Metallophysics and Advanced Technologies
Металофіз. новітні технол.
Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2024, vol. 46, No. 1, pp. 15–21
https://doi.org/10.15407/mfint.46.01.0015
Reprints available directly from the publisher

PACS numbers: 71.10.Fd, 75.10.Dg, 75.30.Et, 75.50.Lk, 75.50.Ww, 75.60.Ch, 75.80.+q

Ефекти «орбітального скла». 4. Термострикція. Механічні властивості. Домени (стінки) Ґалуа. Сонари

О. І. Міцек, В. М. Пушкар

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна

Сеґреґація орбітальних моментів $\mathbf{L}_\mathbf{r}$ утворює «орбітальне скло» (OG). Ковалентні взаємодії Γ_k елементів групи Ґалуа (GG-j) $\mathbf{L}^j_\mathbf{r}$ ($j = x, y, z = 1, 2, 3$) виражаються через елементарні збудження $E_\mathbf{q}$ всередині j-домени (GG-j). Зв'язок $E_\mathbf{q}$ з фононами перенормовує частоту звуку $\omega_\mathbf{k}$ (додається функціонал $\Delta\omega_\mathbf{k}(E_\mathbf{q})$). Межа W між доменами ($j = y, z$) завтовшки $\delta_W = (\Gamma/K)^{1/2}$ і з енергією $E_W = (\Gamma K)^{1/2}$ визначається константою K анізотропії j-домени OG. Маса межі ($m_W \propto E_W$) і її стабілізація P_W задають спектер коливань $E_W(W_{ij})$. Його можна використовувати як неферомагнетні сонари.

Ключові слова: сеґреґація орбітальних моментів, «орбітальне скло» (OG), коливання OG-j-домен і меж (W_{ij}) між ними, неферомагнетні сонари.

Orbital-moments' segregation $\mathbf{L}_\mathbf{r}$ makes 'orbital glass' (OG). Covalent interactions Γ_k of Galois-group elements (GG-j) $\mathbf{L}^j_\mathbf{r}$ ($j = x, y, z = 1, 2, 3$) express by elementary excitations $E_\mathbf{q}$ in j-domain (GG-j). Connection $E_\mathbf{q}$ with phonons renormalizes sound frequency $\omega_\mathbf{k}$ (functional $\Delta\omega_\mathbf{k}(E_\mathbf{q})$ is added). Wall between domains ($j = y, z$) with thickness $\delta_W = (\Gamma/K)^{1/2}$ and energy $E_W = (\Gamma K)^{1/2}$ is determined by constant K of j-domain anisotropy. Wall mass ($m_W \propto E_W$) and its stabilization P_W give oscillation spectrum $E_W(W_{ij})$. It may be used as non-ferromagnetic sonars.

Key words: orbital-moments' segregation, orbital glass (OG), oscillations of OG-j-domains and walls (W_{ij}) between them, non-ferromagnetic sonars.

Corresponding author: Oleksandr Ivanovych Mitsek
E-mail: amitsek@gmail.com

G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine

Citation: O. I. Mitsek and V. M. Pushkar, 'Orbital Glass' Effects. 4. Thermostriction. Mechanical Properties. Galois Domains (Walls). Sonars, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **46**, No. 1: 15–21 (2024) (in Ukrainian). DOI: 10.15407/mfint.46.01.0015

(Отримано 17 листопада 2023 р.; остаточн. варіант —5 грудня 2023 р.)

1. ВСТУП

Фази на атомній фазовій діяграмі (АФД) відрізняються термострикцією [1]. Ця характеристика (деформація $u_{ij}(T)$ як функція температури T) ідентифікує фази АФД і переходи між ними. Вона має проявлятися за сеґреґації орбітальних моментів $\mathbf{L}_{\mathbf{r}}$, утворюючи «орбітальне скло» (OG) [2].

Розраховуємо $u_{ij}(T)$ однозначно, використовуючи мову багатоелектронних операторних спінорів (БЕОС) [3].

Орбітальне скло (OG) займає об'єм V_G металу (або стопу). Ковалентні зв'язки H^{cov} між вузлами $\mathbf{r}$ і $\mathbf{r}+\mathbf{p}$ виділяють в Ni, U^{238} групи Ґалуа, які складаються з окремих $\mathbf{L}_{\mathbf{r}}$ всередині V_G(Ni) або пар ($\mathbf{L}_{\mathbf{r}}\uparrow$, $\mathbf{L}_{\mathbf{r+p}}\downarrow$) ($U^{238}$), типу спінових антиферомагнетиків [1,3]. Групи Ґалуа (GG-j) із спонтанними деформаціями $u_{jj}(s)$, тобто термострикцією u_j для $j = 1, 2, 3 = x, y, z$, є в кубічних Ni, Co, U^{238}. Типи сеґреґацій (GG-j, де $j = x, y, z$), створюють АФД реального металу (ряд $3d$ = Co, Ni, ...) або РЗМ ($4f$ = Dy, ...). Домени, що з'являються (групи Ґалуа із $j = x, y, z$) розділені доменними (Ґалуа) межами $W_{ij}(x)$, наприклад, між (GG-3) і (GG-2 (y)). Слідуючи Акулову–Вонсовському, представляємо $W_{yz}(x0z)$ товщиною $\delta_{yz}(x)$ з енергією $E_W[W(x)]$ за аналогією з феромагнетною доменною структурою [1].

Термострикція (в нашій теорії) використовує ідею Акулова на мові БЕОС як для однодоменного OG, так і для багатодоменного V_G. У звуковому полі

$$u_{ij}(t) \approx \exp(i\omega t) \approx W_{ij}(t) \tag{1.1}$$

вона сприймається як коливання $V_G(t)$. Ці хвилі сприймаються сонарами; тому створення сонарів на OG цілком реальне.

Термопружність Ґалуа (тобто OG) теоретично аналогічна магнетопружності [3]. Немагнетні OG-сонари можуть виявитися простішими (й ефективнішими), ніж магнетострикційні. Зміщення W_{ij} ($t > t_0$) змінює спостережувані власні частоти $V_G(t)$.

2. СТАТИЧНА ТЕРМОСТРИКЦІЯ

Область OG (об'єм V_G стопу) створює ковалентні взаємодії елементів групи Ґалуа:

$$H^{\text{cov}} = -\sum \Gamma(\mathbf{p})\mathbf{L}_{\mathbf{r}}\mathbf{L}_{\mathbf{r+p}} \ (\text{Ni}, \ldots) \tag{2.1}$$

з функціональним зв'язком

$$\Gamma(\mathbf{p}) = \Gamma_{\mathbf{p}} + (\nabla\Gamma_{\mathbf{p}})\mathbf{u} \tag{2.2}$$

між йонами Ni (одиночними елементами GG-3). Пари ($\mathbf{L}\uparrow$, $\mathbf{L}\downarrow$), елементи (GG-3), для U^{238} (немагнетного) змінюють ковалентний зв'язок

$$H^{\text{cov}}[\mathbf{r},\mathbf{p}] = -\sum \Gamma(\mathbf{p})\mathbf{L}_{\mathbf{r}\uparrow}\mathbf{L}_{\mathbf{r}+\mathbf{p}\downarrow} \tag{2.3}$$

з функціоналом (2.2), який має складнішу симетрію (анізотропію), ніж одиничні [Ni ($\mathbf{L}_\mathbf{r}$)].

Для переходу до динаміки вводимо звук $u_{ij}(t)$ і фонони:

$$u(r,t) = \sum_k (b_k^+(t)e^{ikr} + b_k(t)e^{-ikr}), \quad [b_k, b_q^+] = \delta_{kq}\,. \tag{2.4}$$

Статика вводиться через термодинамічний потенціял (ТДП):

$$\Delta\Phi(u_{ij}) = [\lambda]\sum_{\mathbf{r},\mathbf{p}} \Gamma'(\mathbf{p})\mathbf{L}_\mathbf{r}^j\mathbf{L}_{\mathbf{r}+\mathbf{p}}^j u_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{p})\,. \tag{2.5}$$

Вводимо термострикційну константу:

$$\lambda_{ij}(T) = \sum_{\mathbf{r},\mathbf{p}} \Gamma'(\mathbf{p}) < \mathbf{L}_\mathbf{r}^j\mathbf{L}_{\mathbf{r}+\mathbf{p}}^j >\,. \tag{2.6}$$

Сумарний ТДП —

$$\Phi(\hat{u}) = \Delta\Phi + C_{jj}u_{jj}^2 / 2\,. \tag{2.7}$$

Варіювання його дає термострикцію:

$$u_{jj}(T) = \lambda_{jj}(T) / C_{jj} \tag{2.8}$$

для (GG-3).

Мікророзрахунки (БЕОС) для моря фононів $b_\mathbf{q}$ з Гамільтоніяном

$$H^b = \sum_\mathbf{q} \hbar\omega_\mathbf{q} b_\mathbf{q}^+ b_\mathbf{q} \tag{2.9}$$

почнемо для Ni (або Co), вводячи для OG зв'язок з фононами:

$$H^{\text{in}} = \sum_{\mathbf{r},\mathbf{p}} \lambda_u \mathbf{L}_\mathbf{r}^j(b_\mathbf{r} + b_\mathbf{r}^+)\mathbf{L}_{\mathbf{r}+\mathbf{p}}, \quad \mathbf{L} = \{L_0^z + L_1^{xy}\}\,. \tag{2.10}$$

Усереднюємо (2.10) по частинах:

$$\begin{gathered} < H^{\text{in}} >= \lambda_0 < L_0^z L_0^z > + \sum_\mathbf{p} \lambda(\mathbf{p}) < \mathbf{L}_\mathbf{r}^j \mathbf{L}_{\mathbf{r}+\mathbf{p}}^j > = \\ = \lambda_0 L_T^2 + \Delta\lambda(T) = \lambda_{33}(T), \quad < L_0^z >= L_T. \end{gathered} \tag{2.11}$$

Одержуємо анізотропію (GG-3) з константою

$$K \cong \lambda_{33} u_{33} \,. \tag{2.12}$$

3. ДИНАМІКА ТЕРМОСТРИКЦІЇ

Коливання ґратниці OG у звуковому полі $\omega_\mathbf{k}$ почнемо розглядати з випадку Ni. Елементи групи (GG-3):йон

$$H^{\mathrm{L}} = \sum_{\mathbf{k}} \Gamma_{\mathbf{k}} L_{\mathbf{k}}^{+} L_{\mathbf{k}}^{-} + \Gamma_0 L_0^z L_0^z, \;\; [L_{\mathbf{k}}^{+}, L_{\mathbf{q}}^{-}] = 2L_0^z \delta_{\mathbf{kq}} \tag{3.1}$$

у звуковому полі (фононів)

$$H^{\mathrm{b}} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{+} b_{\mathbf{k}}, \;\; [b_{\mathbf{k}}^{+}, b_{\mathbf{q}}] = \delta_{\mathbf{kq}} \,. \tag{3.2}$$

Їхня взаємодія

$$H^{\mathrm{in}} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} L_{\mathbf{k}}^{+} (b_{\mathbf{k}}^{+} L_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-} + b_{\mathbf{k}} L_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{-}), \;\; \gamma_{\mathbf{q}} \approx \Gamma_{\mathbf{kq}} = [\nabla\Gamma(\mathbf{p})\mathbf{u}_{\mathbf{p}}]_{\mathbf{kq}} \tag{3.3}$$

виражається на мові БЕОС через Ґрінові функції.

Вводимо для Ґрінових функцій

$$G_{\mathbf{kq}}^{b} = \langle\langle b_{\mathbf{k}} \big| b_{\mathbf{q}}^{+} \rangle\rangle \tag{3.4}$$

рівняння руху

$$(E - \omega_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}}^{b} - \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{kq}}^{1} = \delta_{\mathbf{kq}}, \;\; G_{\mathbf{k}}^{1} = \langle\langle L_{\mathbf{k}}^{+} L_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-} \big| b_{\mathbf{q}}^{-} \rangle\rangle \tag{3.5}$$

і далі

$$(E - \Gamma_{\mathbf{k}} + \Gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) G_{\mathbf{k}}^{1} - \sum_{\mathbf{p}'} \gamma_{\mathbf{p}'} G_{\mathbf{kqp}'}^{2} = 0 \tag{3.6}$$

через Ґрінову функцію другого порядку

$$G_{\mathbf{kqp}}^{2} = \langle\langle L_{\mathbf{p}}^{+} L_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{p}}^{z} L_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-} b_{\mathbf{k}} \big| b_{\mathbf{p}}^{+} \rangle\rangle \,. \tag{3.7}$$

Її апроксимуємо:

$$G^{2} \cong L N_{\mathbf{p}}^{m} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{k}-\mathbf{q}} G_{\mathbf{kq}}^{0} \,. \tag{3.8}$$

Підставляємо (3.8) в (3.6) і далі в (3.5).

Перенормуємо частоти звуку (OG): $\omega_\mathbf{k} \to \omega_\mathbf{k} + \Delta\omega_\mathbf{k}$,

$$\Delta\omega_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{q}} (\gamma_{\mathbf{q}}^{2} / \Gamma_{\mathbf{k}}) L_0 N_{\mathbf{q}}^{m} \,, \tag{3.9}$$

де

$$N_{\mathbf{q}}^{m} = \left\langle L_{\mathbf{q}}^{-} L_{\mathbf{q}}^{+} \right\rangle = \bar{N}_{\mathbf{q}} J(\Gamma_{\mathbf{q}}) \tag{3.10}$$

є функціонал числа станів власних хвиль ґратниці OG.

Вплив (3.9) на сонари є більш слабким, аніж магнетострикційний. Але вплив (3.10) на динамічні та кінетичні властивості Ni й інших металів (які мають OG) є істотним і має враховуватися.

4. ТЕРМОСТРИКЦІЯ U^{238}

Парні елементи (**L**↑, **L**↓) групи (GG-3) в стопах U типу U–Co [4] компенсують магнетний момент (спін $\mathbf{S_r} \to 0$) і зменшують магнетострикцію. Немагнетний U^{238} цим привабливий для техніки електрозвуку.

Елементи (GG-3)

$$H^{\mathrm{L}} = \Gamma_0 L^z_{\uparrow 0} L^z_{\downarrow 0} + \sum_{\mathbf{k}} \Gamma_{\mathbf{k}} (L^+_{\mathbf{k}\uparrow} L^+_{\mathbf{k}\downarrow} + L^-_{\mathbf{k}\uparrow} L^-_{\mathbf{k}\downarrow}) \tag{4.1}$$

взаємодіють зі звуком $(b_{\mathbf{k}}, b^+_{\mathbf{k}})$:

$$H^{\mathrm{in}} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) (L^+_{\mathbf{q}\uparrow} b_{\mathbf{k}} L^+_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} + L^-_{\mathbf{q}\downarrow} b^+_{\mathbf{k}} L^-_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}) \tag{4.2}$$

через Ґрінові функції. Рівняння для них —

$$G^0_{\mathbf{k}} = \langle\langle b_{\mathbf{k}} | b^+_{\mathbf{k}} \rangle\rangle, \quad (E - \omega_{\mathbf{k}}) G^0_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} G^1_{\mathbf{qk}} = 1\,, \tag{4.3}$$

де функція першого порядку —

$$G^1_{\mathbf{qk}} = \langle\langle L^-_{\mathbf{q}\uparrow} L^-_{(\mathbf{q}-\mathbf{k})\downarrow} | b^+_{\mathbf{k}} \rangle\rangle\,. \tag{4.4}$$

Маємо наступне рівняння:

$$(E - \Gamma_{\mathbf{q}} - \Gamma_{\mathbf{q}-\mathbf{k}})^{-1} G^{-1}_{\mathbf{qk}} - \sum \gamma_{\mathbf{p}} G^2_{\mathbf{kqp}} = 0\,. \tag{4.5}$$

Ґрінову функцію другого порядку, що входить в (4.5), апроксимуємо

$$G^2_{\mathbf{kqp}} = \langle\langle [(L^+_{\mathbf{q}\uparrow} L^+_{(\mathbf{q}+\mathbf{k})\downarrow}), (L^-_{\mathbf{p}\uparrow} L^-_{(\mathbf{p}+\mathbf{k})})]_-\, b_{\mathbf{p}} | b^+_{\mathbf{k}} \rangle\rangle \tag{4.6}$$

після комутації.

5. МЕЖІ ДОМЕН ҐАЛУ А В ПОЛІ ЗВУКУ

На власні частоти $E_{\mathrm{k}}(j)$ кожної (GG-j)-домени накладаються спектри руху стінки $W_{ij}(r,t)$. Виберемо $W_{yz}(x)$ у вигляді площини, що розділяє (y, z)-домени. Її рух — вздовж ($0z$) $y = 0$ ($0 < x < \infty$).

Враховуючи локальну деформацію $u_{zz}(3)$ домени (GG-3), вводимо константу анізотропії (одновісної) $K \propto u_{33}(3)$. За теорією доменних стінок [7] одержуємо товщину $\delta_W(K)$ і енергію E_W стінки $W_{yz}(x)$:

$$\delta_W \cong (\Gamma / K)^{1/2}, \quad E_W \cong (\Gamma K)^{1/2} \cong m_W . \tag{5.1}$$

Для маси стінки m_W маємо рівняння її руху:

$$m_W \ddot{z} + \gamma \dot{z} + P_z = u_{zz}(t) \propto e^{i\omega t} , \tag{5.2}$$

де P — енергія стабілізації стінки на рівні.

Розв'язок (5.2)

$$z(t) = u_{zz}(t) / [(m_W \omega^2 - P) + \gamma\omega], \quad P = \omega_0^2 / m_W \tag{5.3}$$

виділяє власну частоту стінки ω_0 і її гальмування γ. Коливання стінки $\omega \to \omega_0$ випромінюють звук з частотою ω_0 або резонансно поглинають його. Це основа роботи сонара на частоті $\omega \to \omega_0$ (матеріял Ni). Матеріял U^{238} потребує більш чіткого розрахунку $K(u_{zz})$ і буде розглянутий в іншому місці.

6. ВИСНОВКИ

1. Термострикція OG (λ_{ij}) виражається через параметер L_T сеґреґації орбітальних моментів $\mathbf{L}_r$ (GG-3) і густину їхніх збуджень $E_{\mathbf{q}}$.
2. Домени сеґреґацій (GG-j) групи Ґалуа (j) мають власні коливання $E_{\mathbf{q}j}$. Їхній зв'язок з фононами перенормовує частоту звуку в області V_G, зайнятій доменою (GG-j), на $\Delta\omega_{\mathbf{k}}(E_{\mathbf{q}j})$.
3. Стінка W_{0j} між доменами (i, $j = y$, z) кубічного металу має власні коливання E_W.
4. Власні коливання j-домен Ґалуа ($E_{\mathbf{k}j}$) і стінки між ними (W_{sj}) E_W можуть використовуватися для сонарів OG-природи.
5. Константа одновісної анізотропії j-домени Ґалуа (GG-j), визначається тензором термострикції λ і локальною деформацією u_{jj} домени j в об'ємі OG (V_j).

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. С. В. Вонсовский, *Магнетизм* (Москва: Наука: 1971).
2. О. І. Міцек, В. М. Пушкар, *Металофіз. новітні технол.*, **45**, № 6, 717 (2023).
3. А. И. Мицек, *Фазовые переходы в кристаллах с магнитной структурой* (Киев: Наукова думка: 1989).
4. А. В. Дерягин, А. В. Андреев, *ЖЭТФ*, **71**, № 9: 1166 (1976).
5. Н. Чеботарев, *Основы теории Галуа* (Москва: Государственное технико-теоретическое издательство: 1934).
5. Дж. Займан, *Электроны и фононы* (Москва: Издательство иностранной литературы: 1962).
6. А. И. Мицек, В. Н. Пушкарь, *Реальные кристаллы с магнитным порядком* (Киев: Наукова думка: 1978).

REFERENCES

1. S. V. Vonsovsky, *Magnetizm* [Magnetism] (Moskva: Nauka: 1971) (in Russian).
2. O. I. Mitsek and V. M. Pushkar, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 6, 717 (2023) (in Ukrainian).
3. A. I. Mitsek, *Fazovyye Perekhody v Kristallakh s Magnitnoy Strukturoy* [Phase Transitions in Crystals with a Magnetic Structure] (Kiev: Naukova Dumka: 1989) (in Russian).
4. A. V. Deryagin and A. V. Andreev, *ZhETF*, **71**, No. 9: 1166 (1976) (in Russian).
5. N. Chebotarev, *Osnovy Teorii Galua* [Basics of Galois Theory] (Moskva: Gosudarstvennoye Tekhniko-Teoreticheskoye Izdatel'stvo: 1934) (in Russian).
5. J. M. Ziman, *Ehlektrony i Fonony* [Electrons and Phonons] (Moskva: Izdatel'stvo Inostrannoy Literatury: 1962) (in Russian).
6. A. I. Mitsek and V. N. Pushkar, *Real'nyye Kristally s Magnitnym Poryadkom* [Real Crystals with Magnetic Order] (Kiev: Naukova Dumka: 1978) (in Russian).