УДК 537.226

# ОБ ОБОБЩЕННОМ УСЛОВИИ РАВНОВЕСИЯ ФАЗ В ОРИЕНТАЦИОННО УПОРЯДОЧИВАЮЩИХСЯ СРЕДАХ

*В. Н. Нечаев, А. М. Рощупкин*

Определена конфигурационная сила, действующая на межфазную границу в ориентационно упорядочивающихся средах с учетом различия электрических и магнитных характеристик контактирующих фаз.

Условие равновесия кристаллических фаз, различающихся спонтанной деформацией $u_{ik}^{(s)}$ и упругими модулями $\lambda_{iklm}$, проанализировано Ройтбурдом [1]. Аналогичная задача для фаз, различающихся спонтанной поляризацией $\mathbf{P}_s$ и намагниченностью $\mathbf{M}_s$, решена Привороцким [2]. В настоящей работе результаты этих работ обобщаются на случай равновесия фаз с разными пьезоэлектрическими $\gamma_{ikl}$, электрострикционными $\eta_{iklm}$ и магнитнострикционными $\varkappa_{iklm}$ константами, а также с разной диэлектрической $\varepsilon_{ik}$ и магнитной $\mu_{ik}$ проницаемостью.

Выражение для конфигурационной силы, действующей на межфазную границу, важно как для анализа возможных доменных структур, ориентаций границ, так и для расчета взаимодействия границ с различными дефектами и внешними электромагнитными и упругими полями. Как частный случай решение этой задачи содержит условие равновесия фаз в ферроиках высших порядков [3]: ферробиэлектриках, ферробимагнетиках, ферроэластоэлектриках и т. д. Будем исходить из следующего выражения для плотности свободной энергии фаз [4]:

$$\mathscr{F}=\mathscr{F}_0+\frac{1}{2}\lambda_{iklm}u_{ik}u_{lm}-E_iP_{si}-H_iM_{si}-\frac{1}{8\pi}\varepsilon_{ik}E_iE_k-\frac{1}{8\pi}\mu_{ik}H_iH_k. \quad (1)$$

Здесь $\mathscr{F}_0$ — начальный уровень отсчета свободной энергии,

$$u_{ik}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_i}+\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right)-u_{ik}^{(s)}-\gamma_{jik}E_j-u_{ik}^{(E)}-u_{ik}^{(H)} \quad (2)$$

— упругая деформация, $\mathbf{u}$ — вектор полного геометрического смещения элементов кристалла,

$$u_{ik}^{(E)}=\eta_{iklm}E_lE_m,\quad u_{ik}^{(H)}=\varkappa_{iklm}H_lH_m \quad (3)$$

— стрикционная деформация кристалла, вызванная соответственно электрическим $\mathbf{E}$ и магнитным $\mathbf{H}$ полем.

Условие равновесия фаз можно получить из требования минимума свободной энергии

$$F=\int\limits_{V_1}\mathscr{F}_1dV+\int\limits_{V_2}\mathscr{F}_2dV \quad (4)$$

всей гетерофазной системы [5]. Здесь индексы «1», «2» относятся к различным фазам системы, находящимся в контакте. Полная вариация свободной энергии $\delta F$ в рассматриваемом случае связана как с варьированием поля смещений $u_i(\mathbf{r})$, так и с варьированием скалярного потенциала $\varphi(\mathbf{r})$

электрического поля $\mathbf{E}$ и скалярного потенциала $\psi(\mathbf{r})$ магнитного поля $\mathbf{H}$ ($\mathbf{H}=-\nabla\psi$ в силу уравнения магнитостатики $\mathrm{rot}\,\mathbf{H}=0$) и самой поверхности границы $S(\mathbf{r})$, разделяющей контактирующие фазы 1 и 2. При варьировании в (4) поверхности $S$ соответствующие изменения объемов фаз $\delta V_1=-\delta V_2$ можно рассматривать как происходящее в результате некоторого бесконечно малого непрерывного преобразования координат $x_i \to x'_i=x_i+\delta x_i$. Тогда вычисление полной вариации свободной энергии для каждой из фаз может быть проведено по очевидным образом измененной для трехмерного случая стандартной схеме, использующейся в теории поля при доказательстве теоремы Нётер (см. подробнее [6]).

Опуская индексы, относящиеся к различным фазам, вычисляем вариацию свободной энергии $\delta\psi$ для одной из фаз 1 или 2

$$\delta\psi=\delta\int\limits_V \mathscr{F}(u_{i,k}(x_i);\ \varphi_{,i}(x_i);\ \psi_{,i}(x_i))\,dV=$$

$$=\int\limits_{V'} \mathscr{F}(u'_{i,k}(x'_i);\ \varphi'_{,i}(x'_i;\ \psi_{,i}(x'_i))\,dV-\int\limits_V \mathscr{F}(u_{i,k}(x_i);\ \varphi_{,i}(x_i);\ \psi_{,i}(x_i))\,dV.$$

Производя замену переменной $x'_i=x_i+\delta x_i$ в первом интеграле, получаем

$$\delta\psi=\int\limits_V (\mathscr{F}(u'_{i,k}(x_i+\delta x_i);\ \varphi'_{,i}(x_i+\delta x_i);\ \psi_{,i}(x_i+\delta x_i))\left(1+\frac{\partial\delta x_i}{\partial x_i}\right)-$$

$$-\mathscr{F}(u_{i,k}(x_i);\ \varphi_{,i}(x_i);\ \psi_{,i}(x_i)))\,dV, \tag{5}$$

где $J(x_i)=\partial x'_i/\partial x_i=(1+\partial\delta x_i/\partial x_i)$ — главная линейная часть якобиана преобразования координат.

Представляя полные вариации функций $u_{i,k}$, $\varphi_{,i}$ и $\psi_{,i}$ в следующем виде:

$$\delta u_{i,k}=\bar{\delta}u_{i,k}+u_{i\ k,l}\delta x_l, \tag{6}$$

$$\delta\varphi_{,i}=\bar{\delta}\varphi_{,i}+\varphi_{,i,k}\delta x_k, \tag{7}$$

$$\delta\psi_{,i}=\bar{\delta}\psi_{,i}+\psi_{,i,k}\delta x_k, \tag{8}$$

где $\bar{\delta}u_{i,k}$ — вариация формы функции $u_{i,k}\bar{\delta}\varphi_{,i}$ и $\bar{\delta}\psi_{,i}$ — вариация формы функции соответственно $\varphi_{,i}$ и $\psi_{,i}$, и подставляя $\delta u_{i,k}$, $\delta\varphi_{,i}$, $\delta\psi_{,i}$ в (5), находим

$$\delta\psi=\int\limits_V\left(\frac{\partial}{\partial x_i}(\mathscr{F}\delta x_i)+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial u_{k,i}}\bar{\delta}u_k\right)+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\varphi_{,i}}\bar{\delta}\varphi\right)+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\psi_{,i}}\delta\psi\right)-\right.$$

$$\left.-\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial u_{k,i}}\right)\bar{\delta}u_k-\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\psi_{,i}}\right)\bar{\delta}\varphi-\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\psi_{,i}}\right)\bar{\delta}\psi\right)dV. \tag{9}$$

Первые три слагаемые в выражении (6) с помощью теоремы Гаусса преобразуются к интегралу по поверхности границы $S$

$$\delta\psi'=\int\limits_S\left(\mathscr{F}\delta x_i+\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial u_{k,i}}\bar{\delta}u_k+\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\varphi_{,i}}\bar{\delta}\varphi+\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\psi_{,i}}\bar{\delta}\psi\right)dS_i.$$

Здесь $dS_i=n_i dS$, $\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали к поверхности $S$. Далее, учитывая соотношения (6)—(8), преобразуем это выражение к виду

$$\delta\psi'=-\int\left(\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial u_{k,i}}u_{k,l}+\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\varphi_{,i}}\varphi_{,l}+\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\psi_{,i}}\psi_{,l}-\mathscr{F}\delta_{il}\right)\delta x_l n_i dS+$$

$$+\int\left(\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial u_{k,i}}\delta u_k+\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\varphi_{,i}}\delta\varphi+\frac{\partial\mathscr{F}}{\partial\psi_{,i}}\delta\psi\right)n_i dS. \tag{10}$$

Суммируя результаты варьирования свободной энергии в фазах 1 и 2, а также учитывая, что вектор $\mathbf{n}$ для одной из фаз совпадает с внешней нормалью, а для другой с внутренней, для полной вариации, относящейся к обеим фазам, будем иметь

$$\delta F = -\int\limits_{V_1+V_2} \left( \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial u_{k,\,i}} \right) \delta u_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \varphi_{,\,i}} \right) \delta \varphi + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \psi_{,\,i}} \right) \delta \psi \right) dV +$$

$$+ \int\limits_S \left[ \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial u_{k,\,i}} u_{k,\,l} + \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \varphi_{,\,i}} \varphi_{,\,l} + \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \psi_{,\,i}} \psi_{,\,l} - \mathscr{F} \delta_{il} \right] \delta x_l n_i dS -$$

$$- \int\limits_S \left[ \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial u_{k,\,i}} \delta u_k + \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \varphi_{,\,i}} \delta \varphi + \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \psi_{,\,i}} \delta \psi \right] n_i dS. \tag{11}$$

Здесь квадратные скобки используются для обозначения скачка стоящей в них функции при переходе через границу $S$ в направлении вектора нормали $\mathbf{n}$, $[a]=a_2-a_1$.

Требуя обращения в нуль объемной части вариации $\delta F$, из первых трех слагаемых в (11) получаем уравнение упругого равновесия $\partial \sigma_{ik}/\partial x_k=0$, уравнение электростатики $\operatorname{div} \mathbf{D}=0$ и магнитостатики $\operatorname{div} \mathbf{B}=0$.

Требуя обращения в нуль поверхностной части вариации $\delta F$, из (11) находим граничные условия к полученным выше уравнениям

$$\left[ \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial u_{i,\,k}} \right] n_k = [\sigma_{ik}]\, n_k = 0, \quad [\mathbf{D}]\, \mathbf{n} = 0, \quad [\mathbf{B}]\, \mathbf{n} = 0$$

и условие равновесия границ

$$\left[ \mathscr{F} \delta_{il} - \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial u_{k,\,i}} u_{k,\,l} - \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \varphi_{,\,i}} \varphi_{,\,l} - \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \psi_{,\,i}} \psi_{,\,l} \right] n_i = 0. \tag{12}$$

Фактически левая часть равенства (12) представляет собой выражение для конфигурационной силы $\mathbf{p}$, действующей на границу, которая в условиях равновесия равняется нулю в любой точке границы. Используя непрерывность на границе функций $u_i(\mathbf{r})$, $\varphi(\mathbf{r})$, $\psi(\mathbf{r})$, после несложных алгебраических преобразований конфигурационную силу $\mathbf{p}$ приводим к виду

$$\mathbf{p} = \left( [\mathscr{F}] - \left\{ \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial u_{i,\,k}} \right\} [u_{i,\,k}] - \left\{ \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \varphi_{,\,i}} \right\} [\varphi_{,\,i}] - \left\{ \frac{\partial \mathscr{F}}{\partial \psi_{,\,i}} \right\} [\psi_{,\,i}] \right) \mathbf{n}, \tag{13}$$

где фигурные скобки обозначают полусумму значений $\{a\}=(a_1+a_2)/2$ стоящей в них величины по обе стороны от границы.

Наконец, учитывая явный вид $F$ (1), получаем окончательно

$$p = \mathbf{pn} = -\{\mathbf{E}\}[\mathbf{P}_s] - \{\mathbf{H}\}[\mathbf{M}_s] - \{\sigma_{ik}\}[u_{ik}^{(s)}] + \frac{1}{2}[\lambda_{iklm}]\, \overleftrightarrow{u_{ik}u_{lm}} -$$

$$- \frac{1}{8\pi}[\varepsilon'_{ik}]\, \overleftrightarrow{E_i E_k} - \frac{1}{8\pi}[\mu'_{ik}]\, \overleftrightarrow{H_i H_k} - [\gamma_{ikl}]\, \overleftrightarrow{E_i \sigma_{kl}} + \{u_{ik}^{(E)} + u_{ik}^{(H)}\}[\sigma_{ik}] + [\mathscr{F}_0]. \tag{14}$$

Здесь $\varepsilon'_{ik}=\varepsilon_{ik}+8\pi\eta_{lmik}\sigma_{lm}$, $\mu'_{ik}=\mu_{ik}+8\pi\varkappa_{lmik}\sigma_{lm}$, $\overleftrightarrow{ab}=(a_1b_2+a_2b_1)/2$. Первые четыре слагаемые в выражении (14) в несколько иной форме представлены в работах [1, 2]. Дополнительные вклады в конфигурационную силу, полученные в данной работе, приводят к принципиально новым эффектам, связанным с границами фаз (доменов) в сегнетоэлектриках и ферромагнетиках, а именно: появляется принципиальная возможность заданным образом изменять собственные частоты колебаний границ внешними полями, возможно параметрическое возбуждение колебаний границ переменными внешними полями, влияние электрических полей на динамику некоторых типов границ в ферромагнетиках и т. д.

Выражение (14) решает задачу о равновесии фаз в ферроиках высших порядков и, следовательно, позволяет определить ориентацию границ и возможные типы доменных структур в таких кристаллах. Для этого в выражении (14) нужно сохранить соответствующее слагаемое, например для анализа условий равновесия фаз в ферробиэлектриках — пятое.

Литература


[1] *Ройтбурд А. Л.* ДАН СССР, 1971, т. 197, № 5, с. 1051—1054.
[2] *Привороцкий И. А.* ЖЭТФ, 1969, т. 56, № 6, с. 2129—2142.
[3] *Изюмов Ю. А., Сыромятников В. Н.* Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1984, с. 149.
[4] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 620 с.
[5] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1976, ч. 1. 583 с.
[6] *Косилов А. Т., Перевозников А. М., Рощупкин А. М.* Поверхность, 1983, № 10, с. 36—51.



Воронежский
политехнический институт
Воронеж



Поступило в Редакцию
24 февраля 1988 г.
В окончательной редакции
18 мая 1988 г.