

УДК 536.7—53 : 52

ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫЕ СОСТОЯНИЯ ПАРАМЕТРА ДАЛЬНОГО ПОРЯДКА В СОЕДИНЕНИЯХ СО СТРУКТУРОЙ А-15 ПРИ ОБЛУЧЕНИИ

Н. Н. Дегтяренко, В. Ф. Елесин, В. А. Кашурников, Д. В. Петров,
Ю. П. Скопинцев

Развита модель, описывающая пространственно-неоднородные распределения параметра дальнего порядка в соединениях со структурой А-15 при облучении. Показано, что при определенных граничных условиях существуют устойчивые неоднородные стационарные распределения параметра порядка. Изучена динамика установления неоднородного состояния. Установлено, что в определенном интервале температур и плотностей потока излучения, а также при некотором составе может существовать стационарная волна переупорядочения, разделяющая две фазы с различными значениями параметра порядка. Рассчитана скорость движения ее фронта.

Для сверхпроводящих соединений со структурой А-15 существует экспериментально подтверждаемая связь между упорядоченностью и многими важными параметрами, такими как критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние T_K , остаточное сопротивление ρ , постоянная решетки a и др. [1].

В отсутствие облучения теория упорядочения для соединений А-15 развита в [2-4], а с учетом облучения в [5, 6]. В этих моделях расчет проведен для пространственно-однородного распределения параметра дальнего порядка S в приближении среднего поля.

В данной работе обобщается на пространственно-неоднородный случай модель [5, 6]. Показано, что при определенных граничных условиях существуют устойчивые неоднородные стационарные распределения S . Исследована динамика установления неоднородного состояния. Показано, что в определенном интервале температур и плотностей потока излучения, а также при определенном соотношении компонент соединения может существовать стационарная волна переупорядочения, разделяющая две фазы с различными значениями S . Рассчитана скорость движения ее фронта.

1. Уравнение для параметра дальнего порядка в однородном случае

Предположим, что кристаллическая решетка геометрически идеальна, тип ее структуры не изменяется, а сплав однофазен. Предположим, что сечения смещения атомов двух сортов равны ($\alpha_A = \alpha_B = \alpha$) и равны потенциалы парного взаимодействия атомов одного сорта ($v_{AA} = v_{BB} \neq v_{AB}$). Только при этих предположениях удается получить уравнение для параметра дальнего порядка S в пространственно-однородном случае [5, 6]

$$\frac{dS}{dt} = f(S), \quad f(S) = -\alpha\Phi S + \frac{\nu_0}{2} \left[(1 + \varepsilon - S)(3 - \varepsilon - 3S) \exp\left(-\frac{E_1 + S\omega}{\theta}\right) - \right. \\ \left. - (3 - \varepsilon + S)(1 + \varepsilon + 3S) \exp\left(-\frac{E_2 - S\omega}{\theta}\right) \right], \quad \omega = 2\omega_3 + \frac{\omega_1}{2} - 6\omega_2,$$

$$E_2 - E_1 = (1 - \varepsilon)(4\omega_2 - 4\omega_3 - \omega_1), \quad (1)$$

где ν_0 — частотный фактор; $\omega_1, \omega_2, \omega_3$ — энергии упорядочения в трех координационных сферах; Θ — температура; Φ — плотность потока излучения; ε характеризует отклонение от стехиометрического состава ($-1 \leq \varepsilon \leq 3$). В качестве механизма термического переупорядочения рассмотрен направленный обмен пар атомов разного сорта местами на узлах подрешеток; E_1, E_2 — энергии активации упорядочивающего и разупорядочивающего обменов при $S=0$ соответственно.

Если в качестве термических процессов переупорядочения рассматривать движения атомов, вызванные переходом вакансий между подрешетками, то уравнение для S в этом случае совпадает с (1) с точностью до переобозначений (см. [6]). Поэтому все результаты, полученные ниже, будут справедливы и для этой модели.

В случае, если поток излучения будет пульсирующим с временем между импульсами τ_1 , то полученное уравнение будет справедливо, если τ_1 много меньше времени релаксации S к стационарному состоянию: $\tau_2 \sim \exp(E_2/\Theta)/\nu_0$.

2. Однородные стационарные решения

В однородном стационарном случае уравнение для S сводится к следующему:

$$\partial U / \partial S = 0, \quad (2)$$

где

$$F = -U = - \int_0^S f(S') dS'$$

имеет смысл плотности свободной энергии сплава. Таким образом, однородные S являются точками экстремумов $U(S)$.

Рассмотрим поведение «энергии» U в зависимости от Φ и Θ . Анализ $U(S)$ показывает, что существуют критические температуры $\Theta_c \sim \omega$, а также критические плотности потока $\Phi = (\omega \nu_0 / \Theta \alpha) \exp(E_2/\Theta)$, при которых происходит фазовый переход в состояние с другим параметром порядка (либо в разупорядоченное состояние $S=0$). $U(S)$ может иметь два экстремума в точках $S=S_0$ и $S=S_{\max}$, соответствующих разным фазам. В дальнейшем рассмотрим следующий предельный случай, для которого реализуется такой вид $U(S)$.

а) Низкие температуры и плотности потока излучения для соединения стехиометрического состава ($\varepsilon=0$). В этом случае $S\omega/\Theta \gg 1$. Учитывая, что $\omega \ll E_1, E_2$, из (2) получаем

$$U(S) = -\frac{\Phi_1 S^2}{2} - \frac{(1-S)^3}{3}, \quad \Phi_1 = \frac{2\alpha\Phi}{3\nu_0} \exp\left(\frac{E_1}{\Theta}\right),$$

$$S_{1 \max} = 1 + \frac{\Phi_1}{2} - \left\{ \left(1 + \frac{\Phi_1}{2}\right) - 1 \right\}^{1/2}. \quad (3)$$

Уточним пределы применимости (3). Из $1 \ll S\omega/\Theta \ll S_{1 \max} \omega/\Theta$ получаем

$$\Phi \ll \frac{3\nu_0\Theta}{2\alpha\omega} \exp\left(-\frac{E_1}{\Theta}\right).$$

Рассмотрим $U(S)$ при температуре $\Theta \sim \omega$, когда возможны переходы из одной упорядоченной фазы в другую. Анализ показывает, что в этом случае $U(S)$ имеет три экстремума в точках $S=S_0, S=S_{\min}$ и $S=S_{\max}$ (рис. 1, б). При некотором $\Phi = \Phi_0$ «энергии» максимумов сравниваются ($U(S_0) = U(S_{\max})$) и реализуется так называемое слоевое решение [7]. Здесь полезно исследовать следующие предельные случаи.

б) Рассмотрим интервал температур

$$\frac{2\omega}{3 + \sqrt{3}} (1 - S_0) < \Theta < \frac{\omega}{2} (1 - S_0)$$

для случая полной стехиометрии ($\epsilon=0$). Вблизи области фазового перехода выполняется условие $(S-S_0)\omega/\Theta \ll 1$. Разложим $U(S)$ по степеням $\eta = S-S_0$, ограничиваясь членами $\sim \eta^4$

$$U(\eta) = -\eta^2 \left\{ \frac{\delta}{2} - \frac{\varphi\eta}{3} + \frac{\alpha\eta^2}{4} \right\}. \quad (4)$$

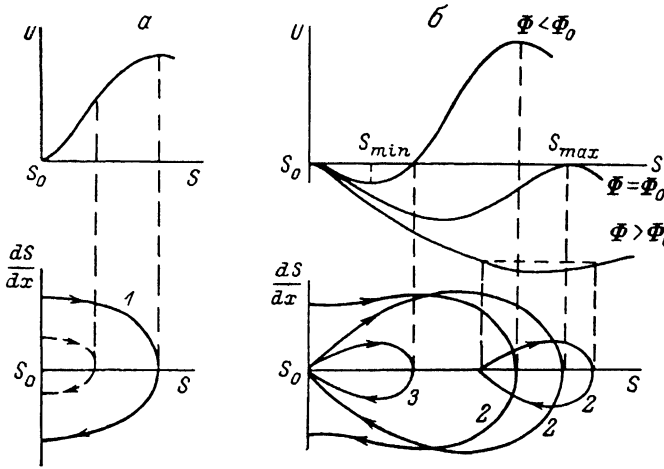


Рис. 1. «Энергия» U и фазовые траектории.

a — два экстремума, b — три экстремума. 1-3 — «предельные траектории».

Если $\tilde{\gamma} = (E_2 - E_1)/\Theta \ll 1$, то параметры δ , φ , α принимают наглядный вид

$$\delta = 9 \left(\frac{\Phi}{\Phi_C} - 1 \right) \left(\frac{\Theta_C}{\Theta} - 1 \right), \quad \varphi = \frac{6\omega}{\Theta} \left(\frac{\omega}{2\Theta} - 2 \right),$$

$$\alpha = \frac{4\omega}{\Theta} \left(\frac{3}{2} - \left(\frac{3}{2} - \frac{\omega}{\Theta} \right)^2 \right).$$

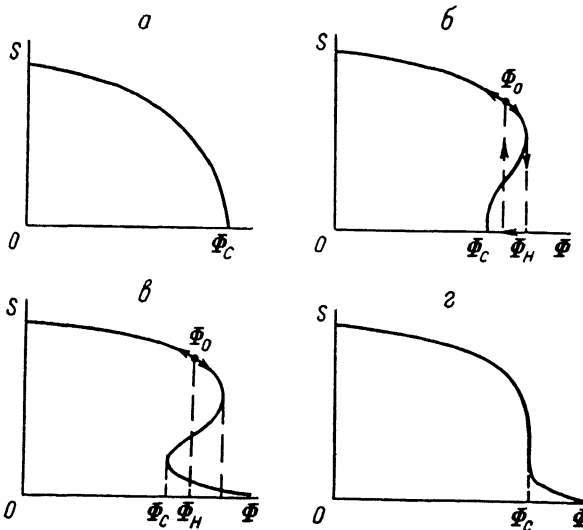


Рис. 2. Параметр дальнего порядка в однородном случае.

a, b — $U(S)$ с двумя экстремумами; c, d — с тремя экстремумами. Стрелками обозначен фазовый переход первого рода.

Здесь $\Theta_C = 2\omega/3$ — критическая температура,

$$\Phi_C = \frac{9\nu_0}{2\alpha} \left(\frac{\Theta_C}{\Theta} - 1 \right) \exp\left(-\frac{E_2}{\Theta}\right)$$

— критическая плотность потока излучения.

в) Случай сильного отклонения от стехиометрии, так что $\mu=1-\varepsilon \ll 1$. Рассмотрим интервал температур $(17-\sqrt{33})/4\mu < 2\omega/\Theta < 3/\mu$. Положим для упрощения расчетов $E_1=E_2$, тогда (2) имеет тривиальное решение $S=0$. Вблизи области фазового перехода ($S \ll 1$) находим $U(S)$, оставляя члены $\sim S^4$

$$U(S) = -S^2 \left\{ \frac{\delta}{2} - \frac{\tilde{\varphi}}{3} S + \frac{\tilde{\alpha} S^2}{4} \right\}, \quad \delta = \Phi_2 + 16 - \mu\beta, \quad \tilde{\varphi} = 2\beta(\mu\beta - 2),$$

$$\alpha = \frac{2}{3} \beta^2 (3 - \mu\beta), \quad S_{\max, \min} = \frac{\tilde{\varphi}}{2\alpha} \left\{ 1 \pm \left(1 - \frac{4\tilde{\alpha}\delta}{\tilde{\varphi}^2} \right)^{1/2} \right\}. \quad (5)$$

Уравнение (5) с точностью до переобозначений совпадает с (4); поэтому весь дальнейший анализ, проводимый для случая «б», будет справедлив и для «в».

г) Отметим еще один частный случай, поддающийся анализу и относящийся к зависимости $U(S)$ с двумя экстремумами

$$\varepsilon = 0, \quad \frac{S\omega}{\Theta} \ll 1, \quad \Theta = \frac{\omega}{2}, \quad U(\eta) = -\eta^2 \left(\frac{\delta}{2} + \frac{a\eta^2}{4} \right),$$

$$\eta_{\max}^2 = -\frac{\delta}{a}, \quad \Phi_2 < \Phi_{2c}. \quad (6)$$

Случай «г» есть выражение (4) при конкретной температуре, где $\varphi=0$.

Зависимость $S=S(\varphi)$ для двух рассмотренных выше типов $U(S)$ показана на рис. 2. В наших предельных случаях эта зависимость описывается $S_0, S_{\max, \min}, \eta_{\max, \min}$, приведенными в (3)–(6). В случаях «б», «в» при $\Phi > \Phi_c$ параметр порядка неоднозначен. Решение с положительной производной $\partial S/\partial \Phi$ локально неустойчиво.

3. Уравнения для параметра порядка в неоднородном случае

Рассмотрим неоднородные состояния параметра дальнего порядка, ограничимся одномерным случаем. Тогда уравнение для $S(x, t)$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial U}{\partial S}, \quad (7)$$

где

$$D = D(\Theta, S, \Phi) = a^2 v_0 C_V \exp\left(-\frac{E_D + \Delta S}{\Theta}\right),$$

a — постоянная решетки, C_V — концентрация вакансий, E_D — энергия активации диффузии вакансий в разупорядоченном соединении ($S=0$), $\Delta \ll E_D$. Учитывая, что $E_D \gg \Delta$, в дальнейшем будем пренебрегать зависимостью коэффициента диффузии от S .

К уравнению (7) добавим следующие граничные условия:

$$\frac{dS}{dx} \Big|_{\pm L/2} = \mp b_{\pm} S \Big|_{\pm L/2}, \quad b_{\pm} \geq 0. \quad (8)$$

Здесь L — длина рассматриваемого образца, причем $L \gg L_D(\Theta)$, где $L_D(\Theta) = (D/2v_0)^{1/2} \exp(E_D/2\Theta)$ — длина диффузии параметра порядка. Условия (8) означают, что поток дефектов замещения с границы в объем пленки пропорционален их концентрации на границе. Если $b_{\pm}=0$, то поток равен нулю; если $b_{\pm}=\infty$ ($S_{\pm L/2}=0$), то на границе постоянно рождаются дефекты с интенсивностью, много большей процессов разупорядочения, учитываемых в (7). Таким образом, возможны ситуации, когда $0 \leq b_{\pm} < \infty$.

В дальнейшем нас будут интересовать стационарные состояния. В этом случае (7) принимает вид уравнения движения

$$D \frac{d^2 S}{dx^2} = -\frac{\partial U}{\partial S}. \quad (9)$$

Отметим, также, что, варьируя следуюшую функцию

$$I = \int_{-L/2}^{L/2} dx \left\{ \frac{D}{2} \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 - U(S) \right\} + \frac{b_-}{2} S^2 \left(-\frac{L}{2} \right) + \frac{b_+}{2} S^2 \left(\frac{L}{2} \right), \quad (10)$$

представляющий собой полную свободную конфигурационную энергию образца, можно получить уравнение для S (9) и граничные условия (8).

4. Неоднородные стационарные решения

Первый интеграл (9) дается уравнением

$$\frac{1}{2} D \left(\frac{dS}{dx} \right)^2 = C - U(S), \quad C = \text{const.}$$

В общем случае решение (9) не выражается в элементарных функциях. Однако, согласно [8], устойчивые решения следует искать среди «предельных» траекторий, для которых два корня уравнения $C - U(S) = 0$ сливаются (траектории 1-3 на рис. 1). Для траекторий 1, 2 два корня уравнения $C - U(S) = 0$ сливаются в точке $S = S_{\max}$, для траектории 3 — в точке $S = S_0$.

В наших предельных случаях эти решения выражаются через элементарные функции.

а) Для траектории 1 в этом случае

$$C - U(S) = \frac{1}{3} (S_{\max} - S)^2 (\tilde{S} - S), \quad \tilde{S} = 3 \left(1 + \frac{\Phi_1}{2} \right) - 2S_{\max},$$

соответствующее решение, описывающее полупериод 1 с автоматически выполненным граничным условием

$$\left. \frac{dS}{dx} \right|_{+L/2} = 0 \quad \left(\frac{L}{L_D(\Theta)} \gg 1 \right)$$

определяется выражением

$$S(x_1) = S_{1 \max} - \frac{\sqrt{2} (\tilde{S} - S_{1 \max})}{\text{ch} \left\{ \left(\frac{2}{3} (\tilde{S} - S_{1 \max}) \right)^{1/2} (x_1 + C_1) \right\}}, \quad (11)$$

где

$$x_1 = \frac{\sqrt{3} X}{L_D(\Theta)} \exp \left(\frac{\tilde{\eta}}{2} \right).$$

б) Здесь существуют две предельные траектории (2, 3 на рис. 1, б). Для полупериода траектории 2 справедливо выражение

$$\eta(x_2) = \eta_{\max} - \frac{\sqrt{3} (\eta_{\max} \varphi - 2\delta)}{\left| \frac{3}{2} \alpha \varphi \eta_{\max} - \varphi^2 \right|^{1/2} Z(\delta, x_2) + 3\alpha \eta_{\max} - \varphi},$$

$$Z(\delta, x_2) = \begin{cases} \text{sh} \{ (\varphi \eta_{\max} - 2\delta)^{1/2} (x_2 + C_2) \}, & \delta < \delta_0, \\ \text{ch} \{ (\varphi \eta_{\max} - 2\delta)^{1/2} (x_2 + C_3) \}, & \delta > \delta_0, \end{cases} \quad x_2 = \frac{x}{L_D(\Theta)}. \quad (12)$$

При $\delta = \delta_0$ решение (12) преобразуется в особое слоевое

$$\eta(x_2) = \eta_{0 \max} \{ 1 + \exp[-\delta_0^{1/2} (x_2 + C_4)] \},$$

$$\eta_{0 \max} = \eta_{\max}(\delta_0) = 2\varphi^2/3\alpha = 3\delta_0. \quad (13)$$

Траектория 3 существует только при $\delta \leq \delta_0$ ($\Phi \leq \Phi_0$). Для нее

$$C - U(\eta) = \eta^2 \left\{ \frac{\delta}{2} - \eta \frac{\varphi}{3} + \frac{\alpha \eta^2}{4} \right\}.$$

Здесь справедливо следующее распределение $\eta(x)$:

$$\eta(x_2) = \frac{3\delta}{\varphi + \left(\varphi^2 - \frac{9}{2} \alpha \delta \right)^{1/2} \text{ch} \{ \delta^{1/2} (x_2 + C_5) \}}. \quad (14)$$

При $\delta = \delta_0$ (14) также переходит в слоевое решение (13).

в) Решения в этом предельном случае совпадают со случаем «б» с точностью до переобозначений: $\eta \rightarrow S'$, $\delta \rightarrow \delta'$, $\varphi \rightarrow \tilde{\varphi}$, $\alpha \rightarrow \tilde{\alpha}$.

г) Здесь предельная траектория \bar{l} реализуется при условии

$$C - U(\eta) = \frac{\alpha}{4} (\eta^2 - \eta_{\max}^2)^2.$$

Решение, описывающее полупериод этой траектории, имеет вид

$$\eta(x_2) = \eta_{\max} \operatorname{th} \left(\left| \frac{\delta}{2} \right|^{1/2} (x_2 + C_6) \right). \quad (15)$$

В (11)–(15) константы C_i определяются из граничных условий при $x = -L/2$.

5. Стационарная волна границы раздела фаз

Рассмотрим граничные условия $dS/dx|_{\pm L/2} = 0$. В этом случае реализуются однородные состояния. Среди «предельных» неоднородных решений только распределения (12) при $\delta_0 < \delta < \delta_H$, (13) при $\delta = \delta_0$ и (14) при $\delta < \delta_0$ могут удовлетворить таким граничным условиям. Анализ устойчивости для них проводим, следуя [8], представив $S(x, t)$ в виде

$$S(x, t) = S(x) + \sum_{\gamma} \sigma_{\gamma}(x) \exp(-\gamma t), \quad \sigma_{\gamma}(x) \ll S(x),$$

где $S(x)$ — исследуемое на устойчивость решение уравнения (9).

Аналогичная проблема исследования устойчивости решений уравнения типа (9) возникает в теории плазмы [9], в теории полупроводников с отрицательной дифференциальной проводимостью [10], в теории неравновесных сверхпроводников [7, 11, 12].

Подставив $S(x, t)$ в (7) и граничные условия, получаем задачу Штурма—Лиувилля на собственные функции $\sigma_{\gamma}(x)$ и собственные значения γ

$$\begin{aligned} - \left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\partial U}{\partial S} \right\} \sigma_{\gamma}(x) &= \gamma \sigma_{\gamma}(x), \\ \frac{d\sigma_{\gamma}}{dx} \Big|_{\pm L/2} &= \mp b_{\pm} \sigma_{\gamma} \Big|_{\pm L/2}. \end{aligned} \quad (16)$$

Если хотя бы один декремент $\gamma < 0$, то $S(x)$ — неустойчиво. Авторы [10], подставив решение (16) при $\gamma = 0$ в виде

$$\sigma_{\gamma}(x) = C_1 \frac{dS}{dx} + C_2 \frac{dS}{dx} \int \frac{dx}{(dS/dx)^2}, \quad (17)$$

показали, используя осцилляционную теорему, что все решения (16) неустойчивы, за исключением слоевого. В [8] отмечено, что второй член в (17) расходуется для предельных траекторий в точке $S = S_{\max}$ (или $S = S_0$), поэтому необходимо положить $C_2 = 0$. Однако в этом случае первый член (17) не удовлетворяет граничным условиям (кроме слоевого решения). Поэтому пользоваться анализом [10] для предельных траекторий нельзя и необходимо точно решать задачу Штурма—Лиувилля.

Покажем, что распределения (12), (14) неустойчивы, за исключением слоевого решения (13). Для полупериода (12) при $\delta_0 \leq \delta \leq \delta_H$, подставив в (16), получаем после замены переменных

$$\psi(\xi) \frac{d^2 \sigma_{\gamma}}{d\xi^2} + \frac{1}{2} \frac{d\psi}{d\xi} \frac{d\sigma_{\gamma}}{d\xi} - \frac{1}{2} \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} \sigma_{\gamma} = -\gamma \sigma_{\gamma}, \quad \psi^{1/2}(\xi) \frac{d\sigma_{\gamma}}{d\xi} \Big|_{0,1} = 0, \quad (18)$$

где введено переобозначение

$$\gamma \equiv \frac{2\gamma}{\nu_0} \exp\left(\frac{E_2}{\theta}\right),$$

$$\begin{aligned}\xi &= (\eta_{\max} - \eta(x)) / (\eta_{\max} - \eta_{-L/2}), \quad \Theta < \xi < 1, \\ \eta_{-L/2} &= \frac{2\varphi}{3\alpha} \left\{ 1 - \frac{3\alpha}{2} \frac{\eta_{\max}}{\varphi} + \left(1 - \frac{3\alpha}{2} \frac{\eta_{\max}}{\varphi} \right)^{1/2} \right\}, \\ \psi(\xi) &= \frac{\alpha}{2} (\eta_{\max} - \eta_{-L/2})^2 \xi^2 (1 - \xi) (\xi_1 - \xi), \\ \xi_1 &= \left(\eta_{\max} - 2 \frac{\delta}{\varphi} \right) / \left(\frac{\alpha}{2} (\eta_{\max} - \eta_{-L/2})^2 \right).\end{aligned}\quad (19)$$

Уравнение (18) — уравнение типа Фукса [13] с четырьмя особыми точками-полюсами. При $\delta = \delta_0$ сливаются полюса ξ_1 и 1 ($\xi_1 \rightarrow 1$) и уравнение (18) переходит в уравнение для полиномов Лежандра (после замены $t = 1 - 2\xi$). Находим нижние значения γ и соответствующие значения функции σ_γ

$$\gamma = 0, \quad \sigma_0(t) = p_2^2(t), \quad \gamma_1 = \varphi^2/6\alpha, \quad \sigma_1(t) = p_2^1(t).$$

Это же можно получить, решая задачу устойчивости для слоевого решения (13). Таким образом, (13) устойчиво и в соответствии с анализом [10] $\gamma_{\min} = 0$.

Найдем поправки к γ_0 , γ_1 и при $\delta \rightarrow \delta_0$. Для этого (16) перепишем в виде

$$\frac{d^2 \gamma}{dx^2} + p^2(x) = 0, \quad p(x) = \left(\gamma + \frac{d^2 U}{dS^2} \right)^{1/2}.$$

При $\delta \rightarrow \delta_0$ для (12) выполняется условие квазиклассического приближения. Получаем в первом приближении по $\delta/\delta_0 - 1$

$$\gamma_0 = -0.59\varphi^2\chi, \quad \gamma_1 = \frac{\varphi^2}{6\alpha} - 0.19\varphi^2\chi^{1/2}, \quad \chi = \frac{\delta}{\delta_0} - 1.\quad (20)$$

Рассмотрим другой предел: $\delta \rightarrow \delta_H$. Здесь сливаются полюса t_1 и $t = \infty$ и уравнение (18) переходит в уравнение Лежандра (после замены $t = (1 - \xi)^{1/2}$). Используя теорию возмущений по малому параметру ξ_1^{-1} , получаем

$$\begin{aligned}\gamma_0 &= (\varphi\Delta_3 - 2\delta) \left\{ -1.25 + \frac{3177}{1792} \xi_1^{-1} \right\}, \\ \gamma_1 &= (\varphi\Delta_3 - 2\delta) \left\{ 0.75 + \frac{12}{35} \xi_1^{-1} \right\}.\end{aligned}\quad (21)$$

Таким образом, из (20) и (21) следует, что (12) неустойчиво.

Для полупериода (14) можно получить, следуя аналогичному анализу, что (14) неустойчиво также; Анализ показывает, что полный период (12) и (14) и более также неустойчив. Действительно, в случае полного периода «потенциал» $V(x) = -\partial^2 U / \partial S^2$ в задаче (16) представляет собой две ямы, разнесенные на большое расстояние. Пользуясь теорией возмущений, легко показать, что сдвиг уровней незначителен и не меняет знака $\gamma_0 < 0$ в (20) — (21).

Таким образом, единственным устойчивым неоднородным распределением при граничных условиях $dS/dx|_{\pm L/2} = 0$ является слоевое решение. Это подтверждается энергетическими соображениями. Действительно, можно показать, что слоевое решение при $\Phi = \Phi_0$ реализует абсолютный минимум свободной энергии (10). Однородные решения, имеющие место в этом случае, также реализуют абсолютный минимум при $\Phi < \Phi_0$ и локальный при $\Phi > \Phi_0$.

С учетом вышесказанного динамику установления стационарного состояния можно представить следующим образом.

1. В случае двух экстремумов в $U(S)$ стационарные однородные состояния существуют вплоть до $\Phi = \Phi_C$, а затем происходит фазовый переход второго рода в состояние с другой фазой $S = S_0$.

2. При наличии трех экстремумов возможен фазовый переход первого рода. Если образец однороден, т. е. нет конечных возмущений параметра порядка типа зародышей фазы разупорядочения, то наблюдается гистерезис — при увеличении плотности потока излучения вплоть до Φ_H существует однородная

упорядоченная фаза с значением параметра порядка $S=S_{\max}$, а затем скачком происходит переход в фазу с другим значением S_0 (либо $S=0$). При последующем уменьшении Φ система остается при абсолютном минимуме энергии S_0 вплоть до $\Phi_0 < \Phi_H$, где происходит обратный переход в состояние с $S=S_{\max}$ (рис. 2, б, в).

Если же имеются зародыши фазы разупорядочения, то возникает нестационарное неоднородное состояние, порождаемое конечным возмущением: слоевое решение разделяет две фазы с различными S , причем граница раздела двигается с постоянной скоростью, равной

$$v_c = \frac{\delta - \delta_0}{\delta_0} 3\sqrt{\delta_0} \left(\frac{D\nu_0}{2}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_2}{2\Theta}\right). \quad (22)$$

Отметим, что скорость v_c для некоторых температур может существенно возрастать. Так, при $\Theta \rightarrow \Theta_D = 2\omega/(3 + \sqrt{3})$

$$v_c \sim \frac{\Phi - \Phi_0}{\Phi_0 - \Phi_c} \left(\frac{\Theta}{\Theta_D} - 1\right)^{-1/2}. \quad (23)$$

При $\Phi > \Phi_0$ такая стационарная волна переводит образец в разупорядоченное состояние (либо $S=S_0$). При $\Phi < \Phi_0$ граница раздела движется в сторону увеличения S и конечным состоянием является однородное S_{\max} .

6. Устойчивые неоднородные стационарные состояния

Положим в граничных условиях (8) $b_{\pm} \neq 0$. В этом случае реализуются неоднородные состояния S . Как отмечалось выше [8], устойчивые распределения следует искать среди «предельных» траекторий. Решаем задачу Штурма—Лиувилля (16) для предельных траекторий (11)—(15). Для полупериода (11) результаты аналитических и численных расчетов дают: $\gamma_{\min} = 2a/3 > 0$, $a = \bar{S} - S_{1\max}$.

Для полупериода (12) при $\delta < \delta_0$, подставив (12) в (16), имеем также уравнение типа Фукса [13] с четырьмя полюсами: $0, t_1, t_2, \infty$, $t_{1,2} \approx 1 \pm i(1 - \delta/\delta_0)^{1/2}$, $\delta \rightarrow \delta_0$. При $\delta = \delta_0 - t_1 = t_2 = 1$ получаем уравнение Лежандра и $\gamma_0 = 0$, $\gamma_1 = \varphi^2/6a$. Поправки к γ ищем с помощью квазиклассического приближения, разлагая все выражения по $\chi_2 = (1 - \delta/\delta_0) \ll 1$

$$\gamma_0 = 0.52\varphi^2\chi_2, \quad \gamma_1 = \frac{\varphi^2}{6a} + 0.17\varphi^2\chi_2^{1/2}. \quad (24)$$

Заметим, что при $\delta_0 \leq \delta \leq \delta_H$ также устойчиво распределение (12), если оно представляет собой часть траектории вблизи предельной точки η_{\max} и соответственно если значения b_{\pm} находятся в некотором малом интервале $0 \leq b_{\pm} < b_c(\delta)$, где $b_c(\delta_0) = \delta_0^{1/2}$, $b_c(\delta_H) = 0$, $b = b(2D/\nu_0)^{1/2} \exp(E_2/2\Theta)$. В этом случае при условии $(\eta_{\max} - \eta)/\eta_{\max} \ll 1$ минимальный декремент равен

$$\gamma_0 = b_c^2(\delta) - \max\{b_{\pm}^2\}. \quad (25)$$

Распределение (14) и при $b_{\pm} \neq 0$ неустойчиво. Это подтверждают численные и аналитические расчеты.

Для полупериода (15), подставив (15) в (16), получим уравнение Лежандра и декремент $\gamma_{\min} = 3/2 \cdot |\delta_2|$.

Устойчивыми оказались и решения солитонного типа — полные периоды (11)—(13), (15), а также солитонные и монотонные (11)—(13), (15) при любых граничных условиях типа (8) (за исключением случая $\delta_0 < \delta < \delta_H$, рассмотренного выше).

Рассмотрим динамику установления стационарного неоднородного состояния.

1. Для случая двух экстремумов $U(S)$ реализуются распределения (11), (15). При медленном изменении Φ происходит «подстраивание» параметра порядка. Это справедливо для любых граничных условиях типа (8). При $\Phi = \Phi_c$ или $\Theta = \Theta_c$ образец претерпевает фазовый переход второго рода в состояние с $S = S_0$ (либо $S = 0$).

2. Случай трех экстремумов. Реализуются состояния (12) и (13). В этом случае поведение образца сильно зависит от граничных условий. Если он однороден, то при медленном «включении» Φ устойчивое распределение (12) существует

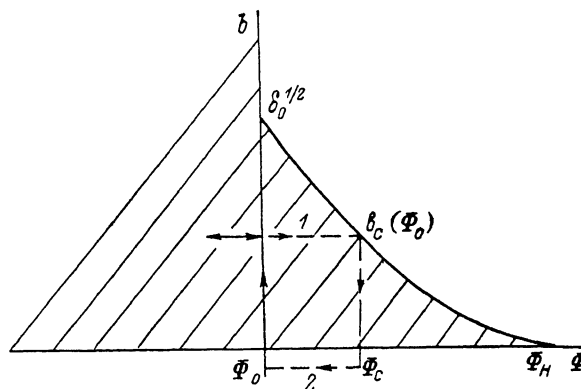


Рис. 3. Диаграмма устойчивости при фазовых переходах первого рода (неоднородный случай). Заштрихованная область соответствует устойчивому распределению, стрелками обозначен фазовый переход первого рода: 1 — упорядоченное состояние $S(x)$, 2 — состояние $S=S_0$. Здесь $b = \max\{b_{\pm}\}$.

существует вплоть до $\Phi = \Phi_0$. При условии $\max\{b_{\pm}\} \geq b_c(\Phi_0) = b_c(\delta)$ происходит фазовый переход в состояние с $S=S_0$ ($S=0$) при $\Phi = \Phi_0$. Если же $0 \leq b_{\pm} \leq b_c(\Phi_0)$, наблюдается гистерезис: распределение (12) существует (уже в мета-

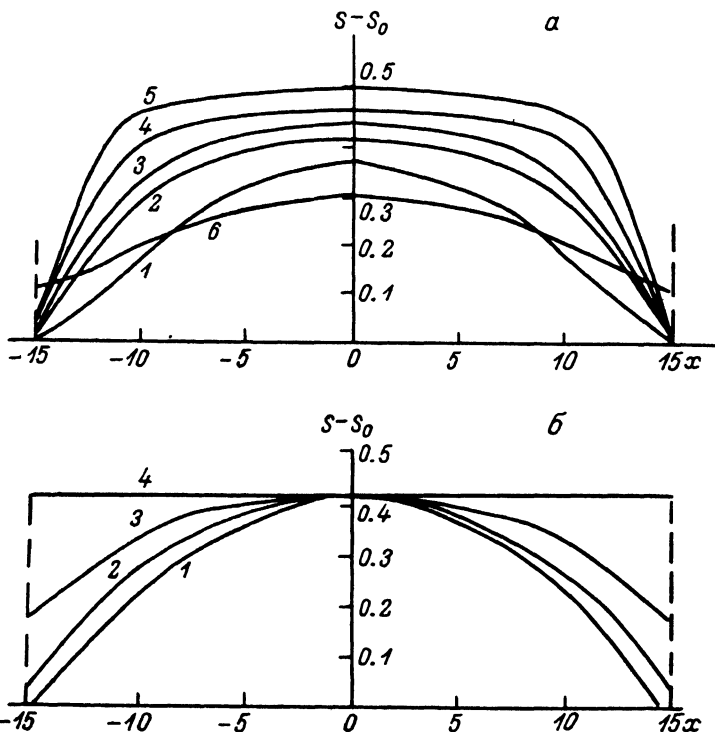


Рис. 4. Устойчивые неоднородные распределения параметра дальнего порядка в одномерном случае вблизи области фазового перехода $\theta \sim \theta_c$, $\Phi \sim \Phi_c$.

Здесь $L/L_D(\theta) = 30$, $dS/dx|_{\pm L/2} = \mp b_{\pm} S|_{\pm L/2}$, где $x \equiv \varphi\ell/L_D(\theta)$: $S \equiv S\varphi$. а: $b = 2.6$. 1 — $\delta = 0.95\delta_0$, 2 — $0.8\delta_0$, 3 — $0.6\delta_0$, 4 — $0.4\delta_0$, 5 — $0.2\delta_0$, 6 — $1.07\delta_0$ ($b = 6.09$); б: $\delta = 0.7\delta_0$. 1 — $b = 1.2$, 2 — 2.6 , 3 — 0 , 4 — 0 .

стабильном состоянии) вплоть до $\Phi = \Phi_{кр}$ ($\Phi_0 \leq \Phi_{кр} < \Phi_H$), являющегося корнем уравнения $\max\{b_{\pm}\} = b_c(\Phi_{кр})$ (рис. 3), где происходит переход в состояние с $S=S_0$, а при последующем уменьшении Φ система остается при абсолютном

минимуме энергии $S = S_0$ вплоть до $\Phi = \Phi_0$, при котором реализуется обратный переход в упорядоченное состояние (12). Если же имеются зародыши фазы разупорядочения, то, как и при $dS/dx|_{\pm L/2} = 0$, вблизи Φ_0 возникает неоднородное нестационарное состояние и слоевое решение (13) разделяет две фазы с $S = S_{\max}$ и $S = S_0$ ($S = 0$). Граница раздела фаз, двигаясь с постоянной скоростью (22), переводит при $\Phi > \Phi_0$ образец в состояние $S = S_0$, При $\Phi < \Phi_0$ конечным состоянием системы является неоднородное распределение (12).

Заключение

Характерная длина, на которой меняется параметр порядка, $L(\Theta, \Phi)$, существенно возрастает при приближении к области фазового перехода (рис. 4). Действительно, для распределения (15) получаем

$$L(\Theta, \Phi) = L_D(\Theta) \left(\frac{\Theta_C}{\Theta} - 1 \right)^{-1/2} \left(1 - \frac{\Phi}{\Phi_C} \right)^{-1/2},$$

а для (12) при $b_{\pm} \gg 1$, $\Phi < \Phi_0$ имеем

$$L(\Theta, \Phi) = L_D(\Theta) \left\{ 1 - \frac{\Phi}{\Phi_H} \right\}^{1/4} \ln \left[\frac{1}{|1 - \Phi/\Phi_0|} \right], \quad \Phi \rightarrow \Phi_0.$$

Таким образом, вблизи области фазового перехода параметр дальнего порядка меняется на расстояниях, много больших длины диффузии L_D .

Основные результаты работы.

1. В соединениях со структурой А-15 стационарные состояния с $S = 0$ не реализуются (за исключением маловероятного случая $E_1 = E_2$, тогда уравнение (1) совпадает с уравнением для сплава со структурой $L1_2$). Все фазовые переходы являются переходами порядок—порядок, причем возможны переходы с изменением знака S .

2. В случае граничных условий $dS/dx|_{\pm L/2} = 0$ устойчивым состоянием соединения является состояние с однородным распределением S . При низких температурах ($\varepsilon = 0$) устойчивым является слоевое решение, реализующееся только при одном значении $\Phi = \Phi_0$. Если существует конечное возмущение S — зародыши фазы разупорядочения, — то при $\Phi \neq \Phi_0$ бежит стационарная волна, переводящая соединение при $\Phi > \Phi_0$ в состояние $S = S_0$, а при $\Phi < \Phi_0$ в упорядоченное однородное состояние $S = S_{\max}$. Скорость движения фронта волны $\sim \Phi - \Phi_0$ и может существенно возрастать при определенных температурах.

3. Если $b_{\pm} = 0$ в граничных условиях, то реализуются только неоднородные состояния S , причем характерная длина изменения S много больше длины диффузии. Также может реализоваться стационарная волна, и при $\Phi < \Phi_0$ конечным состоянием образца являются устойчивые неоднородные состояния.

4. Если образец однороден (нет зародышей фазы разупорядочения), то могут иметь место фазовый переход первого рода и гистерезис: переход в состояние с более низким значением S происходит при плотности потока Φ , большей той, при которой реализуется обратный переход в упорядоченное состояние.

5. Мы рассматривали зависимость параметра порядка от плотности потока излучения Φ . Однако такие явления, как фазовые переходы первого рода, стационарные волны разупорядочения и т. д., можно получить, меняя температуру Θ при неизменной Φ . Весь анализ аналогичен приведенному выше.

Литература

- [1] Nölshner C., Saetan-Ischenko G. Phys. Rev. B, 1985, v. 32, p. 1519—1531.
- [2] Дегтяренко Н. Н., Елесин В. Ф., Скопинцев Ю. П. В кн.: Металлофизика сверхпроводников. Материалы II научного семинара. Киев, 1983, с. 75.
- [3] Смирнов А. А. ФММ, 1984, т. 58, № 4, с. 668—675.
- [4] Dew-Hughes D., Moehleske S., Welch D. O. J. Nucl. Mater., 1978, v. 72, p. 225—232.
- [5] Дегтяренко Н. Н., Елесин В. Ф., Скопинцев Ю. П. В кн.: Упорядочение атомов и его влияние на свойства сплавов. Материалы VII Всес. совещ. Свердловск, 1983, ч. 2, с. 42—43.

- [6] *Десяренко Н. Н., Елесин В. Ф., Скопинцев Ю. П.* ФММ, 1986, т. 62, № 4, с. 668—675.
[7] *Елесин В. Ф., Копеев Ю. В.* УФН, 1981, т. 133, № 2, с. 259—307.
[8] *Елесин В. Ф., Кашурников В. А.* ЖЭТФ, 1985, т. 88, № 1, с. 145—156.
[9] *Сагдеев Р. Э.* Вопросы теории плазмы. М.: Атомиздат, 1964, в. 4, с. 20—80.
[10] *Басс Ф., Бочков В. С., Гуревич Ю. Г.* ЖЭТФ, 1970, т. 58, № 5, с. 1814—1825.
[11] *Елесин В. Ф.* ЖЭТФ, 1977, т. 72, № 1, с. 355—366.
[12] *Eskern V., Schmid A., Smutz M. J.* Low Temp. Phys., 1979, v. 36, p. 643—687.
[13] *Кратцер А., Франц В.* Трансцендентные функции. М.: ИЛ, 1963.

Московский
инженерно-физический институт

Поступило в Редакцию
22 сентября 1986 г.
В окончательной редакции
27 февраля 1987 г.