

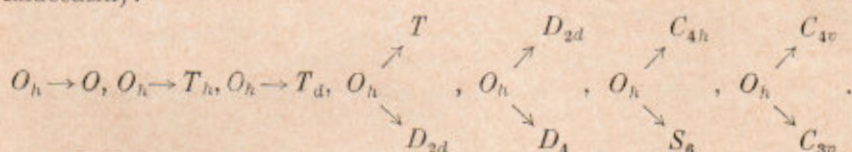
В. Ф. ШАМРАЙ

ВОЗМОЖНЫЕ ТИПЫ СИММЕТРИИ ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ ВТОРОГО РОДА В КРИСТАЛЛАХ O_h^3

(Представлено академиком Н. В. Агеевым 4 V 1971)

Физические свойства соединений $Nb_2(X, Y)$ и $V_2(X, Y)$ (кристаллическая структура этих соединений описывается пространственной группой O_h^3) в значительной степени определяются изменением типа кристаллической решетки в точках фазового перехода второго рода. Иллюстрацией служит образование сверхструктуры в $Nb_{12}Al_3Ge$ (¹), тетрагонализация V_2Si при температурах $\leq 21^\circ K$ (²).

Для разрешения вопроса о том, какие изменения симметрии в точке фазового перехода второго рода возможны для кристаллов с симметрией O_h^3 , рассматривались неприводимые представления, связанные с вектором $k = \frac{1}{2}(b_1 + b_2 + b_3)$, где b_1, b_2, b_3 — векторы обратной решетки, и представления, связанные с вектором $k = 0$. Рассматривались только неприводимые представления, удовлетворяющие определенным условиям (^{3, 4}). Представления, связанные с вектором $k = 0$ разрешают фазовые переходы второго рода без изменения объема элементарной ячейки. Согласно (⁵) они индуцируют следующие переходы (между кристаллическими классами):



В последних четырех случаях может произойти переход в один из двух кристаллических классов в зависимости от соотношения между коэффициентами при инвариантах в разложении термодинамического потенциала. В (⁶) приводятся символы пространственных групп: $C_{4v}^7, D_{2d}^5, C_{4h}^2, C_{3v}^6, D_4^7, C_{3v}^3, T_h^1$. В ней не указаны пространственные группы T_d^4 и O^2 , которые разрешены двумя одномерными представлениями, связанными с вектором $k = 0$.

Анализ неприводимых представлений, связанных с вектором $k = \frac{1}{2}(b_1 + b_2 + b_3)$, обнаружил, что они индуцируют переходы $O_h^3 \rightarrow T_h^1, O_h^3 \rightarrow T$, которые возможны при объединении восьми элементарных ячеек в одну.

Институт металлургии им. А. А. Байкова
Академии наук СССР
Москва

Поступило
17 IV 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Н. В. Агеев, Н. Е. Алексеевский, В. Ф. Шамрай, Изв. АН СССР, Металлы, 3, 171 (1970). ² G. Regel, B. W. Batterman, Phys. Rev., 166, 3, 616 (1968). ³ Е. М. Лифшиц, Журн. эксп. и теоретич. физ., 11, 2—3, 255 (1941). ⁴ Г. Я. Лубарский, Теория групп и ее применение в физике, М., 1958. ⁵ В. Л. Индеп-б о м, Кристаллография, 5, 1, 115 (1960).