

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ НА ДИНАМИКУ ФЛУКТУАЦИЙ ЭНЕРГИИ
И ПРОЧНОСТЬ ОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМ

А.И. М и х а й л и н, И.А. С л у ц к е р

Примесные атомы влияют на механические свойства твердых тел, изменяя их структуру, свойства дефектов и динамику решетки. В кристаллических телах основными являются первые два фактора. Однако в системах с простой структурой, например в линейных полимерных цепях, воздействие примесей на динамику атомных колебаний может оказаться определяющим. Моделью такой системы является одномерный кристалл – цепочка атомов, в которой допускаются только продольные колебания.

Немногочисленные теоретические работы, посвященные механическим свойствам цепочки с примесями, выполнены в рамках псевдогармонического приближения [1, 2]. Используя условия потери системой динамической устойчивости, авторы [1, 2] показали, что введение примесей понижает энергию активации разрыва цепочки, т.е. уменьшает ее долговечность. Однако при таком подходе остается в тени термофлуктуационный характер разрыва цепи. Механизм и вероятность образования флуктуаций энергии для однородной цепочки рассмотрены в [3], где введено представление о волновой природе флуктуаций. В настоящей работе этот подход применен к исследованию цепочки с изотопическими примесями. Целью работы являлось изучение влияния примесей на вероятность формирования мощных флуктуаций энергии, определяющую скорость термоактивированных процессов, в частности – термодеструкции.

Методом молекулярной динамики рассматривали цепочку из 100 атомов. Атомы имели равные массы M , кроме девяти (десятого, двадцатого и т.д.), имевших массы m . Рассматривали отношение масс $M/m=0.5, 1, 2, 4, 10$. Использовали как свободные, так и периодические граничные условия. Межатомное взаимодействие описывали потенциалом Морза, потенциалом Тода и квадратичным. Кон-

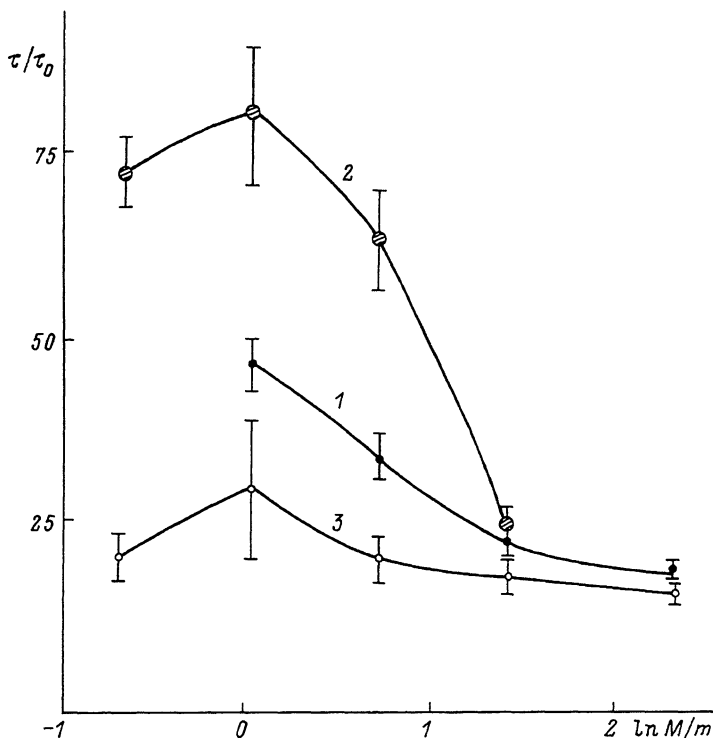


Рис. 1. Зависимость времени жизни τ долгоживущих волновых флуктуаций от отношения M/m , где M – масса примеси, m – масса основного атома цепочки, при температуре $T=350$ К. τ_0 – период атомных колебаний.

1 – флуктуации в гармонической цепочке, 2 – флуктуации сжатия в цепочке Toda, 3 – флуктуации растяжения в цепочке Toda.

станты потенциалов подобраны таким образом, что у них совпадают энергия диссоциации D , равновесное расстояние и упругая постоянная. Методика машинного эксперимента была аналогична использованной в [3]. Все результаты относятся к цепочке в состоянии термодинамического равновесия при нулевом внешнем давлении.

Анализ динамики флуктуаций проведен с помощью метода пространственно-временных разверток, использованного в [3]. Обнаружено, что в цепочке с изотопическими примесями флуктуации энергии и плотности имеют волновую природу. Как и в однородной цепочке [3], наблюдаются волны плотности, имеющие конечное время жизни и распространяющиеся вдоль цепочки в обоих направлениях. Энергия атома, через который проходит волна, может в несколько

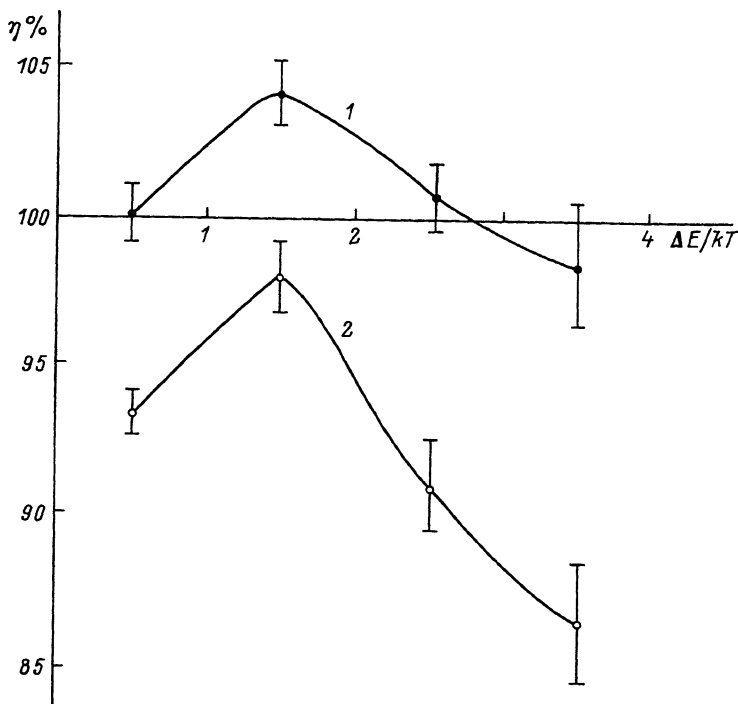


Рис. 2. Зависимость отношения η вероятности появления флуктуаций в цепочке с примесями $M/m=2$ к вероятности появления флуктуаций в цепочке без примесей при температуре $T=350$ К от величины энергии флуктуации.

1 – цепочка с гармоническим потенциалом, 2 – цепочка с потенциалом Морзе.

раз превышать среднее значение. Наиболее мощные флуктуации возникают при столкновении волн плотности.

Изотопические примеси приводят к дополнительному рассеянию волн плотности и сокращению их времени жизни τ . Времена жизни, измеренные в цепочке с периодическими граничными условиями при температуре $kT/D=0.088$ для различных отношений M/m , представлены на рис. 1. Как видно из рисунка, уменьшение времени жизни волн плотности за счет рассеяния на примесях характерно как для гармонической, так и для ангармонической цепочек. Для гармонического (квадратичного) потенциала волны сжатия и растяжения ведут себя одинаково. Нелинейность потенциала межатомного взаимодействия приводит к усилению рассеяния волн сжатия и более слабому рассеянию волн растяжения. Волны сжатия в ангармонической цепочке представляют собой солитоны. Существование солитонов сжатия в ангармонических цепочках подтверждают результаты

[4, 5]. Солитоны очень чувствительны к присутствию примесей [6, 7], что и объясняет резкие уменьшения их времен жизни при увеличении массы примеси.

Статистические характеристики флуктуаций исследовали, определяя вероятность возникновения флуктуаций энергии отдельных атомов. Для этого подсчитывали количество максимумов определенной высоты на графиках зависимости энергии каждого атома от времени. Чтобы выделить влияние примесей, рассматривали отношение частоты появления флуктуаций в цепочке с примесями к частоте таких же по величине флуктуаций в однородной цепочке. На рис. 2 приведены зависимости отношения частот от величины флуктуаций для случая $M/m=2$. Как видно из рисунка, примеси уменьшают вероятность образования флуктуаций. Этот эффект сильнее проявляется в ангармонической цепочке и усиливается с ростом энергии флуктуации и температуры системы.

Полученные результаты могут быть объяснены исходя из волновой природы флуктуаций. Рассеяние на примеси приводит к уменьшению амплитуды волны плотности. Как следствие, сокращается ее время жизни и величина переносимой энергии. Это проявляется как уменьшение вероятности появления флуктуаций данной энергии. Такое изменение вероятности не означает, что нарушено распределение Больцмана, т. к. при этом изменяется и длительность флуктуаций [3].

Можно ожидать, что влияние примесей скажется и при термодеструкции цепочки. Для проверки этого предположения были рассчитаны средние времена жизни цепочки с примесями и однородной при температуре $kT/D=0.113$, отвечающей условиям термодеструкции. Среднее время жизни однородной цепочки составило 30 ± 3 периода атомных колебаний τ_0 , для цепочки с примесями при $M/m=2$ оно равно $40 \pm 3 \tau_0$. Разрыв цепочки связан с формированием мощной (разрывной) флуктуации энергии [8, 9]. Поэтому рост времени до разрыва цепочки с примесями подтверждает вывод об уменьшении вероятности появления флуктуаций.

Этот результат не согласуется с выводами [1, 2]. Причиной расхождения, по-видимому, является ограниченная точность псевдогармонического приближения при описании нелинейных систем. Кроме того, не учитывается локальный характер разрыва цепочки, что имеет принципиальное значение [10].

Таким образом, введение примесей понижает вероятность появления флуктуаций энергии в одномерных кристаллах и приводит к их упрочнению. Это связано с дополнительным рассеянием волн плотности на примесных атомах. Поэтому, изменяя концентрацию и состав примесей, можно управлять термоактивированным процессом.

Волновая природа флуктуаций и механизм рассеяния, по-видимому, сохраняются и в более сложных квазиодномерных системах, какими являются полимерные макромолекулы. Поэтому можно ожидать, что подключение к цепи макромолекулы примесных атомов и групп, создающих дефект массы, приведет к ее упрочнению.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Б а р т е н е в Г.М., С а в и н Е.С. // ВМС, сер. Б. 1977. Т. 19. № 9. С. 710-713.
- [2] Б а р т е н е в Г.М., С а в и н Е.С. // ВМС, сер. Б. 1981. Т. 23. № 4. С. 305-308.
- [3] М и х а й л и н А.И., С л у ц к е р И.А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 2. С. 80-86.
- [4] Т о д а М. Теория нелинейных решеток. М., 1984. 262 с.
- [5] I s h i m o r i Y. // Progr. Theor. Phys. 1982. V. 68. N 2. P. 402-410.
- [6] Y o s h i d a F., S a k u m a T. // Progr. Theor. Phys. 1978. V. 60. N 2. P. 338-352.
- [7] N a k a m u r a A., T a k e n o S. // Progr. Theor. Phys. 1977. V. 58. N 3. P. 1074-1076.
- [8] М е л ь к е р А.И., М и х а й л и н А.И. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 6. С. 1746-1750.
- [9] М е л ь к е р А.И., М и х а й л и н А.И., З о л о т а р е в с к и й Н.Ю. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 5. С. 1545-1547.
- [10] Г и л ь р о в В.Л., П а х о м о в А.Б. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 6. С. 1569-1572.

Ленинградский политехнический
институт им. М.И. Калинина

Поступило в Редакцию
17 октября 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 16, вып. 1

12 января 1990 г.

08; 09

© 1990

ВЛИЯНИЕ РАДИАЦИОННЫХ И СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ НА МАГНИТОАКУСТИЧЕСКОЕ ЭХО В ПОРОШКАХ ФЕРРИТОВ

В.М. С а р н а ц к и й, С.Г. А б а р е н к о в а,
Л.Н. К о т о в

Возможность применения в устройствах обработки информации явления эха в порошках различных материалов, заключающегося в возникновении электромагнитного отклика после приложения двух последовательных радиочастотных импульсов [1], требует выяснения оптимальных условий приготовления порошка и наблюдения самого явления. Исследования, проведенные в работах [2-4], показали значительную зависимость амплитуды A_2 и времени релаксации T_2 сигналов двухимпульсного магнитоакустического эха (МАЭ) в порошках ферритов от внешнего магнитного поля, температуры условий отжига, степени монодисперсности, от частоты заполнения возбуждающих импульсов и их амплитуды.