

УДК 548.4

©1994

## СТАТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ ДЕФЕКТЫ В СИЛЬНОГАРМОНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

*Е.И. Саламатов, В.Г. Чудинов*

В рамках модели локального ангармонизма изучаются процессы дефектообразования в ангармонических системах. Вычисления проводились в псевдогармоническом приближении с уточненной схемой самосогласования. Результаты исследований соответствуют наблюдаемым в методе молекулярной динамики эффектам и позволяют дать им объяснение в рамках микроскопической модели.

В последние годы методы молекулярной динамики успешно используются для изучения ангармонических эффектов в твердых телах. Моделирование процессов плавления, структурных фазовых переходов и динамики сильногармоничных дефектных кристаллов позволяет сделать вывод о том, что эффекты ангармонизма проявляются прежде всего в появлении в рассматриваемой системе локализованных областей, динамические свойства которых значительным образом отличаются от свойств матрицы [1-4]. При этом могут наблюдаться два типа локализованных возбуждений, которые мы в дальнейшем будем называть статическими и динамическими дефектами.

К первым из них можно отнести возникающие при приближении идеальной системы к температуре плавления низкочастотные колебания с большой амплитудой и малой кинетической энергией, которые в конце концов и приводят к образованию пар Френкеля [1-3]. При исследовании динамики квазидвумерных дефектных структур, моделирующих  $\text{CuO}$  слои сверхпроводников 2-1-4, в работе [4] наблюдалось возбуждение высокоэнергетических колебаний атомов кислорода, находящихся вблизи атомов стронция. При этом происходит перераспределение кинетической энергии атомов и возникают «горячие» точки — локальные области, в которых кинетическая энергия, приходящаяся на один атом, много больше, чем средняя по кристаллу. Такие дефекты мы будем называть динамическими.

К сожалению, обсуждение результатов машинного эксперимента носит зачастую описательный характер. Поэтому цель данной работы — в едином подходе описать процессы образования статических и динамических дефектов в ангармонических системах в рамках микроскопической модели локального ангармонизма [5,6] и дать объяснение наблюдаемым эффектам.

Отметим, что интересная модель, позволяющая понять процессы дефектообразования в сильногармонических системах, предложена и обсуждена в работах [7-9]. В этих работах исследовалась динами-

ка идеальной кристаллической решетки, атомы которой связаны друг с другом ангармоническим потенциалом. Как оказалось, свободная энергия такой системы будет иметь минимум в том случае, когда часть атомов решетки будет находиться в возбужденном состоянии за счет локальных флуктуаций температуры. При возбуждении ангармонического осциллятора меняется его эффективная частота, что (в зависимости от знака ангармонизма) приводит к появлению в функции плотности колебательных состояний системы высокочастотных локальных и низкочастотных резонансных уровней, которые, по нашему мнению, являются аналогом статических и динамических дефектов.

Более детальный теоретический анализ возбужденных колебательных состояний отдельных атомов в решетке можно провести в рамках модели локального ангармонизма [5,6]. В этом случае рассматривается гармонический кристалл, содержащий дефектные атомы, которые вдоль одной из обобщенных координат в пространстве дефекта колеблются в ангармоническом потенциале с характерной частотой  $\omega_0 \ll \omega_D$  (или  $\omega_0 \gg \omega_D$ ). Рассчитанная в некотором гармоническом приближении плотность колебательных состояний такого дефекта представляет собой кривую Лоренца, центрированную на частоте  $\omega_0$ , ширина которой  $\eta$  определяет взаимодействие осциллятора с фоновым полем. Для квазилокальных и локальных уровней выполняется условие  $\eta \ll 1$ , и движение атома в таком потенциале можно описать уравнением Ланжевена, которое в работах [5,6] решалось в приближении, соответствующем псевдогармоническому приближению в теории ангармонических кристаллов [10,11]. Если в работах [5,6] исследовались динамические характеристики таких систем, то в данной работе мы будем исследовать энергетические характеристики ангармонического осциллятора, взаимодействующего с фоновым полем. При этом возникает необходимость уточнить по сравнению с [5,6] схему самосогласования для нахождения эффективных параметров задачи.

## 1. Динамика ангармонических осцилляторов в фоновом поле

Как было показано в работах [5,6], в приближении, соответствующем псевдогармоническому, стационарное движение частицы в потенциале  $U(r)$ , взаимодействующей с термостатом (фононным полем), можно описать как гармоническое, но в некотором другом эффективном потенциале  $\tilde{U}(r)$

$$\tilde{U}(r) = \exp(\langle u^2 \rangle \nabla^2 / 2) U(r), \quad (1)$$

зависящем от температуры через коррелятор  $\langle u^2 \rangle$  среднеквадратичного отклонения частицы от температурно-зависящего положения равновесия  $r_0(T)$ , найденного из условия

$$\partial \tilde{U} / \partial r |_{r=r_0} = 0.$$

В работе будут рассмотрены потенциалы двух видов

$$U_1(r) = -R^2 r / 4 + C r^4 / 4, \quad (2)$$

$$U_2(r) = A r^2 / 2 + B \exp(-a r^2), \quad (3)$$

движения частицы в которых принципиально различны при высоких температурах.

Поскольку решение задачи с потенциалом  $U_1(r)$  допускает аналитическое решение в классическом пределе высоких температур, остановимся на нем более подробно. Этот потенциал имеет два минимума в точках  $r_{\pm} = \pm\sqrt{R^2/2C}$ , которые отделены друг от друга потенциальным барьером высотой  $E_b = R^2/16C$  и характеризуются гармонической частотой

$$\omega_0^2 = \partial^2 U / \partial r^2 |_{r=r_{\mp}} = R.$$

Соответствующий эффективный потенциал имеет вид

$$\tilde{U}_1(r) = -Rr^2(1 - 6C\langle u^2 \rangle / R) / 4 + Cr^4 / 4 - R\langle u^2 \rangle / 4 + 3C\langle u^2 \rangle^2 / 4 \quad (4)$$

(в отличие от работы [6] потенциал записан с учетом постоянных слагаемых) с параметрами

$$r_{\pm}(T) = \pm\sqrt{(R - 6C\langle u^2 \rangle) / 2C}, \quad (5)$$

$$\omega^2(T) = \partial^2 \tilde{U}_1(r) / \partial r^2 = \begin{cases} R - 6C\langle u^2 \rangle, & r = r_{\pm}(T), \\ 3C\langle u^2 \rangle - R/2, & r = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Из (5) следует, что при больших значениях коррелятора  $\langle u^2 \rangle$  при  $T > T_c$  динамически устойчивым положением равновесия частицы будет точка  $r = 0$  (возбужденное состояние [6]). При низких температурах колебания частицы происходят вблизи точки  $r_+$  или  $r_-$  (базисные состояния). Условием перехода из основного состояния в возбужденное является расхожимость производной  $\partial\langle u^2 \rangle / \partial T$ .

Вблизи минимумов потенциала (4) для  $\tilde{U}_1(r)$  можно записать

$$\tilde{U}_1(u) = \Delta U(T) + \omega^2(T)u^2/2, \quad (7)$$

где  $u$  — малые смещения из положения равновесия, а  $\Delta U(T)$  — сдвиг минимального значения потенциала  $\tilde{U}_1(r)$  относительно минимального значения потенциала  $U_1(r)$

$$\Delta U(T) = \begin{cases} R\langle u^2 \rangle / 2 - 3C\langle u^2 \rangle^2 / 2, & r = r_{\pm}, \\ E_b - R\langle u^2 \rangle + 3\langle u^2 \rangle^2 C / 4, & r = 0. \end{cases} \quad (8)$$

В работах [5,6] в качестве уравнения самосогласования было использовано стандартное условие [11]  $\langle u^2 \rangle = T / \omega^2(T)$ . Сейчас мы считаем, что при самосогласовании необходимо учитывать постоянное слагаемое  $\Delta U(T)$  в выражении (7). В самом деле, из (7) следует, что полная энергия одномерного движения частицы в потенциале (7) должна определять как энергию гармонических колебаний, так и сдвиг минимального значения потенциала по сравнению с его значением при нулевой температуре. Поскольку при равновесии с термостатом полная энергия одномерного движения равна  $T$ , имеем (здесь и ниже  $k_B = m = 1$ )

$$T = \langle v^2 \rangle / 2 + \omega^2(T)\langle u^2 \rangle / 2 + \Delta U(T), \quad (9)$$

где для первых двух слагаемых, соответствующих кинетической и потенциальной энергии гармонических колебаний, выполняется условие  $\langle v^2 \rangle = \omega^2(T) \langle u^2 \rangle = T^*$ . Здесь мы ввели эффективную температуру частицы  $T^*$ , которая может отличаться от температуры термостата  $T$ .

Решая уравнения самосогласования (9), получаем ( $\tau = T/E_b$ )

$$\langle u^2 \rangle = \begin{cases} R \left( 1 - \sqrt{1 - 5\tau/6} \right) / 10C, & \tau < \tau_c = 6/5, \\ R \left[ 1 + \sqrt{1 + 3(\tau - 1)/3} \right] / 10C, & \tau > \tau_c. \end{cases} \quad (10)$$

Заметим, что полученные выражения не имеют качественного отличия от аналогичных из работы [6] и при описании динамических характеристик системы, содержащих ангармонические дефекты, можно ограничиться традиционным приближением для самосогласования. Что же касается энергетических характеристик отдельного ангармонического осциллятора, то учет постоянного члена в псевдогармоническом потенциале (7) носит, как будет показано ниже, принципиальный характер.

Для потенциала  $U_2(r)$  эффективный потенциал имеет вид

$$\tilde{U}_2(r, T) = Ar^2/2 + B \exp[-ar^2/(1+y)] / \sqrt{1+y}, \quad (11)$$

где  $y = 2a\langle u^2 \rangle$  — безразмерный коррелятор. Для эффективных параметров псевдогармонических колебаний из (7) можно получить

$$\omega^2(\tau) = \begin{cases} 2A \ln [\beta/(1+y)^{3/2}], & \tau < \tau_c, \\ A [1 - \beta/(1+y)^{3/2}], & \tau > \tau_c, \end{cases} \quad (12)$$

$$\Delta U(T) = \begin{cases} B [y \ln \beta - 3(1+y) \ln(1+y)/2 + y] / \beta, & \tau < \tau_c, \\ B [\beta/(1+y)^{1/2} - \ln \beta - 1] / \beta, & \tau > \tau_c. \end{cases} \quad (13)$$

Здесь

$$\tau = T/E_b = T/B(1 - 1/\beta - \ln \beta/\beta), \quad \beta = 2Ba/A.$$

Уравнение самосогласования (9) при этом можно решить только численно. Заметим, что используемое в работе псевдогармоническое приближение достаточно грубое и носит качественный характер. Именно с этим связаны разрывы функций в точке  $\tau_c$ .

## 2. Результаты вычислений и их обсуждение

Результаты вычислений кинетической  $E_{\text{kin}} = \langle u^2 \rangle \omega^2/2$  и потенциальной  $U = T - E_{\text{kin}}$  энергий ангармонических осцилляторов в потенциалах  $U_1(r)$  и  $U_2(r)$  представлены на рис. 1, 2. Как оказалось, минимальное значение потенциала  $\tilde{U}_1(r)$  увеличивается с ростом температуры (рис. 1, а), что приводит к тому, что потенциальная энергия такого осциллятора во всем температурном интервале больше, чем кинетическая (рис. 1, б). С расчетными параметрами, соответствующими температуре, большей  $\tau_c$ , эффективная температура осциллятора  $T^*$  может

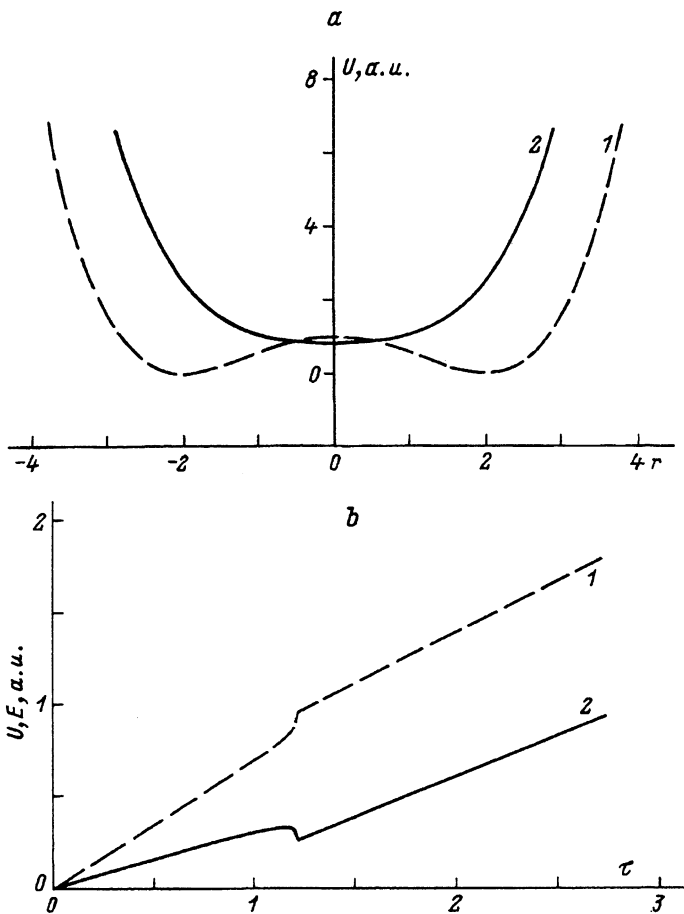


Рис. 1. а) Эффективный потенциал  $\tilde{U}_1(r)$  при  $\tau = 0$  (1) и  $\tau > \tau_c$  (2). б) Зависимость потенциальной (1) и кинетической (2) энергии ангармонического осциллятора, находящегося в потенциале  $U_1(r)$ , от температуры термостата.

составлять только  $\sim 40\%$  от температуры термостата  $T$ . Малые значения  $E_{\text{kin}}$  при  $\tau > \tau_c$  обусловлены сильным смягчением потенциала, нескомпенсированным увеличением значения коррелятора.

Для потенциала  $U_2(r)$  энергетические характеристики осциллятора ведут себя другим образом. При  $\tau > \tau_c$  минимальное значение  $\tilde{U}_2(r)$  становится меньше минимального значения  $U_2(r)$  (рис. 2,а), что приводит к возрастанию кинетической энергии за счет потенциальной (рис. 2,б). В точке перехода эффективная температура такого осциллятора может значительно превышать температуру термостата (в случае, изображенном на рис. 2,б, получаем  $T^*/T \cong 1.7$ ).

Проведенные исследования позволяют дать качественную картину процессам дефектообразования в сильноангармонических системах. В самом деле, из полученных результатов следует, что в системах, содержащих примесные ангармонические осцилляторы, может происходить перераспределение энергии по объему. Вблизи дефектов могут

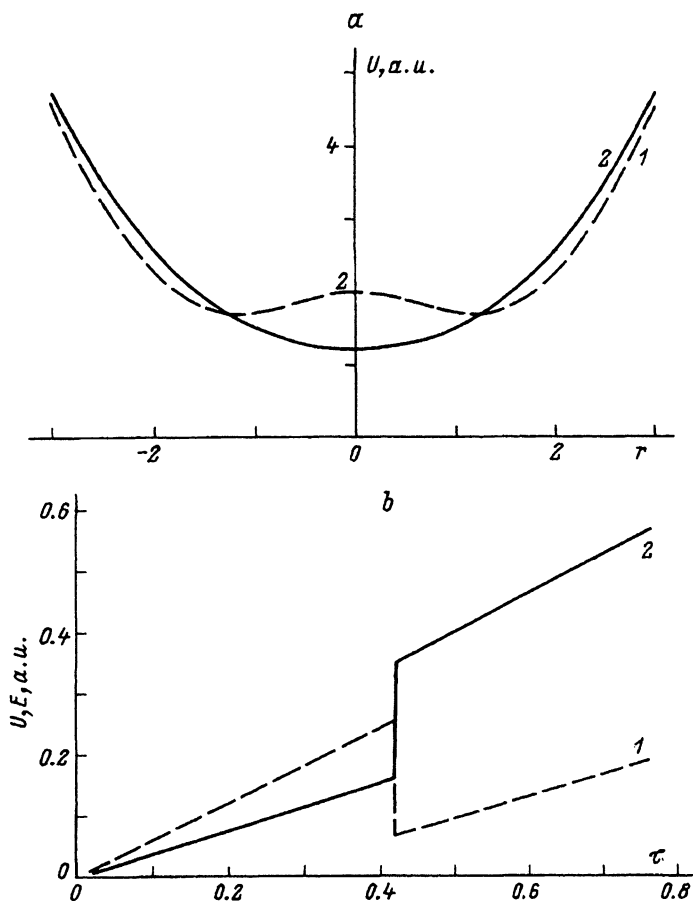


Рис. 2. а — то же, что и на рис. 1, а для потенциала  $U_2(r)$ ; б — то же, что и на рис. 1, б для потенциала  $U_2(r)$ .

образовываться локальные области, в которых средняя кинетическая энергия, приходящаяся на атом, может быть как больше, так и меньше средней по кристаллу в зависимости от вида ангармонизма.

Возникновение «горячих» точек, которые наблюдались в квазидвумерных системах вблизи атомов стронция [4], очевидно, связано с тем, что эффективный решеточный потенциал, действующий на атомы кислорода, подобен модельному потенциалу  $U_2(r)$  из нашей работы. Согласно гипотезе авторов работы [4], появление таких динамических дефектов может в определенной степени повлиять на температуру сверхпроводящего перехода, поскольку эффективная температура матрицы такой системы становится меньше температуры термостата.

Для объяснения процессов образования структурных дефектов в идеальной ангармонической системе при температурах, близких к температуре плавления, наряду с результатами данной работы необходимо привлечь дополнительные модельные представления работ [7-9]. В самом деле, согласно результатам этих работ, в идеальной ангармо-

нической системе всегда существуют динамически устойчивые дефектные области, в которых реализуются локализованные колебания. Для этих локализованных колебаний становится возможным рассмотрение, предлагаемое в настоящей работе. Результаты, полученные с потенциалом  $U_1(r)$ , демонстрируют возможность появления в такой системе низкочастотных колебаний большой амплитуды (статических дефектов), которые могут приводить к образованию структурных дефектов.

Таким образом, результаты настоящей работы наряду с результатами, полученными методом молекулярной динамики, позволяют понять механизмы процессов дефектообразования в сильноангармонических системах.

### Список литературы

- [1] Chudinov V.G., Protasov V.I. // Phys. Stat. Sol. (a). 1984. V. 85. P. 105–112.
- [2] Chudinov V.G., Cotterill R.M.J., Andreev V.V. // Phys. Stat. Sol. (a). 1980. V. 112. P. 187–193.
- [3] Chudinov V.G., Andreev V.V. // Phys. Stat. Sol. (a). 1990. V. 118. P. 415–423.
- [4] Чудинов В.Г., Чирков А.Г., Долгушева Е.Б., Дядин В.М. // Сверхпроводимость. 1993. Т. 6. С. 204–214.
- [5] Саламатов Е.И. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 7. С. 2134–2143.
- [6] Salamatov E.I. // Phys. Stat. Sol. (b). 1993. V. 177. P. 75–84.
- [7] Sievers A.I., Takeno S. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 970–974.
- [8] Takeno S., Sievers A.I. // Solid State Commun. 1988. V. 67. P. 1023–1027.
- [9] Sievers A.I., Takeno S. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 3374–3379.
- [10] Plakida N.M., Siclos T. // Acta Physica Hung. 1978. V. 45. P. 36–374.
- [11] Plakida N.M., Ivanov V.V. // Phys. Stat. Sol. (b). 1980. V. 101. P. 627–635.

Физико-технический институт УрО РАН  
Ижевск

Поступило в Редакцию  
22 апреля 1993 г.  
В окончательной редакции  
6 декабря 1993 г.