01;05

Переориентация областей кристаллической решетки в нагруженном кристалле

© *Е.Е. Слядников*

Томский научный центр СО РАН, ИФПМ СО РАН, Томск
E-mail: opi@hq.tsc.ru

Поступило в Редакцию 20 июля 2005 г.

Показано, что при внешнем воздействии, превышающем критическое значение, состояние структурно-неустойчивого кристалла с конденсатом автосолитонов становится неустойчивым относительно возникновения локализованных спиральных автоволн (вихрей).

1. Введение. Одно из наиболее интересных явлений в физике — спонтанное образование упорядоченных структур в далеких от равновесия динамических системах. Такие структуры возникают в существенно различных типах систем. Во-первых, это хорошо изученные диссипативные структуры [1,2]: ячейки Бенара в турбулентности, автоволновые процессы в химических и биологических системах типа реакции Белоусова–Жаботинского, когерентная оптическая генерация в лазере. Во-вторых, это менее изученные когерентное состояние атомов кристаллической решетки и генерация элементарных коллективных возбуждений (автосолитонов) в кристалле при мартенситном превращении [3], которые сопровождаются возникновением конденсата автосолитонов и образованием модулированных кристаллических структур (неоднородной неупругой микродеформации) [4].

Недавно в структурно-нестабильных высокоазотистых сталях обнаружена коллективная мода деформации [5], приводящая к переориентации кристаллической решетки через фазовое $\gamma \to \alpha \to \gamma$ превращение путем объемной деформации типа Бейна. Поскольку при таком механизме переориентации кристаллической решетки формирование высокоугловых границ является результатом деформации типа Бейна, этот механизм в отдичие от дислокационно-дисклинационных механизмов переориентации [6] не сопровождается реальным поворотом кристаллической решетки в зоне превращения. Будучи чисто объемной $\gamma \to \alpha \to \gamma$, деформация типа Бейна не требует формирования моментов напряжений. В $SrTiO_3$ также обнаружено спонтанное кручение в области сегнетоэластического перехода [7]. На основе теории Лагранжа разрабатываются модели структурных переходов, в которых получены вихри как топологические дефекты системы [8].

В настоящей работе показано, что при внешнем воздействии, превышающем критическое значение, состояние кристалла с бозе-конденсатом автосолитонов становится неустойчивым относительно возникновения локализованных спиральных автоволн, которые аналогичны абрикосовским вихревым нитям в сверхпроводниках.

2. Уравнение эволюции конденсата автосолитонов. Уравнение эволюции для комплексного параметра порядка $\Psi = \rho \exp(-i\Phi)$, квадрат амплитуды которого равен плотности бозе-конденсата автосолитонов, а градиент фазы пропорционален волновому вектору модулированной кристаллической структуры, имеет вид [3,4]

$$\dot{\psi}(\mathbf{r}, t) = \lambda(\rho)\Psi(\mathbf{r}, t) - i\omega(\rho)\Psi(\mathbf{r}, t) + (D_1 + iD_2)\boldsymbol{\nabla}^2\Psi(\mathbf{r}, t), \qquad (1)$$

где точка обозначает дифференцирование по времени, $\lambda(\rho) = \alpha_1 - \beta_1\rho^2$, $\omega(\rho) = \alpha_2 + \beta_2\rho^2$, $\boldsymbol{\nabla}$ — оператор Набла. Коэффициенты $\alpha_1 = \gamma_\psi(0) + |V|^2\sigma^*\gamma_d^{-1}$, $\alpha_2 = \Omega(0) + |V|^2\sigma^*\gamma_d^{-2}[\Omega(0) - E]$, $\beta_1 = -|V|^2\sigma^*\gamma_d^{-1}\Psi_1^{-2}$, $\beta_2 = -|V|^2\sigma^*\gamma_d^{-2}\Psi_1^{-2}[\Omega(0) - E]$, $D_1 = (\partial\gamma_\Psi/\partial q^2)_{q=0}$, $D_2 = (\partial\Omega/\partial q^2)_{q=0}$, $\Psi_1^{-2} = 4|V|^2\gamma_d^{-1}\gamma_\sigma^{-1}$ вычислены в работе [3]. Из (1) видно, что функция $\lambda(\rho)$ обращается в нуль при $\rho = \rho_0 = (\alpha_1/\beta_1)^{1/2}$, отрицательна при $\rho > \rho_0$ и положительна при $\rho < \rho_0$. Таким образом, бозе-конденсат солитонов представляет собой автоколебательную среду, которая описывается „$\lambda - \omega$ моделью“ [9].

Подставляя параметр порядка в виде $\Psi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \times \exp[-i(\omega_0 t + \varphi(\mathbf{r}, t))]$ в уравнение (1), для функций $\rho(\mathbf{r}, t)$ и $\varphi(\mathbf{r}, t)$ получим уравнения

$$\dot{\rho} = \lambda(\rho)\rho + D_1\boldsymbol{\nabla}^2\rho - D_1\rho(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2 + D_2\rho\boldsymbol{\nabla}^2\varphi + 2D_2(\boldsymbol{\nabla}\rho)(\boldsymbol{\nabla}\varphi), \qquad (2)$$

$$\dot{\varphi} = [\omega(\rho) - \omega_0] + 2D_1\rho^{-1}(\boldsymbol{\nabla}\rho)(\boldsymbol{\nabla}\varphi) - D_2\rho^{-1}\boldsymbol{\nabla}^2\rho + D_2(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2 + D_1\boldsymbol{\nabla}^2\varphi. \qquad (3)$$

Для плавных распределений фазы, характеризуемых большой длиной L, отклонения аплитуд $\delta\rho(\mathbf{r}, t)$ будут адиабатически подстраиваться к значениям $\boldsymbol{\nabla}\varphi$ и $\boldsymbol{\nabla}^2\varphi$ в соответствующих точках конденсата. Тогда с точностью до членов порядка $1/L^2$ получим $\delta\rho = \rho_0\tau_{rel}[D_2\boldsymbol{\nabla}^2\varphi - D_1(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2]$. Подставляя $\rho = \rho_0 + \delta\rho$ в уравнение (3) для фазы и сохраняя в нем лишь члены порядка $1/L^2$, получим

$$\dot{\varphi} = a(\boldsymbol{\nabla}\varphi)^2 + b\boldsymbol{\nabla}^2\varphi, \tag{4}$$

где коэффициенты $a = -(\beta_2/\beta_1)D_1 + D_2$, $b = (\beta_2/\beta_1)D_2 + D_1$ обладают размерностью коэффициента диффузии. Из уравнения (4) следует, что время релаксации фазы τ_L имеет порядок величины $\tau_L \approx L^2/b$. Очевидно, полученное уравнение применимо лишь для описания таких плавных распределений фазы, для которых характерная длина неоднородности удовлетворяет условию $L \gg (b\tau_{rel})^{1/2}$, что ограничивает область применимости уравнения фазовой динамики (4).

Волны с малым пространственным периодом, для которых $k \geqslant (b\tau_{rel})^{-1/2}$, обычно теряют устойчивость в области $k \approx (b\tau_{rel})^{-1/2}$ и не описываются уравнением фазовой динамики (4). Поэтому можно надеяться, что в структурно-неустойчивом кристалле могут существовать устойчивые неоднородные распределения автосолитонов с характерными масштабами $l_{dif} \leqslant 1/k \approx (b\tau_{rel})^{1/2}$, которые, в частности, могут иметь вид вращающихся с постоянной угловой скоростью спиралей (вихрей). Эти вихри являются аналогами уединенных стационарных автоволн, спонтанно возникающих в автоколебательных средах [1,2]. Поскольку размер ядра вихря и диффузионная длина $l_{dif} \approx (b/\tau_{rel})^{1/2}$ всегда малы и совпадают по порядку величины, то для описания такой неоднородности в конденсате необходимо обратиться к полным уравнениям в частных производных (2), (3).

3. Стационарные решения уравнения эволюции. Покажем, что спиральная волна является внутренним источником переориентации областей кристаллической решетки структурно-неустойчивого кристалла, а также внутренним источником фазовых волн. Ограничимся случаем, когда $D_2 = 0$, т.е. мнимая добавка к эффективному коэффициенту диффузии отсутствует ($D_1 = D$). Однородные автоколебания конденсата автосолитонов имеют амплитуду ρ_0, определяемую условием $\lambda(\rho_0) = 0$, и осуществляются с частотой $\omega_0 = \omega(\rho_0)$. Диффузионная длина в данном случае равна $L_{dif} = (b/\tau_{rel})^{1/2} = (D/|\rho_0\lambda'(\rho_0)|)^{1/2}$. В полярной системе координат (r, Θ) спиральная волна, вращающаяся с частотой ω, имеет вид

$$\rho = \rho(r), \varphi = \Theta - \chi(r) - (\omega_* - \omega_0)t. \tag{5}$$

Подставляя (5) в уравнения (2)–(3), получим

$$\rho_{rr} + r^{-1}\rho_r + (D^{-1}\lambda(\rho) + r^{-2} - \chi_r^2)\rho = 0, \tag{6}$$

$$\chi_{rr} + r^{-1}\chi_r + 2(\rho_r/\rho)\chi_r = (\omega_* - \omega(\rho))/D. \tag{7}$$

Потребовав, чтобы $\rho(r)$ и $\chi_r(r)$ оставались конечными при $r = 0$, получим $\rho(r) \approx r$ при $r \to 0$, $\chi_r(0) = 0$. Аналогично при $r \to \infty$ амплитуда $\rho(r)$ должна асимптотически стремиться к какому-то отличному от нуля постоянному значению $\rho \to \rho_*$. Тогда из (5)–(7) следует, что $\omega_* = \omega(\rho_*)$, $\chi_r(r) \to \pm k_*$ при $r \to \infty$, где $k_* = [\lambda(\rho_*)]^{1/2}$. Таким образом, на больших расстояниях от центра спиральная волна имеет постоянный шаг $H_{arx} = 2\pi/|\chi_r| = 2\pi/k_*$, т.е. она является архимедовой спиралью [1,2]. Шаг спирали равен пространственному периоду плоской фазовой волны с частотой ω_*. Два знака $\chi_r(\infty)$ соответствуют двум направлениям закручивания спирали.

Поскольку дифференциальные уравнения (6), (7) не допускают полного аналитического решения, для нахождения частоты вращения спиральной волны ω_*, функций $\rho(r)$, $\chi(r)$ используем приближенные методы. В частном случае, когда $\omega(\rho) = \omega_0 = \text{const}$, т.е. отсутствует нелинейный сдвиг частоты, частота спиральной волны также должна совпадать с ω_0. Тогда из (7) следует, что при $\chi_r(0) = 0$ должно выполняться равенство $\chi_r(r) = 0$, и, согласно (5), спираль вырождается в прямолинейный луч, вращающийся с угловой скоростью ω_0. Это значит, что автосолитоны в конденсате перераспределяются таким образом, что происходит переориентация области кристаллической решетки.

В рассматриваемом случае амплитуда $\rho(r)$ подчиняется уравнению

$$\rho_{rr} + r^{-1}\rho_r - \rho/r^2 + \rho\lambda(\rho)/D = 0, \tag{8}$$

которое должно быть дополнено граничными условиями $\rho(0) = 0$ и $\rho(r) \to \text{const}$ при $r \to \infty$. Из (8) видно, что плотность конденсата $\rho^2(r)$ на периферии совпадает с плотностью однородного конденсата ρ_0^2, а с приближением к центру спиральной волны она монотонно уменьшается и обращается в нуль в центральной точке. Таким образом, в конденсате автосолитонов возникает вихрь (ротация) с низкой плотностью автосолитонов внутри вихря.

Исследуем случай, когда зависимость частоты от амплитуды $\rho(r)$ является очень слабой: $\omega(\rho) = \tilde{\omega} + \varepsilon\delta\omega(\rho)$, $0 < \varepsilon \ll 1$ (нелинейный сдвиг частоты). Будем искать решение для спиральной волны в конденсате с помощью метода сшиваемых асимптотических разложений [1,2]. Вводя малый параметр q, равный $q = \omega'(\rho_0)/|\lambda'(\rho_0)| = \varepsilon\delta\omega'(\rho_0)/|\lambda'(\rho_0)|$, $q \ll 1$, построим приближенные решения уравнений (6), (7) во внутренней $r \ll l_{dif} \exp(1/|q|)$ и внешней $(r \gg l_{dif})$ областях. Поскольку $q \ll 1$, эти две области перекрываются. Сшив два приближенных решения в интервале их перекрытия, найдем частоту вращения спиральной волны ω_* и волновое число k_*, которые равны $\omega_* = \omega_0 - qDk_*^2$, $k_* = 0.509(|q|L_{dif})^{-1} \exp[-\pi/2|q|)]$.

Выполнив разложение по степеням q во внутренней области, получим

$$\rho(r) = P_0(r) + q^2 P_1(r) + \ldots, \chi_r(r) = |q|\nu_0(r) + |q|^3\nu_1(r) + \ldots,$$

где $\nu_0(r) = -(\lambda'(\rho_0)/\delta\omega'(\rho_0))[rP_0^2(r)]^{-1} \int\limits_0^r yP_0^2(y)[\delta\omega(\rho_0) - \delta\omega(P_0(y))]dy$.

Причем при условии $l_{dif} \ll r \ll l_{dif} \exp(1/|q|)$ выполняется соотношение $\nu_0(r) = (l_{dif}/r)[\ln(r/l_{dif}) + C_1]$.

Разделим внешнюю область на ближнюю $(l_{dif} \ll r \ll 1/k_*)$ и дальнюю $(r \gg 1/k_*)$. Тогда из (5)–(7) получим
для ближней области

$$\chi_r(r) \approx (l_{dif}/r)\,\mathrm{tg}\{|q|[\ln(r/l_{dif}) + C_1]\}, \tag{9}$$

для дальней области

$$\chi_r(r) \approx -k_* K_0'(|q|kr)/K_0(|q|kr), \tag{10}$$

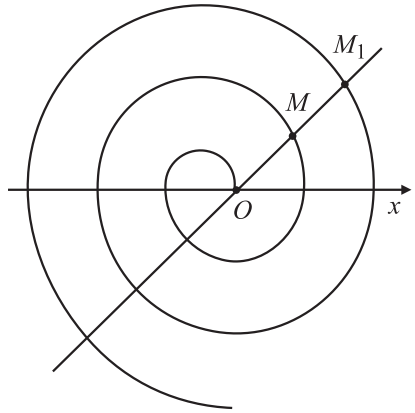
где $K_0(x)$ — модифицированная функция Бесселя с асимптотикой $K_0(x) \to 0$ при $x \to \infty$. Для $qkr \ll 1$ функцию $\chi_r(r)$ можно представить в виде разложения:

$$\chi_r(r) \approx k_*[1 + (1/2)(q|kr|)^{-1} - (1/8)(qkr)^{-2} + \ldots]. \tag{11}$$

Поскольку амплитуда $\rho(r)$ связана с $\chi_r(r)$ во внешней области соотношением

$$\rho(r) = \rho_0 - (r^{-2} + \chi_r^2)l_{dif}^2, \tag{12}$$

при $r \to \infty$ амплитуда колебаний стремится к пределу $\rho_* = \rho_0 - (l_{dif}k_*)^2$. Из выражений (11), (12) видно, что возникающая



Спиральная автоволна (вихрь) в структурно-неустойчивом кристалле.

в конденсате автосолитонов спиральная волна является источником переориентации кристаллической решетки, а также внутренним источником фазовых волн.

4. Обсуждение результатов. При критическом значении внешнего воздействия в структурно-неустойчивом кристалле возникает конденсат элементарных дефектов (автосолитонов), который представляет собой автоколебательную среду, где распространяются фазовые волны. Возбуждение и распространение фазовой волны в конденсате является механизмом, с одной стороны, неоднородного распределения элементарных дефектов, а с другой стороны, формирования модулированной кристаллической структуры [3,4]. При дальнейшем увеличении внешнего воздействия конденсат элементарных дефектов становится неустойчивым относительно возникновения локализованных спиральных автоволн (вихрей). На больших расстояниях от центра вихря линии постоянной фазы имеют форму архимедовой спирали (см. рисунок). Частота вращения спиральной волны однозначно определяется характеристиками конденсата и не зависит от начальных условий, приведших к образованию такого автоволнового источника. С приближением к центру спиральной волны плотность конденсата дефектов монотонно уменьшается и обращается в нуль в центральной точке. Поэтому в структурно-неустойчивом кристалле можно ввести понятие ядра спиральной волны, как той области, где плотность конденсата дефектов существенно отличается от плотности однородного конденсата. Размеры ядра вихря в конденсате всегда малы и совпадают по порядку величины с диффузионной длиной l_{dif}. Каждая вихревая нить характеризуется определенным значением циркуляции градиента фазы по замкнутому контуру, охватывающему эту нить. Поскольку фаза волновой функции автосолитона совпадает с фазой Фурье-компоненты одиночных конфигурационных возбуждений (смещений) решетки [3,4], то возникновение вихря в конденсате автосолитонов приводит к переориентации области кристаллической решетки. Спонтанно возникающая спиральная волна является как источником переориентации кристаллической решетки, так и внутренним источником фазовых волн (неоднородной неупругой вихревой микродеформации), что косвенно подтверждается данными экспериментов на макроуровне деформации [5,7].

Список литературы

[1] *Яхно В.Г.* Автоволновые процессы в системах с диффузией. Горький: Институт физики полупроводников АН СССР, 1981. 318 с.

[2] *Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С.* Введение в синергетику. М.: Наука, 1990. 272 с.

[3] *Слядников Е.Е.* // Изв. вузов. Физика. 2004. № 7. Приложение. С. 69–76.

[4] *Слядников Е.Е.* // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. В. 24. С. 82–87.

[5] *Тюменцев А.Н., Литовченко И.Ю., Пинжин Ю.П., Коротаев А.Д., Сурикова Н.С.* // ФММ. 2003. Т. 95. № 2. С. 86–95.

[6] *Владимиров В.И., Романов А.Е.* Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 224 с.

[7] *Леманов В.В., Гриднев С.А., Ухин Е.В.* // ФТТ. 2002. Т. 44. В. 6. С. 1106–1115.

[8] *Digal S., Ray R., Segupta T., Srivastava A.M.* // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 84. № 5. P. 826–829.

[9] *Kuramoto Y.* // Prog. Theor. Phys. 1980. V. 63. P. 1885–1895.