده ایم ، تمام انواع انتقال فاز، کشش خود بخودی برای حالت نفوذی اول و تمام افزایش زاویه‌ای ممکن در هر انتقال فاز گزارش شده است .

یک مثال انتقال فاز مربعی۲ به سه شیب وجهی[۳] است. تانسورهای کشش خودبخودی برای چهار حالت نفوذی ممکن به صورت زیر است:

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

حال تانسورهای کشش خودبخودی برای تمام جفت‌های ممکن تخمین می زنیم :

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

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

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

تنها مواردی که جفت حوزه‌های S1 , S2 , S3 , S4 باشد دترمینان صفر به دست می‌آید. برای این جفتها نتایج مشابه و تنها زاویه[۴] ممکن برای این نوع انتقال فاز به دست می‌آید . $\varphi = \pm 2\sqrt{c^2+d^2}$

۳-Triclinic

www.SID.ir

Archive of SID

فهرست نتایج

نوع انتقال فاز	صفحه ها و محورهای تقارن	محورهای مختصات نسبت به محورهای تقارن در سلول بلوری	تانسور کشش خود بخودی e^1 در حالت نفوذی اول	زاویه افزایشی φ
مکعبی 1 به مربعی 1	432F422, $\bar{4}$ 3mF $\bar{4}$ 2m, m3mF4/mmm	x و لاز z میزانی خوردهای مکعب در S1 خوردهای مربعی (فروکشسان)میزانی x	$\begin{pmatrix} -2b & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 3\ \lvert b \rvert$
مکعبی به لوزی رخ	23F3,m3F$\bar{3}$,432F32, 43mF3m,m3mF3m	x و لاز z میزانی خوردهای مکعب در S1 خوردهای لوزی رخ (فروکشسان)میزانی [111]	$\begin{pmatrix} 0 & d & d \\ d & 0 & d \\ d & d & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{2}\ \lvert d \rvert$
مکعبی 1 به مکعب مستطیل (P)	432F222, $\bar{4}$ 3mF222, m3mFmmm	x و لاز Zمیزانی خوردهای مکعب	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm \lvert b-c \rvert$ $\varphi = \pm \lvert a-c \rvert$ $\varphi = \pm \lvert a-b \rvert$
مکعبی 1 به مکعب مستطیل (S)	432F222, $\bar{4}$ 3mF222, m3mFmmm	x و لاز z میزانی خوردهای مکعب در S1 خوردهای مکعب مستطیل (فروکشسان)میزانی x	$\begin{pmatrix} -2b & 0 & 0 \\ 0 & b & d \\ 0 & d & b \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\lvert d \rvert$ $\varphi = \pm \sqrt{(}\sqrt{b^2 + 2d^2}$
مکعبی 1 به تک شیب وجهی (P)	432F2(p), $\bar{4}$ 3mF2, m3mF2/m(p)	x و لاز z میزانی خوردهای مکعب در S1 2(فروکشسان)میزانی x	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & d \\ 0 & d & c \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\lvert d \rvert$ $\varphi = \pm \lvert b-c \rvert$ $\varphi = \pm \sqrt{a^2 - 2ab + b^2 + 2d^2}$ $\varphi = \pm \sqrt{a^2 - 2ac + c^2 + 2d^2}$

www.SID.ir

کتابخانه ...

احمد پیرداشی

Archive of SID

نوع انتقال فاز	صفحه ها و محورهای تقارن	محورهای مختصات نسبت به محورهای تقارن در سلول بلوری	تانسور کشش خود بخودی e^1 در حالت نفوذی اول	زاویه افزایشی φ
مکعبی 1 به تک شیب وجهی (S)	432F2(s), $\bar{4}$ 3mFm, m3mF2/m(s)	x و y لار z موازی خورهای مکعب در S1 محورهای تکشیب وجهی موازی [011]	$\begin{pmatrix} -2b & e & e \\ e & b & d \\ e & d & b \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{2}\ \lvert e\rvert$ $\varphi = \pm\sqrt{d^2+e^2}$ $\varphi = \pm\sqrt{9b^2+2d^2+6e^2}$ $\varphi = \pm\sqrt{9b^2+2d^2+4de+2e^2}$ $\varphi = \pm\sqrt{9b^2+2d^2-4de+2e^2}$
مکعبی 1 به سه شیب وجهی	432F1; $\bar{4}$ 3mF1,m3mF1	x و y لار z موازی خورهای مکعب	$\begin{pmatrix} a & f & e \\ f & b & d \\ e & d & c \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{e^2+f^2}$ $\varphi = \pm 2\sqrt{d^2+e^2}$ $\varphi = \pm\sqrt{2}\lvert e+f\rvert$ $\varphi = \pm\sqrt{2}\lvert d+e\rvert$ $\varphi = \pm\sqrt{2}\lvert d+f\rvert$ $\varphi = \pm 2\sqrt{d^2+f^2}$ $\varphi = \pm\sqrt{2}\lvert e-f\rvert$ $\varphi = \pm\sqrt{2}\lvert d-e\rvert$ $\varphi = \pm\sqrt{2}\lvert d-f\rvert$
مکعبی 2 به مکعب مستطیل	23F222,m3Fmmm	x و y لار z موازی محورهای مکعب	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}$	دیوارهای نفوذی بخار وجود ندارد .
مکعبی 2 به تک شیب وجهی	23F2,m3F2/m	x و y لار z موازی محورهای مکعب در S1 2(فرو کشان)موازی x	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & d \\ 0 & d & c \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\lvert d\rvert$

www.SID.ir

Archive of SID

نوع انتقال فاز	صفحه ها و محورهای تقارن	محورهای مختصات نسبت به محورهای تقارن در سلول بلوری	تانسور کشش خود بخودی ε^1 در حالت نفوذی اول	زاویه افزایشی φ
مکعبی 2 به سه شب وجهی	23F1,m3F$\bar{1}$	x و لاز z موازی محورهای مکعب	$\begin{pmatrix} a & f & e \\ f & b & d \\ e & d & c \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{e^2+f^2}$ $\varphi = \pm 2\sqrt{d^2+f^2}$ $\varphi = \pm 2\sqrt{d^2+e^2}$
شش گوشه ای 1 به مکعب مستطیل	622F22,6mmFmm2, $\bar{6}$m2Fmm2, 6/mmmFmmm	z موازی 6 یا $\bar{6}$ و x موازی 2 یا عمود بر m در S1 x موازی با محور مکعب مستطیل (فرو کشان)	$\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm\sqrt{3}\ \lvert a\rvert$
شش گوشه ای 1 به یک شیب وجهی (P)	622F2,6mmF2, $\bar{6}$m2Fm,6/mmmF2/m	z موازی 6 یا $\bar{6}$ و x موازی 2 یا عمود بر m	$\begin{pmatrix} -a & b & 0 \\ b & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\lvert b\rvert$ $\varphi = \pm\sqrt{3}\left(\sqrt{a^2+b^2}\right)$ $\varphi = \pm\lvert\sqrt{3}\,a+b\rvert$ $\varphi = \pm\sqrt{3}\left(\sqrt{a^2+b^2}\right)$ $\varphi = \pm\lvert\sqrt{3}\,a-b\rvert$
شش وجهی 1 به یک شیب وجهی (S)	622F2,6mmF2, $\bar{6}$m2Fm, 6/mmmF2/m	z موازی 6 یا $\bar{6}$ و x موازی 2 یا عمود بر m در S1 y موازی با محور یک شیب وجهی (فرو کشان)	$\begin{pmatrix} -a & 0 & c \\ 0 & a & 0 \\ c & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm\sqrt{3a^2+c^2}$ $\varphi = \pm\sqrt{3}\left(\sqrt{a^2+c^2}\right)$ $\varphi = \pm 2\lvert c\rvert$ $\varphi = \pm\sqrt{3}\left(\sqrt{a^2+c^2}\right)$ $\varphi = \pm\sqrt{3a^2+c^2}$

www.SID.ir

نوع انتقال فاز	صفحه ها و محورهای تقارن	محورهای مختصات نسبت به محورهای تقارن در سلول بلوری	تانسور کشش خود بخودی ε^1 در حالت نفوذی اول	زاویه افزایشی φ
شش وجهی 1 به سه شیب وجهی	622F1,6mmF1, $\bar{6}$m2F1, 6/mmmF$\bar{1}$	z موازی 6 یا $\bar{6}$ و x موازی 2 یا عمود بر m در S1 x موازی با محور شش وجهی (فروکشسان)	$\begin{pmatrix} -a & b & c \\ b & a & d \\ c & d & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{b^2+c^2}$ $\varphi = \pm 2\sqrt{b^2+d^2}$ $\varphi = \pm 2\sqrt{c^2+d^2}$ $\varphi=\pm\sqrt{3a^2+2\sqrt{3}ab+b^2+3c^2+2\sqrt{3}cd+d^2}$ $\varphi=\pm\sqrt{3a^2+2\sqrt{3}ab+b^2+c^2-2\sqrt{3}cd+3d^2}$ $\varphi=\pm\sqrt{3a^2-2\sqrt{3}ab+b^2+3c^2-2\sqrt{3}cd+d^2}$ $\varphi=\pm\sqrt{3a^2-2\sqrt{3}ab+b^2+c^2+2\sqrt{3}cd+3d^2}$
شش وجهی 2 به تک شیب وجهی	6F2, $\bar{6}$Fm,6/mF2/m	z موازی 6 یا $\bar{6}$	$\begin{pmatrix} -a & b & 0 \\ b & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm\sqrt{3(a^2+b^2)}$
شش گوشه ای 2 به سه شیب وجهی	6F1, $\bar{6}$F1,6/mF$\bar{1}$	z موازی 6 یا $\bar{6}$ و x موازی 2 یا عمود بر m	$\begin{pmatrix} -a & b & c \\ b & a & d \\ c & d & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{(c^2+d^2)}$
مربعی 1 به مکعب مستطیل (P)	422F222,4mmFmm2, $\bar{4}$2mF222, $\bar{4}$2mFmm2, 4/mmmFmmm	z موازی 4 یا $\bar{4}$ x موازی محور مکعب مستطیل (فروکشسان)	$\begin{pmatrix} -a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\,\lvert a\rvert$
مربعی 1 به مکعب مستطیل (S)	422F222,4mmFmm2, $\bar{4}$2mF222, $\bar{4}$2mFmm2, 4/mmmFmmm	z موازی 4 یا $\bar{4}$ و x موازی با 2 یا عمود بر m x زاویه ۴۵ درجه با محور مکعب مستطیل(فروکشسان)	$\begin{pmatrix} 0 & a & 0 \\ a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\,\lvert a\rvert$

Archive of SID

احمد بیرد لی

www.SID.ir

Archive of SID

نوع انتقال فاز	صفحه ها و محورهای تقارن	محورهای مختصات نسبت به محورهای تقارن در سلول بلوری	تانسور کشش خود بخودی e^1 در حالت نخودی اول	زاویه افزایشی φ
مربعی 1 به تک شیب وجهی (P)	422F2,4mmF2, $\bar{4}$ 2mF2, 4/mmm2/m	z موازی 4 یا $\bar{4}$ و x موازی با 2 یا عمود بر m	$\begin{pmatrix} -a & b & 0 \\ b & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2 \lvert b \rvert$ $\varphi = \pm 2\sqrt{(a^2+b^2)}$ $\varphi = \pm 2 \lvert a \rvert$
مربعی 1 به تک شیب وجهی (S)	422F2,4mmF2, $\bar{4}$ 2mF2, 4/mmm2/m	z موازی 4 یا $\bar{4}$ و y موازی با 2 یا عمود بر m در S1 y موازی با محور تک شیب وجهی (فروکشسان)	$\begin{pmatrix} -a & 0 & b \\ 0 & a & 0 \\ b & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm\sqrt{2}(\sqrt{2a^2+b^2})$ $\varphi = \pm 2 \lvert b \rvert$
مربعی 1 به تک شیب وجهی (S)	422F2,4mmF2, $\bar{4}$ 2mF2, 4/mmm2/m	z موازی 4 یا $\bar{4}$ و x موازی با 2 یا عمود بر m X زاویه ۹۰ درجه با محور مکعب مستطیل(فروکشسان)	$\begin{pmatrix} 0 & a & c \\ a & 0 & c \\ c & c & 0 \end{pmatrix}$	$\Phi = \pm 2\sqrt{(a^2+c^2)}$ $\varphi = \pm 2\sqrt{2} \lvert c \rvert$
مربعی 1 به سه شیب وجهی	422F1,4mmF1, $\bar{4}$ 2mF1, 4/mmmF1	z موازی 4 یا $\bar{4}$ و x موازی با 2 یا عمود بر m	$\begin{pmatrix} -a & b & c \\ b & a & d \\ c & d & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{b^2+c^2}$ $\varphi = \pm 2\sqrt{b^2+d^2}$ $\varphi = \pm 2\sqrt{c^2+d^2}$ $\varphi = \pm \sqrt{2}(\sqrt{2a^2+c^2-2cd+d^2})$ $\varphi = \pm \sqrt{2}(\sqrt{2a^2+c^2+2cd+d^2})$
مربعی2 به تک شیب وجهی	4F2, $\bar{4}$ F2,4/mF2/m	z موازی 4 یا $\bar{4}$	$\begin{pmatrix} -a & b & 0 \\ b & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{a^2+b^2}$
مربعی2 به سه شیب وجهی	4F1, $\bar{4}$ F1,4/mF $\bar{1}$	z موازی 4 یا $\bar{4}$	$\begin{pmatrix} -a & b & c \\ b & a & d \\ c & d & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{c^2+d^2}$

www.SID.ir

Archive of SID

نوع انتقال فاز	صفحه ها و محورهای تقارن	محورهای مختصات نسبت به محورهای تقارن در سلول بلوری	تانسور کشش خود بخودی e^l در حالت نفوذی اول	زاویه افزایشی φ
لوزی نخ 1 به تک شیب وجهی	32F2,3mFm, $\bar{3}$ mF2/m	z موازی 3 و y موازی با 2 یا عمود بر m در Si1	$\begin{pmatrix} -a & 0 & c \\ 0 & a & 0 \\ c & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm\sqrt{3(a^2+c^2)}$
لوزی نخ 1 به سه شیب وجهی	32F1,3mF1, $\bar{3}$ mF $\bar{1}$	y موازی با محور تک شیب وجهی (فرو کشان) z موازی 3 و x موازی با 2 یا عمود بر m	$\begin{pmatrix} -a & b & c \\ b & a & d \\ c & d & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{b^2+c^2}$ $\varphi = \pm\sqrt{3a^2-2\sqrt{3}ab+b^2+(c+\sqrt{3}d)^2}$ $\varphi = \pm\sqrt{3a^2+2\sqrt{3}ab+b^2+(c-\sqrt{3}d)^2}$
لوزی نخ 1 به سه شیب وجهی	32F1,3mF1, $\bar{3}$ mF $\bar{1}$	z موازی 3 و y موازی با 2 یا عمود بر m	$\begin{pmatrix} -a & b & c \\ b & a & d \\ c & d & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{b^2+d^2}$ $\varphi = \pm\sqrt{3a^2-2\sqrt{3}ab+b^2+3c^2-2\sqrt{3}cd+d^2}$ $\varphi = \pm\sqrt{3a^2+2\sqrt{3}ab+b^2+3c^2+2\sqrt{3}cd+d^2}$
لوزی نخ 2 به سه شیب وجهی	3F1, $\bar{3}$ F $\bar{1}$	z موازی 3	$\begin{pmatrix} -a & b & c \\ b & a & d \\ c & d & 0 \end{pmatrix}$	دیواره‌های مجاز نفوذی وجود ندارد.
مکعب مستطیل به تک شیب وجهی	222F2,mm2F2,mm2F m,mmmF2/m	x و لاو z موازی محورهای مکعب مستطیل y موازی با محورهای تک شیب وجهی(فرو کشان)	$\begin{pmatrix} -0 & 0 & b \\ 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\lvert b\rvert$
مکعب مستطیل به سه شیب وجهی	222F1,mm2F $\bar{1}$, mmmF $\bar{1}$	x و لاو zموازی محورهای مکعب مستطیل	$\begin{pmatrix} 0 & c & b \\ c & 0 & a \\ b & a & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{b^2+c^2}$ $\varphi = \pm 2\sqrt{a^2+c^2}$ $\varphi = \pm 2\sqrt{a^2+b^2}$

www.SID.ir

Archive of SID

نوع انتقال فاز	صفحه ها و محورهای تقارن	محورهای مختصات نسبت به محورهای تقارن در سلول بلوری	تانسور کشش خود بخودی e_{ij} در حالت نفوذی اول	زاویه افزایشی φ
تک شیب وجهی به سه شیب وجهی	2F1,mF1,2/mF1	y موازی 2 و عمود بر m	$\begin{pmatrix} 0 & a & 0 \\ a & 0 & b \\ 0 & b & 0 \end{pmatrix}$	$\varphi = \pm 2\sqrt{a^2 + b^2}$

www.SID.ir

Archive of SID

نتایج

هدف این مقاله محاسبهٔ زاویهٔ افزایشی حالتهای نفوذی است، در بهم پیوستن صفحه های نفوذی دیواره های مجاز ، چنانکه در تمام شرایط مکانیکی صدق کنند. فرمول حاصل از نتیجهٔ تابع تانسور کشش خود بخودی در حالت اول نفوذی برای ۳۰ نوع ممکن انتقال فاز فروکشسان، به دست آمده است که در دیوار نفوذی مشترک شکل گرفته است. در مواقعی که بیش از دو حالت نفوذی ممکن فروکشسان وجود داشته باشد، تمام جفت حالتهای نفوذی متفاوت پیشنهاد می‌شود . برای شش حالت انتقال فاز نتایج حاصل با نتایج به دست آمده در مأخذ[۷] توافق دارد و سایر موارد در منابع وجود ندارد . سایر نتایج به دست آمده عبارتند از:

۱ – تنها حالتهایی مورد نظر است ، که دیوارهٔ حوزهٔ مجاز بتواند شکل گیرد .

۲ – در تغییرات جزئی ، زاویه افزایش بستگی به مقادیر ویژهٔ تانسور کشش دارد .

۳ – تنها در دو حالت مکعبی 2 به مکعب مستطیل و لوزی رخ به سه شیب وجهی دیواره‌های نفوذی 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. Illustrated.cloth 6x9.59500(1998).
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.Matter72,305(1988).
6. V.Janovec , D.B.Litvin , L.Richterova , Ferroelectrics 157 , 75 (1994).
7. L.A.shuvalov,E.F.Dudnik , S.V.Wagin , Ferroelectrics 65,143(1985).
8. J.F.Nye , Physical Properties of Crystals , Clarendon , Oxford (1960).
9. J.C.Toledano , Ann . Telcommun . 29,249 (1974).
10. K.Aizu , J.Phys.Soc.Jpn.28 ,706(1970).

www.SID.ir