

01;05.3

Автосолитон в структурно-неустойчивом кристалле

© Е.Е. Слядников

Отдел проблем информатизации ТНЦ СО РАН, Томск
E-mail: slyad@cc.tpu.edu.ru

Поступило в Редакцию 21 сентября 2004 г.

Показано, что в структурно-неустойчивом кристалле, находящемся в предпереходном состоянии, возникает и распространяется локализованное в пространстве коллективное возбуждение атомной решетки — автосолитон, который, с одной стороны, представляет собой структурный дефект, состоящий из двух межфазных границ, разделенных второй фазой, а с другой стороны, импульс поля неупругой деформации.

Экспериментально обнаружено, что как при мартенситном превращении, так и в деформируемом кристалле возникают структурные дефекты, состоящие из двух межфазных границ, разделенных второй фазой [1,2]. По-видимому, в условиях изменения внешнего воздействия (температуры, механической силы) наряду со структурными состояниями исходной решетки в пространстве междуузлий структурно-неустойчивого кристалла появляются разрешенные структурные состояния другой решетки [3].

В рамках модели квантовой системы псевдоспинов показано [4,5], что в структурно-неустойчивом кристалле возникает локальное коллективное возбуждение кристаллической решетки — солитон, с одной стороны, являющийся дефектом, состоящим из двух межфазных границ, разделенных второй фазой, а с другой стороны, импульсом поля упругой деформации. Необходимым условием возбуждения солитонов в структурно-неустойчивых кристаллических системах является наличие в них незаторможенной мягкой моды. Однако в окрестности структурного перехода мягкие моды, как правило, переторможены [5], и здесь не представляется возможным возбуждение солитонов. Поэтому актуальной является задача о нахождении в окрестности структурного перехода локализованных в пространстве коллективных возбуждений

кристаллической решетки — автосолитонов, которая и решается в этой работе.

Чтобы получить автосолитонное решение в кристалле, необходим какой-либо механизм, который обеспечивал бы возвращение атомов кристалла из узлов конечной решетки в узлы исходной решетки после прохождения волны переключения. В структурно-неустойчивом кристалле, находящемся под действием внешней силы, стимулирующей структурный переход, этот механизм может быть следующим.

Рассмотрим нагруженный кристалл, в котором протекает структурный переход из предпереходного состояния, например, в низкотемпературную фазу, описываемый параметром порядка S^z [4]. Для кристалла в поле напряжений с компонентой Ω_a , стимулирующей уменьшение асимметрии двухъямного потенциала, разложение термодинамического потенциала Ландау по параметру порядка в окрестности точки структурного перехода имеет вид [4]

$$\Delta\Phi = \alpha(S^z)^2/2 + \delta(S^z)^3/3 + \gamma(S^z)^4/4 + \hbar\Omega_a S^z - (1/2)\lambda\Omega_a^2. \quad (1)$$

Эволюция однородного параметра порядка S^z описывается уравнением Ландау—Халатникова

$$\begin{aligned} \dot{S}^z &= -\partial\Delta\Phi/\partial S^z = g(S^z) - \hbar\Omega_a, \\ g(S^z) &= -\alpha S^z - \delta(S^z)^2 - \gamma(S^z)^3. \end{aligned} \quad (2)$$

Из уравнения (2) видно, что скорость изменения параметра порядка зависит не только от параметра порядка S^z , но и от компоненты поля напряжений Ω_a . Компонента поля напряжений Ω_a стимулирует переход в предпереходное состояние: чем больше его величина, тем меньше параметр порядка.

При заданном значении Ω_a распространение волны переключения в структурно-неустойчивом кристалле описывается уравнением

$$\begin{aligned} \dot{S}^z &= g(S^z, \Omega_a) + D\partial^2 S^z / \partial z^2, \\ g(S^z, \Omega_a) &= -\alpha S^z - \delta(S^z)^2 - \gamma(S^z)^3 - \hbar\Omega_a. \end{aligned} \quad (3)$$

Величина $A(\Omega_a) = \int_{S_1^z}^{S_3^z} g(S^z, \Omega_a) dS^z$ определяет скорость и направление перехода в распространяющейся волне переключения [6,7]. Если $A > 0$, то при распространении волны происходит переключение из предпереходного состояния с $S^z = S_1^z = 0$ в низкотемпературную фазу с $S^z < 0$. Если же $A < 0$, то после прохождения волны переключения кристалл переходит из низкотемпературной фазы с $S^z < 0$ в предпереходное состояние с $S^z = S_1^z = 0$. Из (3) видно, что, изменяя внешнее воздействие, можно управлять скоростью и направлением волны переключения. При малых значениях внешней силы $\sigma < \sigma_c$ волна будет вызывать переход в предпереходное состояние, а при больших значениях внешней силы $\sigma > \sigma_c$ — в низкотемпературную фазу.

В окрестности структурного перехода компонента поля напряжений Ω_a изменяется со временем и имеет особенность при значении внешней силы σ_c [4]. Предполагая диффузию компоненты поля напряжений пренебрежимо малой, эволюцию Ω_a , имеющую релаксационный (неупругий) характер, можно описать уравнением Ландау–Халатникова

$$\dot{\Omega}_a = -\partial\Delta\Phi/\partial\Omega_a = -\hbar S^z + \lambda_0(\sigma_c - \sigma)\Omega_a. \quad (4)$$

Уравнение (4) удобно переписать в виде

$$\tau \dot{\Omega}_a = \Omega_a - \bar{\Omega}(S^z), \quad \tau^{-1} = \lambda_a(\sigma_c - \sigma), \quad \bar{\Omega}(S^z) = \tau \hbar S^z. \quad (5)$$

Здесь τ — время релаксации компоненты поля напряжений, $\bar{\Omega}(S^z)$ — равновесное значение компоненты поля напряжений Ω_a , устанавливающееся, если искусственно поддерживать заданное значение параметра порядка S^z . Из (5) видно, что $\bar{\Omega}(S^z)$ является монотонно растущей функцией S^z . При $\sigma \rightarrow \sigma_c$ время релаксации компоненты поля напряжений Ω_a можно считать много большим по сравнению со временем релаксации параметра порядка S^z .

Выполняя преобразование координат $\xi = z - V_0 t$, переведем уравнения (3), (5) в систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$-V_0 S_z' = g(S_z, \Omega_a) + D S_z'', \quad -\tau V_0 \Omega_a' = \Omega_a - \bar{\Omega}(S_z). \quad (6)$$

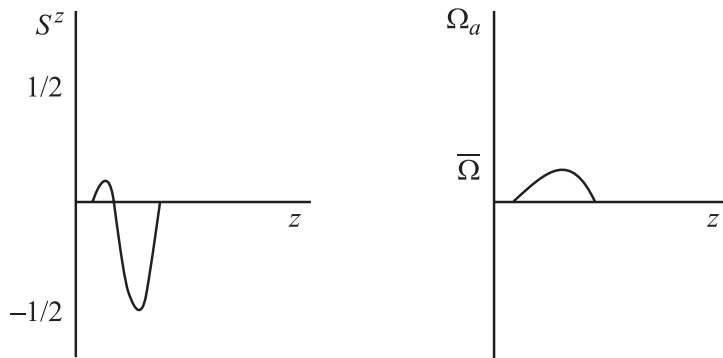
Локализованное в пространстве решение системы (6) будем искать, потребовав выполнения условий $S_z \rightarrow S_z^0 = 0$ и $\Omega_a \rightarrow \Omega_a^0 = 0$ при $\xi \rightarrow \pm\infty$, где (S_z^0, Ω_a^0) — стационарное однородное состояние покоя.

Существование такого решения означает наличие петли сепаратрисы стационарной седловой точки (S_z^0, Ω_a^0) , отвечающей состоянию покоя [6,7], а это возможно лишь при определенном значении параметра V_0 в уравнениях (6). При больших значениях τ скорость уединенного импульса, найденная путем решения нелинейной задачи на собственное значение, имеет вид

$$V_0 \approx v^*(1 - \xi \tau^{-1}), \quad (7)$$

где $v^* \approx (\delta_0/2\gamma)v_{\text{звук}}|T_{MA} - T|$ представляет собой скорость волны переключения, описываемой уравнением (3) при $\Omega_a = \Omega_a^0$, а ξ есть коэффициент порядка единицы. Из (7) видно, что в окрестности структурного перехода скорость автосолитона значительно меньше скорости звука.

На рисунке изображен уединенный бегущий в структурно-неустойчивом кристалле импульс, являющийся решением системы уравнений (6). Из рисунка видно, что параметр порядка испытывает резкое падение, достигает вершины, а потом совершает крутой подъем. Компонента поля напряжений, „подчиняясь“ параметру порядка, медленно возрастает, а затем плавно падает до нуля. Фронт импульса представляет собой волну переключения из предпереходного состояния в низкотемпературную фазу, а спад импульса — волну переключения, осуществляющую обратный переход и двигающуюся с той же самой скоростью.



Зависимости параметра порядка S^z и компоненты поля напряжений Ω_a от координаты z .

Из полученных результатов вытекает важный вывод. В окрестности точки структурного перехода, вынужденного внешним воздействием, когда время релаксации компоненты поля напряжений Ω_a можно считать много большим по сравнению со временем релаксации параметра порядка, структурно-неустойчивый кристалл ведет себя как возбудимая активная среда. Пусть в кристалле, находящемся в предпереходном состоянии с параметром порядка $S^z = 0$ и компонентой поля напряжений $\Omega_a = 0$, возникает флуктуация параметра порядка. В результате флуктуации параметр порядка уменьшается $S^z < 0$, а компонента поля напряжений Ω_a увеличивается. Когда Ω_a достигает некоторой критической величины, падение параметра порядка прекращается. После этого параметр порядка увеличивается, а поле напряжений Ω_a медленно спадает. В результате кристалл возвращается в исходное предпереходное состояние. Таким образом, при $\sigma \rightarrow \sigma_c$ в структурно-неустойчивой кристаллической системе, находящейся в предпереходном состоянии, возникает и распространяется локализованное в пространстве коллективное возбуждение атомной решетки — автосолиiton, который, с одной стороны, представляет собой структурный дефект, состоящий из двух межфазных границ, разделенных второй фазой, а с другой стороны, импульс поля неупругой деформации. Отметим, что скорость автосолитона значительно меньше скорости звука.

В частном случае для структурного перехода сдвигового типа рожденный автосолиiton может оказаться тем прадефектом, из которого формируется ядро дефекта упаковки, расщепленной дислокацией и т.д. [1,2]. Принципиально важно, что элементарные коллективные возбуждения решетки — автосолитоны, солитоны [5] имеют общую природу — их возникновение связано со структурным превращением в условиях изменения внешнего воздействия, когда кристалл теряет свою устойчивость и перестраивается в другую структуру. При этом силы связи не разрываются. Требуется затратить сравнительно небольшую энергию, чтобы локально переместить атомы из позиций одной решетки в другую. Однако этого оказывается достаточно, чтобы в кристалле произошел локальный кристаллографический сдвиг, родился фрагмент другой структуры. В поле напряжений автосолитоны распространяются эстафетно, что и обеспечивает их достаточно высокую подвижность в кристаллической решетке.

Список литературы

- [1] *Пушин В.Г., Кондратьев В.В., Хачин В.Н.* Предпереходные явления и мартенситные превращения. Екатеринбург: УрО РАН, 1998. 367 с.
- [2] *Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В.* Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука, 1985. 229 с.
- [3] *Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Хон Ю.А., Елсукова Т.Ф.* // Изв. вузов. Физика. 1982. № 12. С. 5–29.
- [4] *Слядников Е.Е.* // ФТТ. 2004. Т. 46. В. 6. С. 1065–1071.
- [5] *Слядников Е.Е.* // ФТТ. 2005. Т. 47. В. 3.
- [6] *Яхно В.Г.* Автоволновые процессы в системах с диффузией. Горький: Институт физики полупроводников АН СССР, 1981. 318 с.
- [7] *Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С.* Введение в синергетику. М.: Наука, 1990. 272 с.