

2. *Itterbeek A. Van Deynse, N. Van, Herinckx C.* Measurements of the magnetic anisotropy of single crystals of Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 and compounds of them between room temperature and 1.3 K // *Physica*. 1966. № 32. P. 2123–2128.
3. *Mansfield R.* The magnetic susceptibility of bismuth telluride // *Proc. Phys. Soc.* 1960. № 74. P. 599–603.
4. *Matyas M.* The susceptibility of selenides and tellurides of heavy elements // *Czechosl. J. Phys.* 1958. № 8. P. 309–314.

REFERENCES

1. *Grabov V. M.* Jenergeticheskij spektr i mehanizmy relaksatsii nositelej zarjada v legirovannyh kristal-lah vismuta, sur'my i splavah vismut–sur'ma: Dis. ... d-ra fiz.-mat. nauk. SPb.: Izd-vo RGPU im. A. I. Gert-sena, 1998. 528 s.
2. *Itterbeek A. Van, Deynse N. Van, Herinckx C.* Measurements of the magnetic anisotropy of single crystals of Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 and compounds of them between room temperature and 1.3 K // *Physica*. 1966. № 32. P. 2123–2128.
3. *Mansfield. R.* The magnetic susceptibility of bismuth telluride // *Proc. Phys. Soc.* 1960. №74. P. 599–603.
4. *Matyas M.* The susceptibility of selenides and tellurides of heavy elements // *Czechosl. J. Phys.* 1958. № 8. P. 309–314.

A. B. Ляпцев

СИММЕТРИЯ РЕГУЛЯРНЫХ И ХАОТИЧЕСКИХ ДВИЖЕНИЙ В ЗАДАЧАХ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ. РОТАТОР В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Предложен метод исследования симметрии регулярных и хаотических движений в задачах нелинейной динамики. При регулярных движениях исследуется симметрия фазовой траектории системы. При хаотических движениях симметрия исследуется при помощи сечений Пуанкаре. Показано, что для одномерного ротатора, во внешнем периодическом поле, группа симметрии уравнений в зависимости от параметров внешнего воздействия изоморфна различным точечным группам. При этом симметрия решений может быть такой же, как симметрия исходной группы или нарушаться в зависимости от параметров задачи.

Ключевые слова: нелинейная динамика, динамический хаос, сечения Пуанкаре, симметрия.

A. Liaptsev

Symmetry of Regular and Chaotic Motions in Nonlinear Dynamic Problems. Rotator in Periodic Field

The method of investigation of symmetry of regular and chaotic motions in nonlinear dynamic problems is suggested. The symmetry of regular motions is investigated by means of the analysis of phase trajectory. The symmetry of chaotic motions is investigated by means of the analysis of Poincare cross-sections. It is shown that for a one-dimensional rotator which is under the influence periodic external field, group of symmetry of the equations depending on parameters of the field is isomorphic to a variety of point groups. At the same time the symmetry of the solutions might be the same as the symmetry of the initial group or violated depending on the parameters of the problem.

Keywords: nonlinear dynamics, dynamic chaos, the Poincare cross-section, of symmetry.

В работе [4] мы рассматривали симметрию состояний, возникающих в задачах нелинейной динамики, на примере нелинейного осциллятора, находящегося под воздействием гармонического поля (уравнение Дуффинга). При наличии диссипации группа симметрии данной задачи, помимо тождественного элемента, содержит лишь элемент, подобный зеркальному отражению, и является изоморфной точечной группе C_s . В пределе бесконечно малой диссипации уравнение становится инвариантным относительно операции обращения времени, и группа симметрии задачи расширяется до группы, изоморфной точечной группе C_{2v} . Как известно [1], решения задач нелинейной динамики могут иметь характер регулярных (периодических) движений, или хаотических движений. Наиболее наглядно симметрия регулярных движений может быть представлена при изображении траектории движения в фазовом пространстве, которое для уравнения Дуффинга является трехмерным. Симметрия хаотических состояний наиболее наглядно представляется при изображении сечений Пуанкаре. Анализ численных решений уравнения Дуффинга позволил сделать следующие выводы:

1. При малой диссипации хаотические решения в вероятностном смысле являются полносимметричными по отношению к группе симметрии исходного уравнения, в то время как регулярные решения могут быть как полносимметричными, так и с нарушением симметрии;

2. В пределе малой диссипации наблюдается также симметрия, связанная с обратимостью движения, что эквивалентно расширению группы симметрии;

3. При увеличении диссипации симметрия может нарушаться также и для хаотических решений.

На наш взгляд, представляют интерес исследования аналогичных, но более сложных систем, имеющих «более богатую» симметрию. Соответствующие группы симметрии, в частности, могут иметь двумерные неприводимые представления. В аналогичных системах, описываемых уравнениями квантовой механики, в этом случае появляются вырожденные состояния. Исследование возможного проявления подобной симметрии при хаотических движениях в задачах классической динамики, на наш взгляд, также может оказаться интересным.

В данной работе мы рассмотрим простейшую механическую систему — ротатор, совершающий одномерное вращение. Реальной физической системой, описываемой данной моделью, может служить некоторое твердое тело, способное вращаться вокруг фиксированной в пространстве оси (например, шар, закрепленный на жестком стержне). Поместив эту систему в поле с некоторым статическим потенциалом (например, в поле тяжести), можно получить достаточно сложное движение, не описываемое аналитическими функциями (математический маятник с затуханием, совершающий движения с большими амплитудами). Хаотические движения можно получить, воздействуя на эту систему внешним периодическим полем. В качестве реальной системы может быть взято заряженное тело, находящееся в поле электромагнитной волны. Заметим, что в зависимости от поляризации волны (линейная или циркулярная поляризация) уравнения движения ротатора будут различаться.

Уравнение движения для ротатора, находящегося под воздействием внешнего гармонического поля, после масштабных преобразований можно привести к виду:

$$\ddot{\theta} + \gamma\dot{\theta} + V(\theta) = F(\theta)\sin(\omega t), \quad (1)$$

где θ — циклическая координата (период 2π); константа γ характеризует диссипацию (силы трения); $V(\theta)$ — момент потенциальных сил (потенциал, тормозящий вращение), ω — частота внешнего воздействия.

Функция $F(\theta)$ является константой, если поле внешней волны имеет циркулярную поляризацию, а для линейно-поляризованного поля, вектор напряженности которого направлен вдоль оси, характеризуемой углом $\theta = 0$, $F(\theta) = F \sin \theta$. Уравнение (1) можно свести к автономной системе трех дифференциальных уравнений 1-го порядка:

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= \Omega, \\ \dot{\Omega} &= F(\theta) \sin \varphi - \gamma \Omega - V(\theta), \\ \dot{\varphi} &= \omega.\end{aligned}\tag{2}$$

Полученная система уравнений инвариантна относительно преобразований $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$, $\theta \rightarrow \theta + 2\pi$. Это эквивалентно тому, что переменные φ и θ — циклические. Другие преобразования симметрии зависят от вида функций $F(\theta)$ и $V(\theta)$. Далее мы рассмотрим подробно два случая.

Незаторможенный ротатор под воздействием линейно-поляризованного поля ($V(\theta) = 0$, $F(\theta) = F \sin \theta$)

Система уравнений (2) сводится к виду

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= \Omega, \\ \dot{\Omega} &= F \sin \theta \sin \varphi - \gamma \Omega, \\ \dot{\varphi} &= \omega.\end{aligned}\tag{3}$$

Несложно показать, что эта система уравнений инвариантна относительно следующих совокупностей преобразований:

$$\theta \rightarrow -\theta, \quad \Omega \rightarrow -\Omega, \quad \varphi \rightarrow \varphi,\tag{4}$$

$$\theta \rightarrow \theta + \pi, \quad \Omega \rightarrow \Omega, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi.\tag{5}$$

Далее для краткости будем называть первую группу «инверсией», а вторую — «сдвигом». Эти преобразования вместе с тождественным элементом и преобразованием, равным произведению преобразований (4) и (5), образуют группу, изоморфную группе C_{2h} . Чтобы это понять, достаточно перейти к «декартовым» координатам в трехмерном пространстве при помощи преобразований:

$$X = \Omega \cos \theta \cos \varphi,$$

$$Y = \Omega \cos \theta \sin \varphi,$$

$$Z = \Omega \sin \theta.$$

(Это похоже на переход от сферических к декартовым координатам, только угол θ играет роль «широты на глобусе»). При таком преобразовании элементы симметрии приводят к следующим преобразованиям координат:

$$X \rightarrow -X, Y \rightarrow -Y, Z \rightarrow Z \text{ (поворот на } \pi \text{ вокруг оси } Z); \tag{6}$$

$$X \rightarrow X, Y \rightarrow Y, Z \rightarrow -Z \text{ (отражение в плоскости } (X, Y)). \tag{7}$$

Произведение преобразований (4), (5) эквивалентно произведению преобразований (6), (7), являющемуся преобразованием инверсии декартовых координат. Таким образом, группа преобразований, оставляющих инвариантной систему уравнений (3), изоморфна точечной группе C_{2h} .

В пределе $\gamma \rightarrow 0$ появляется еще одно преобразование симметрии, являющееся следствием симметрии обращения времени. Действительно, при замене $t \rightarrow -t$ система уравнений (3) принимает вид

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= -\Omega, \\ \dot{\Omega} &= -F \sin \theta \sin \varphi + \gamma \Omega, \\ \dot{\varphi} &= -\omega.\end{aligned}\tag{8}$$

Сделав теперь замену переменных

$$\theta \rightarrow -\theta, \quad \Omega \rightarrow \Omega, \quad \varphi \rightarrow -\varphi + \pi,\tag{9}$$

приходим к системе уравнений

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= \Omega, \\ \dot{\Omega} &= F \sin \theta \sin \varphi + \gamma \Omega, \\ \dot{\varphi} &= \omega,\end{aligned}$$

которая при $\gamma \rightarrow 0$ совпадает с системой (3).

Преобразование переменных (9) эквивалентно преобразованию «декартовых» координат:

$$X \rightarrow -X, \quad Y \rightarrow Y, \quad Z \rightarrow -Z \text{ (поворот на угол } \pi \text{ вокруг оси } Y).\tag{10}$$

Добавив к этим преобразованиям преобразования, являющиеся их произведениями, получим группу симметрии D_{2h} (группа симметрии прямоугольного параллелепипеда).

Численное решение системы уравнений (3) при различных параметрах и исследование сечений Пуанкаре показывает, что для данной системы сохраняются те же основные качественные особенности, что и для системы, описываемой уравнениями Дуффинга [4] (см. начало данной статьи). Некоторые особенности движения такого ротатора с переходом от регулярных движений к хаотическим и обратно при изменении параметров рассмотрены в статьях [2; 3].

Ротатор в потенциале с тремя ямами под воздействием циркулярно-поляризованного поля

Будем моделировать тормозящий момент функцией $V(\theta) = \sin(3\theta)$ (амплитуду потенциала масштабным преобразованием без потери общности можно обратить в единицу). Система уравнений (2) сводится к виду

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= \Omega, \\ \dot{\Omega} &= F \sin \varphi - \gamma \Omega - \sin(3\theta), \\ \dot{\varphi} &= \omega.\end{aligned}\tag{11}$$

Эта система уравнений инвариантна относительно следующих совокупностей преобразований:

$$\theta \rightarrow -\theta, \quad \Omega \rightarrow -\Omega, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi;\tag{12}$$

$$\theta \rightarrow \theta + 2\pi/3, \quad \Omega \rightarrow \Omega, \quad \varphi \rightarrow \varphi.\tag{13}$$

Далее для краткости мы будем называть преобразование (12) инверсией, а преобразование (13) — сдвигом.

Группу симметрии можно найти, если вместо угловых координат ввести «декартовы» координаты, определяемые выражениями

$$\begin{aligned} X &= \Omega \cos \varphi \cos \theta; \\ Y &= \Omega \cos \varphi \sin \theta; \\ Z &= \Omega \sin \varphi. \end{aligned} \quad (14)$$

Угол φ здесь играет роль широты, а угол θ — роль долготы. При такой замене координат преобразования (12), (13) соответствуют следующие преобразования:

$$X \rightarrow X, \quad Y \rightarrow -Y, \quad Z \rightarrow Z \quad (15)$$

(отражение в плоскости (X, Z));

$$X \rightarrow X \cos(2\pi/3) + Y \sin(2\pi/3), \quad Y \rightarrow -X \sin(2\pi/3) + Y \cos(2\pi/3), \quad Z \rightarrow Z \quad (16)$$

(поворот на угол $2\pi/3$ вокруг оси Z). Соответствующая группа симметрии изоморфна точечной группе C_{3v} .

В пределе $\gamma \rightarrow 0$ добавляется симметрия по отношению к обращению времени. Замена переменной времени $t \rightarrow -t$ приводит систему уравнений (11) к виду

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= -\Omega; \\ \dot{\Omega} &= -F \sin \varphi + \gamma \Omega + \sin(3\theta); \\ \dot{\varphi} &= -\omega. \end{aligned} \quad (17)$$

Сделаем теперь замену переменных:

$$\theta \rightarrow -\theta, \quad \Omega \rightarrow \Omega, \quad \varphi \rightarrow -\varphi, \quad (18)$$

в результате чего система уравнений (17) переходит в систему

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= -\Omega; \\ \dot{\Omega} &= F \sin \theta \sin \varphi + \gamma \Omega; \\ \dot{\varphi} &= -\omega, \end{aligned} \quad (19)$$

которая при $\gamma \rightarrow 0$ совпадает с системой (11).

Преобразования (18) эквивалентны преобразованиям «декартовых» координат:

$$X \rightarrow X, \quad Y \rightarrow -Y, \quad Z \rightarrow -Z \quad (20)$$

(поворот на угол π вокруг оси X). В результате при $\gamma \rightarrow 0$ группа симметрии расширяется до группы D_{3h} .

Симметрию регулярных движений удобно анализировать при помощи графиков траекторий в фазовом пространстве. Однако вычисление фазовых траекторий подобно фазовым траекториям уравнения Дуффинга неудобно, поскольку «теряется» цикличность переменной θ . Построение графиков с приведенным значением θ (например, к интервалу $[0, 2\pi]$) также оказывается неудобным, поскольку фазовая траектория оказывается разрывной, хотя реальные траектории никаких разрывов не имеют. Для учета цикличности переменной θ определим комплексные «декартовы» координаты при помощи выражений

$$\begin{aligned} X &= (r + \exp(i\theta)) \cos \varphi; \\ Y &= (r + \exp(i\theta)) \sin \varphi; \\ Z &= i\Omega \exp(i\theta). \end{aligned} \quad (21)$$

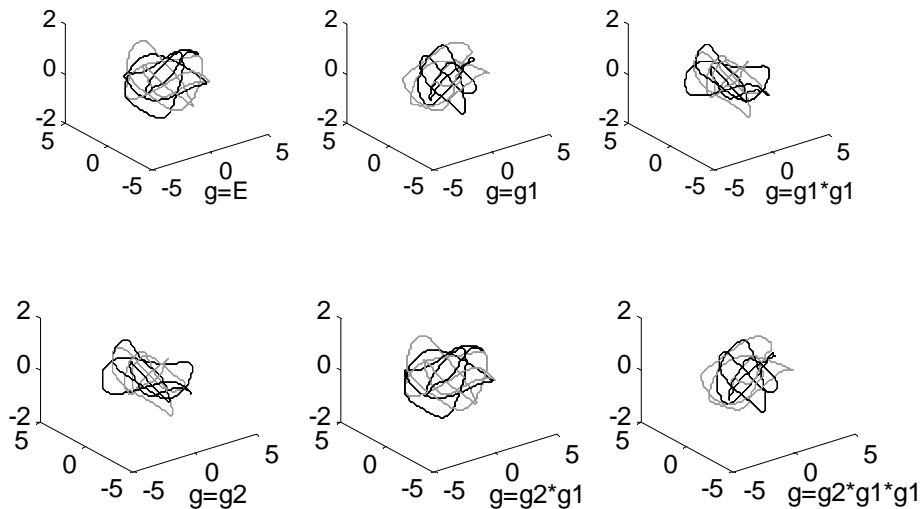
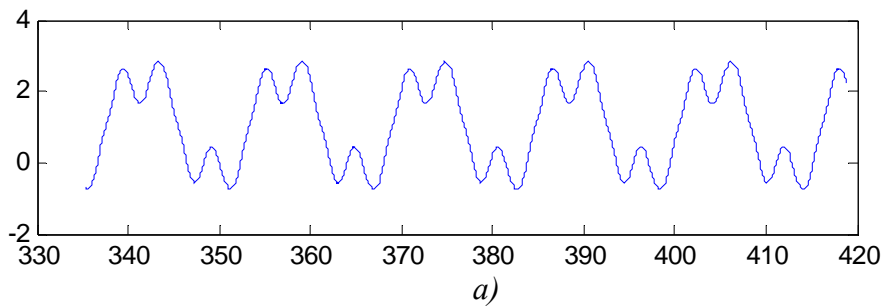
Если параметр r выбрать равным $a(1+i)$, то при значении параметра $a > 1$ имеет место взаимно-однозначное соответствие между переменными θ , Ω , φ и «декартовыми» координатами.

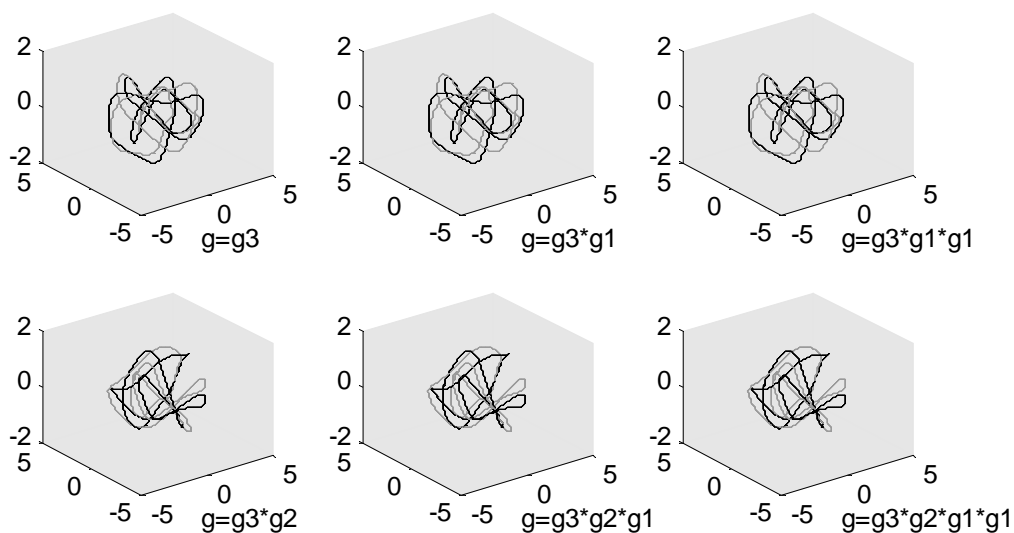
Вещественные и мнимые части введенных переменных имеют понятный физический смысл: для $\exp(i\theta)$ — это декартовы координаты частицы, движущейся по окружности единичного радиуса, а для $i\Omega \exp(i\theta)$ — соответствующие проекции скоростей.

Все регулярные движения можно подразделить на колебательные и вращательные. Ниже приведены графики фазовых траекторий после преобразований симметрии (12), (13), (18). Для элементов группы симметрии использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned} g1: \theta &\rightarrow \theta + 2\pi/3, \quad \Omega \rightarrow \Omega, \quad \varphi \rightarrow \varphi; \\ g2: \theta &\rightarrow -\theta, \quad \Omega \rightarrow -\Omega, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi; \\ g3: \theta &\rightarrow -\theta, \quad \Omega \rightarrow \Omega, \quad \varphi \rightarrow -\varphi. \end{aligned} \quad (22)$$

Пример колебательного движения приведен на рис. 1. Расчет проведен для параметров $\omega = 1,2$, $F = 0,5$, $\gamma = 0,1$. На рис. 1, а приведена зависимость θ от времени. Рис. 1, б представляет собой фазовые траектории, полученные после преобразования симметрий, более светлые линии соответствуют мнимым значениям комплексных величин X , Y , Z .



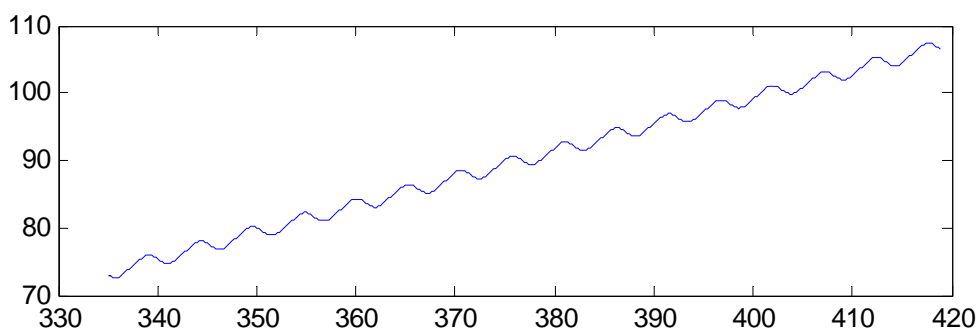


б

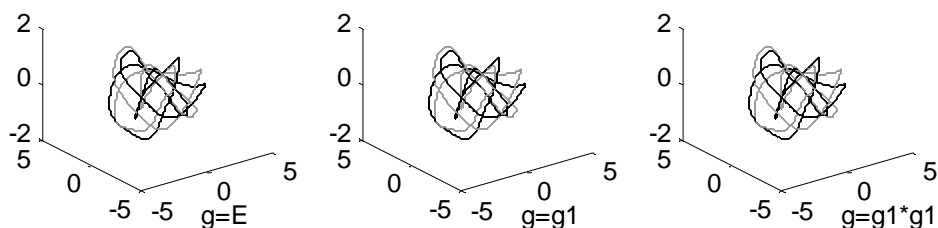
Рис. 1

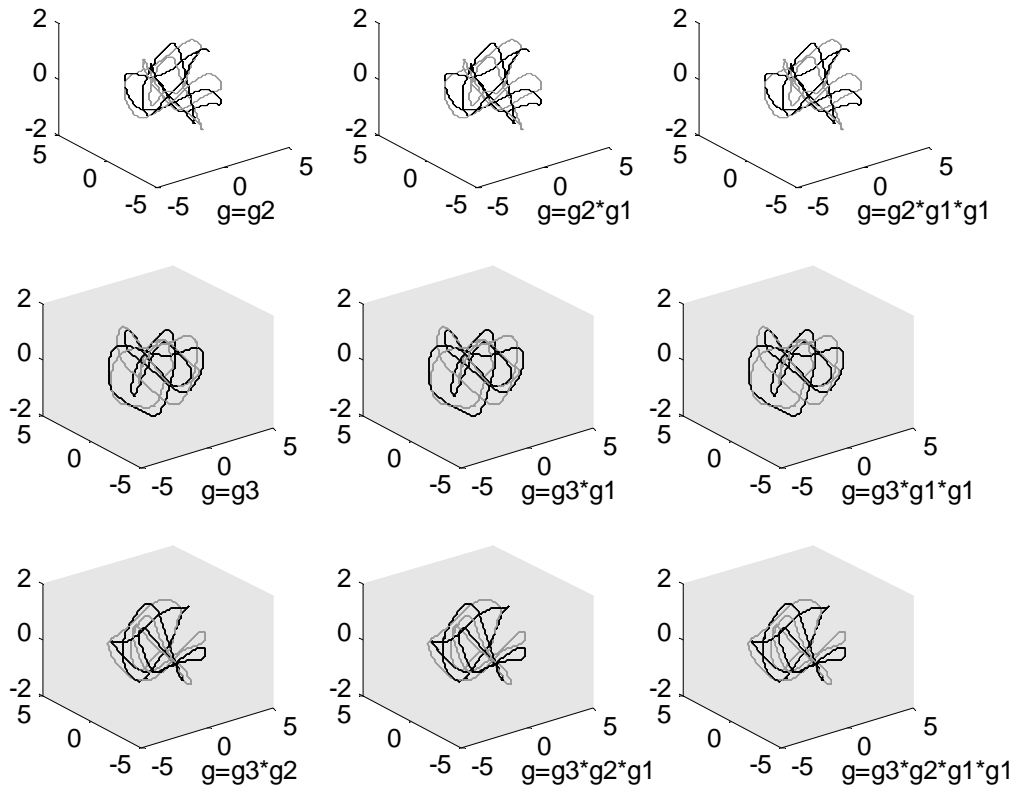
Анализ графиков показывает, что колебательное движение симметрично относительно операции инверсии (в данном случае — операция $g_3 * g_1$) и несимметрично относительно операции сдвига (g_1). Из рисунков также видно, что приближенно выполняется операция обращения времени (точнее, — произведение соответствующего преобразования на другие элементы группы $g_3 * g_1$ и $g_3 * g_2 * g_1$). Расчет показывает, что при уменьшении параметра диссипации симметрия обращения времени на графиках становится еще более наглядной.

Пример регулярного вращательного движения приведен на рис. 2. Расчет произведен для параметров $\omega = 1,2$; $F = 0,8$; $\gamma = 0,1$.



а)



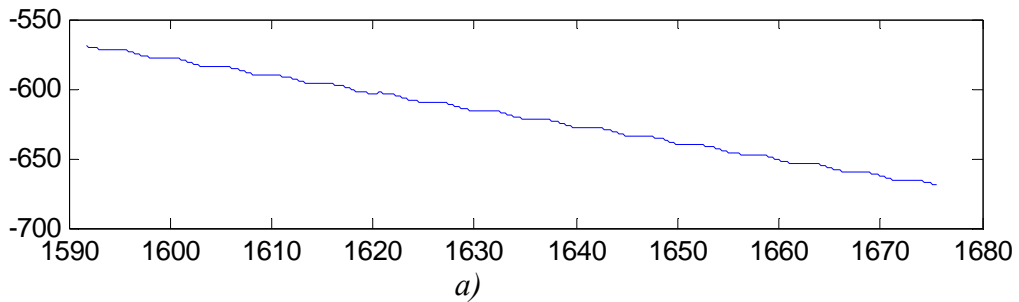


б)

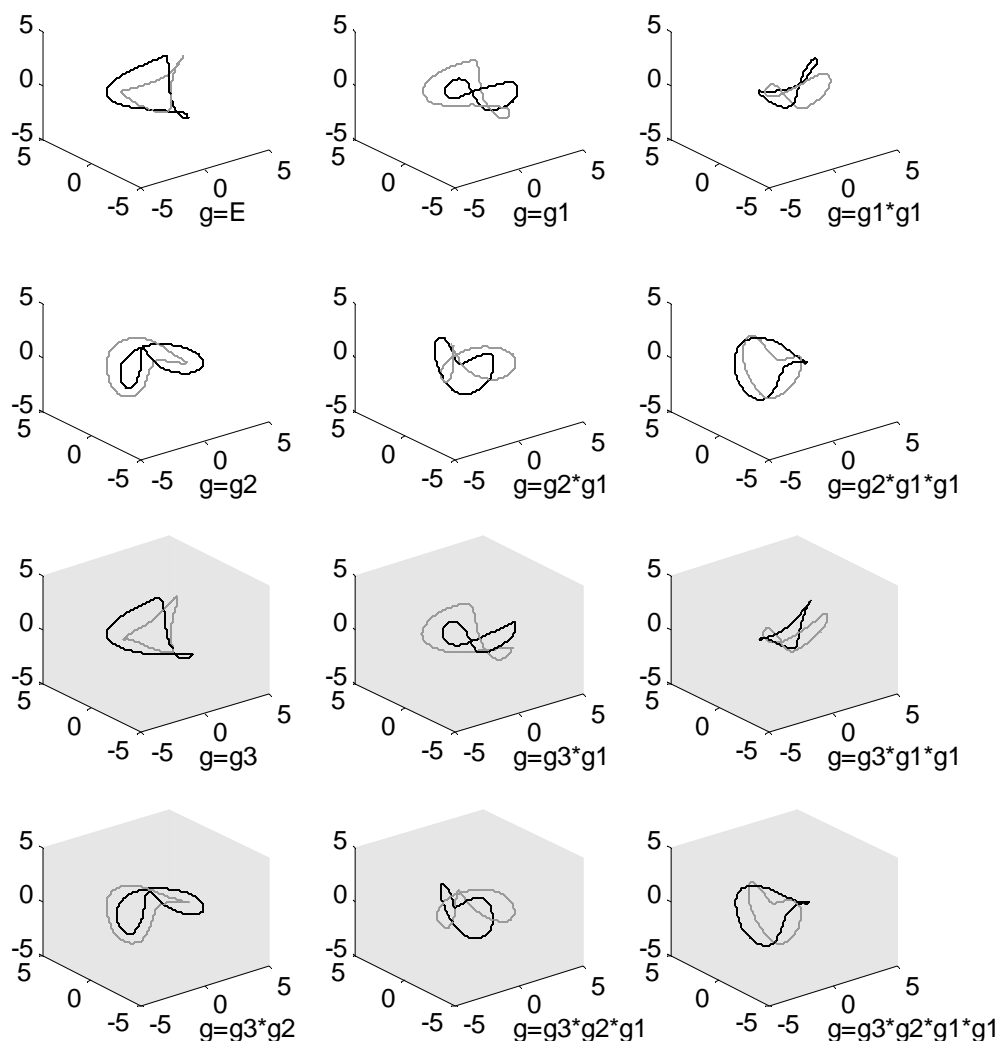
Рис. 2.

Как видно из графиков фазовых диаграмм, сохраняется симметрия сдвига по θ на угол, кратный $2\pi/3$, но нарушается симметрия инверсии. Симметрия обращения времени сохраняется приближенно (строки 1 и 3 и соответственно 2 и 4 на фазовой диаграмме). Расчет показывает, что при уменьшении параметра диссипации эта симметрия также проявляется более наглядно.

Заметим, что при регулярном вращательном движении симметрия инверсии просто не может не нарушаться. Однако симметрия сдвига может нарушаться так же, как и симметрия инверсии. Пример приведен на рис. 3, расчет при параметрах $\omega = 1,2$; $F = 1,95$; $\gamma = 0,1$.



а)



б)
Рис. 3

Как видно из фазовых диаграмм, нарушена симметрия сдвига (вдоль строк) и симметрия инверсии (строки 1 и 2). Однако имеет место приближенная симметрия обращения времени (строки 1 и 3 и соответственно 2 и 4). Как и в предыдущих случаях, эта симметрия становится более наглядной при уменьшении параметра диссипации.

Симметрию хаотического движения, как и в случае уравнения Дуффинга [4], удобно исследовать, рассчитывая картину сечений Пуанкаре.

Фазовая траектория в трехмерном пространстве с «декартовыми координатами» X , Y , Z , определяемыми выражениями (8), представляет собой линию, намотанную на тор (рис. 4).

В соответствии с формулами (22) необходимо построить сечения при некотором значении φ_0 и сравнить картину с сечениями $\varphi = \varphi_0 + \pi$ (преобразование g_2), $\varphi = -\varphi_0$ (преобразование g_3) и $\varphi = \pi - \varphi_0$ (произведение преобразований g_1 и g_2).

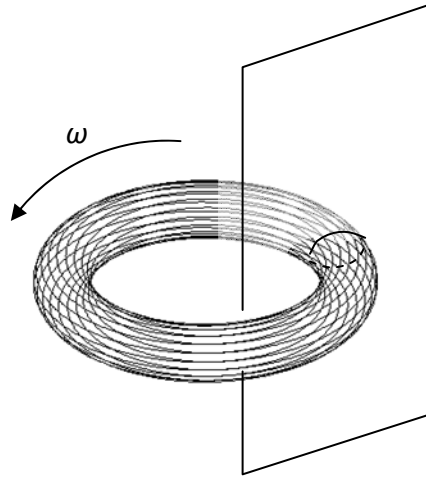


Рис. 4

При построении сечений будем по горизонтальной оси откладывать значение угла θ , приведенное к интервалу $[0, 2\pi]$, а по вертикальной оси — значение Ω . При наличии трансляционной симметрии (сдвиг по углу θ) картины Пуанкаре должны быть симметричны относительно такого сдвига (формула (13)). При наличии симметрии инверсии в соответствии с формулами (12) картина для сечения $\varphi_0 + \pi$ будет подобна картине сечения φ_0 , если обе оси повернуть на π . Наконец, при наличии симметрии обращения времени картина для сечения $-\varphi_0$ должна быть подобна картине сечения φ_0 , если инвертировать ось θ . Соответственно картина сечения $\pi - \varphi_0$ должна быть подобна картине сечения $\varphi_0 + \pi$, если инвертировать ось Ω . Вышесказанное иллюстрируется рис. 5.

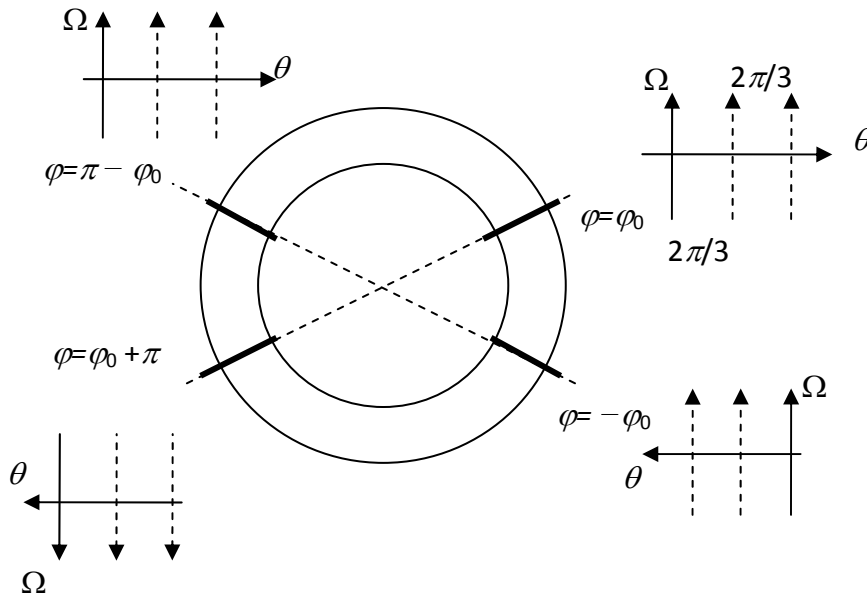


Рис. 5

На рис. 6 приведены соответствующие сечения Пуанкаре, построенные при расчете с параметрами $\omega = 1$, $F = 1$, $\gamma = 0,1$. Чтобы можно было сравнить сечения, оси сечений $\pi \pm \varphi_0$ и $-\varphi_0$ инвертированы в соответствии с рис. 5. Каждое из сечений содержит 544 точки.

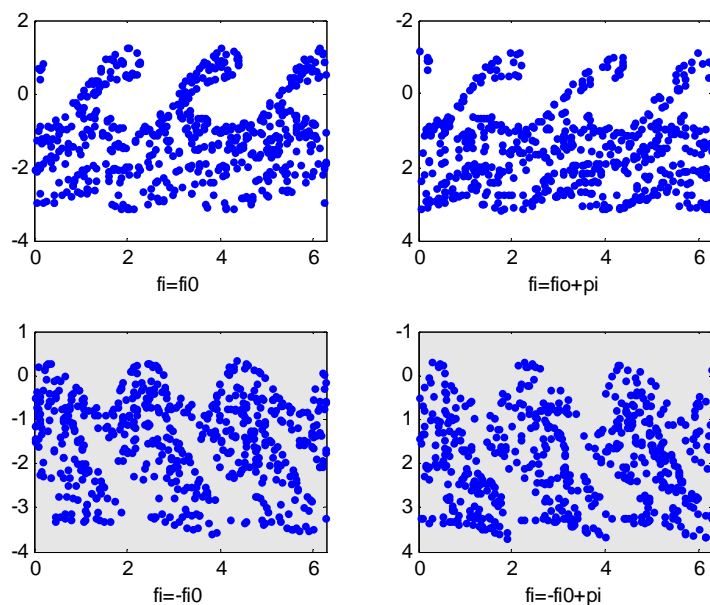


Рис. 6

Как видно из рисунка, симметрия сдвига и отражения проявляется достаточно наглядно. Симметрия обращения времени при данном значении параметра диссипации отсутствует.

Симметрия обращения времени начинает проявляться при уменьшении параметра диссипации, однако картина Пуанкаре становится менее структурированной и для демонстрации симметрии приходится брать больше точек в сечении.

Пример расчета при значениях параметров $\omega = 1$, $F = 1$, $\gamma = 0,001$ с числом точек 992 приведен на рис. 7. Несмотря на некоторую хаотичность картин сечений, симметрия все же проявляется.

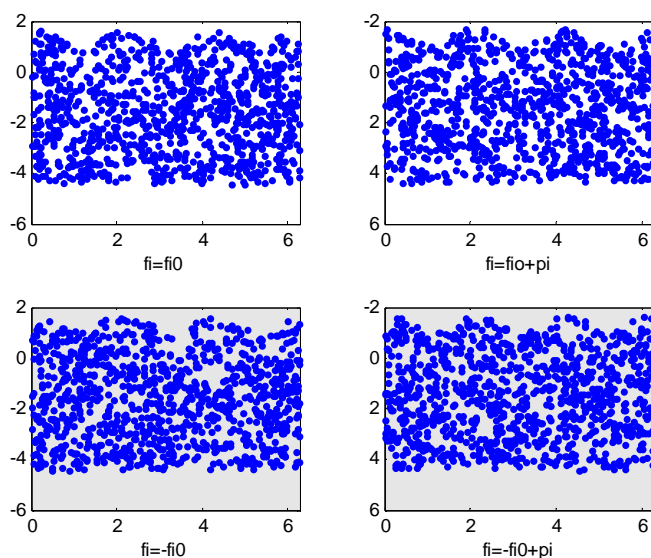


Рис. 7.

Как и в случае системы, описываемой уравнением Дуффинга, при увеличении параметра диссипации симметрия сечения Пуанкаре может нарушаться. Пример расчета при значениях параметров $\omega = 1,2$, $F = 1,3$, $\gamma = 1$ приведен на рис. 8. Возможно, что, как и в случае уравнения Дуффинга, в данном случае имеет место не хаос с предельным циклом в виде странного аттрактора, а траектория в фазовом пространстве, выходящая на квазиаттрактор [1], соответствующий периодическому движению с периодом, значительно превосходящим период внешнего воздействия.

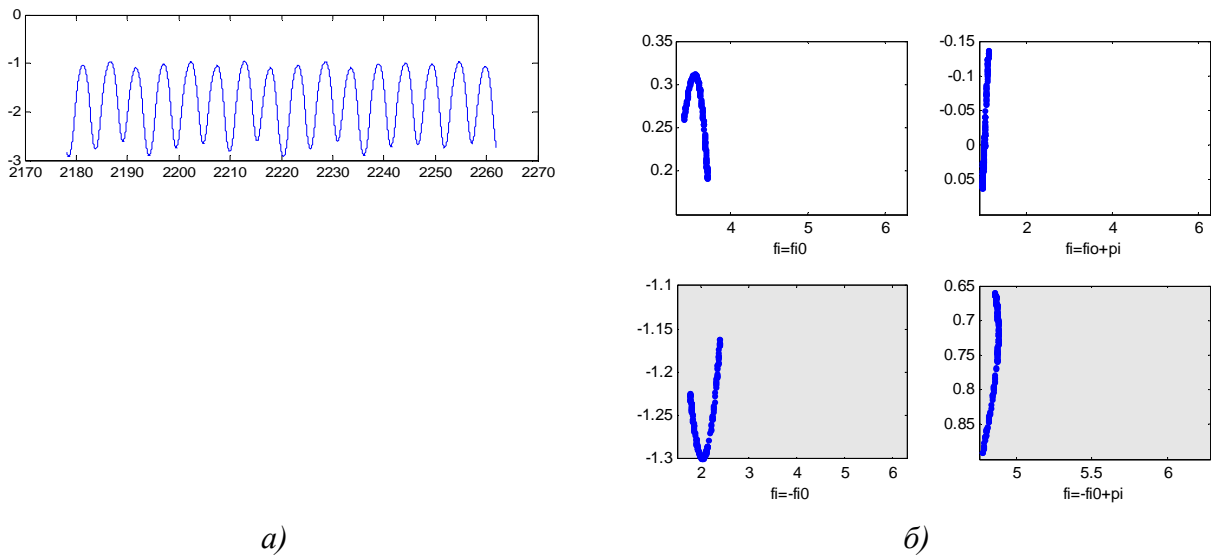


Рис. 8

Группа симметрии C_{3v} , являющаяся в данном случае группой симметрии рассматриваемой системы, характерна, в частности, тем, что имеет двумерные неприводимые представления (см., например, работу [5]). При квантовомеханическом описании подобной системы двумерные представления соответствуют вырождению уровней энергии (или уровней квазиэнергии, если внешнее периодическое поле включается в гамильтониан). В задачах классической механики дискретность уровней энергии отсутствует, и говорить о вырождении не приходится. Тем не менее, оказывается, что о наличии двумерных представлений у соответствующей группы симметрии можно судить по поляризационным эффектам в излучении системой электромагнитной волны.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Заславский Г. М., Сагдеев Р. З. Введение в нелинейную физику: от маятника до турбулентности и хаоса. М., 1988.
2. Кондратьев А. С., Ляцев А. В. Динамический хаос в динамических и оптических системах // Известия РГПУ им. А. И. Герцена: Естественные и точные науки. 2006. № 6 (15). С. 262–273.
3. Ляцев А. В. «Квантование» в задачах нелинейной динамики. Численный эксперимент и интерпретация // Известия РГПУ им. А. И. Герцена: Естественные и точные науки. 2012. № 147. С. 50–61.
4. Ляцев А. В. Симметрия регулярных и хаотических движений в задачах нелинейной динамики. Уравнение Дуффинга // Известия РГПУ им. А. И. Герцена: Естественные и точные науки. 2013. № 157.
5. Петрашень М. И., Трифонов Е. Д. Применение теории групп в квантовой механике. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. 280 с.

REFERENCES

1. Zaslavskij G. M., Sagdeev R. Z. Vvedenie v nelinejnuju fiziku: ot majatnika do turbulentsnosti i haosa. M., 1988.
2. Kondrat'ev A. S., Ljaptsev A. V. Dinamicheskij haos v dinamicheskikh i opticheskikh sistemah // Izvestija RGPU im. A. I. Gertsena: Estestvennyye i tochnye nauki. 2006. № 6 (15). S. 262–273.
3. Ljaptsev A. V. «Kvantovanie» v zadachah nelinejnoj dinamiki. Chislennyj eksperiment i interpretatsija // Izvestija RGPU im. A. I. Gertsena: Estestvennyye i tochnye nauki. 2012. № 147. S. 50–61.
4. Ljaptsev A. V. Simmetrija reguljarnyh i haoticheskikh dvizhenij v zadachah nelinejnoj dinamiki. Uravnenie Duffinga // Izvestija RGPU im. A. I. Gertsena: Estestvennyye i tochnye nauki. 2013. № 157.
5. Petrashen' M. I., Trifonov E. D. Primenenie teorii grupp v kvantovoj mehanike. M.: Knizhnyj dom «LIBROKOM», 2010. 280 s.

G. A. Bordovsky, A. V. Marchenko,
T. Yu. Rabchanova, V. A. Doronin

LATTICE EFG TENSORS AT THE RARE-EARTH METAL SITES IN $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

Parameters of the tensors of the electric field gradient (EFG) created by lattice ions at the rare-earth metal (REM) sites in $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (R is Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Tm or Yb) have been determined by means of ^{155}Eu (^{155}Gd) emission Mossbauer spectroscopy. The EFG tensors at the REM sites have been calculated in the point charge approximation. The experimental and calculated EFGs are shown to be in good agreement when holes are supposed to be mainly in sublattices of the chain oxygen for $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. It is shown that the anomalous behavior of the compound $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ is caused by antistructural substitution of Pr^{3+} for Ba^{2+} at its orthorhombic lattice.

Keywords: Mossbauer spectroscopy, the electric field gradient.

Г. А. Бордовский, А. В. Марченко,
Т. Ю. Рабчанова, В. А. Доронин

ТЕНЗОР КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ГЭП В УЗЛАХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ В РЕШЕТКАХ $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

Параметры тензора градиента электрического поля (ГЭП), создаваемого ионами кристаллической решетки в узлах редкоземельных металлов (РЗМ) в $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (R = Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Y, Tm или Yb), были определены методом эмиссионной мессбауэровской спектроскопии на изотопе ^{155}Eu (^{155}Gd). Тензор ГЭП в узлах РЗМ был рассчитан в приближении точечных зарядов. Экспериментальные и рассчитанные значения ГЭП находятся в хорошем согласии, если предположить, что дырки, как правило, находятся в подрешетке цепочечного кислорода решеток $\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Показано, что аномальное поведение соединения $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ объясняется антиструктурным замещением Pr^{3+} на Ba^{2+} в его орторомбической решетке.

Ключевые слова: мессбауэровская спектроскопия, градиент электрического поля.