

УДК 536.7

ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ ЦЕПОЧЕК С НЕСОРАЗМЕРНЫМИ ПЕРИОДАМИ И БЛИЗКОДЕЙСТВИЕМ

А. Н. Филонов

На примере двух взаимодействующих упругих цепочек показано, что основное состояние систем с несоизмерной фазой описывается асимметричной по параметру несоизмерности δ потенциальной энергией. Наряду с асимметричной зависимостью параметра порядка ρ (плотности дислокаций) от δ , асимметричен характер фазового перехода из соразмерной в несоизмерную фазу. Разработана термодинамика системы, найден интервал значений δ , в котором имеет место температурный фазовый переход первого рода типа «газ дислокаций» — «квазирешетка дислокаций».

В связи с интенсивными экспериментальными и теоретическими исследованиями несоизмерных фаз представляет интерес рассмотреть достаточно простую модель двух взаимодействующих упругих цепочек с несоизмерными периодами, но в которой при определенных условиях возникает несоизмерная фаза. Под несоизмерной фазой мы понимаем периодическую дислокационную структуру. Пусть цепочка из L атомов с межатомным периодом $1 + \delta$ и упругой константой λ взаимодействует посредством близкодействующего потенциала $v(x)$ с бесконечной цепочкой атомов с периодом 1 и упругой константой κ . Будем искать основное состояние системы в классическом приближении, т. е. из минимума потенциальной энергии. Запишем потенциальную энергию в общем виде

$$H = \left| \sum_{n=1}^L \sum_{m=1}^{(1+\rho)L} \frac{\lambda}{2} (\xi_{n+1} - \xi_n)^2 + \frac{\kappa}{2} (\zeta_{m+1} - \zeta_m)^2 + v(X_n - Y_m) \right. \quad (1)$$

где ρL по абсолютной величине равно числу дислокаций, X_n — координата n -го атома первой цепочки; $X_n = (1 + \delta)n + \xi_n$, ξ_n — отклонение n -го атома от исходного положения равновесия, Y_m — координата m -го атома второй цепочки $Y_m = m + \zeta_m$, ζ_m — отклонение m -го атома от исходного положения равновесия. Отметим важность того факта, что число взаимодействующих атомов второй цепочки нефиксировано, являясь функцией решения, минимизирующего (1). Возникающая с возникновением несоизмерной фазы асимметрия плотностей двух цепочек в области дислокации приводит к тому, что нет полной симметрии относительно замены параметров первой цепочки параметрами второй. Рассмотрим произвольный близкодействующий потенциал межатомного взаимодействия $v(x)$, при котором дислокационные части цепочек взаимодействуют друг с другом только своими концами (на границах потенциальной ямы) (рис. 1). Энергия дислокации записывается в виде

$$H_{\text{диск}} = \frac{\lambda}{2} (\xi - \delta)^2 M + \frac{\kappa}{2} \eta^2 (M + \text{sign}(\delta)), \quad (2)$$

где M — размер дислокации (число дислокационных атомов первой цепочки), $1 + \xi$ — период первой цепочки в области дислокации, $1 + \eta$ — период вто-

рой цепочки в области дислокации, Δ — ширина ямы. M находится из уравнения (рис. 1)

$$(1 + \xi) M = (1 + \eta) (M + \text{sign}(\delta)) - \Delta \text{sign}(\delta). \quad (3)$$

Удобно перейти к переменным $\xi = (1 - \Delta) \text{sign}(\delta) / M$, η и проминимизировать (2) по η , после чего имеем следующее выражение для $\tilde{H}_{\text{дисл}}$

$$\tilde{H}_{\text{дисл}} = \frac{1}{2} \frac{\lambda \frac{xM}{M + \text{sign}(\delta)}}{\lambda + \frac{xM}{M + \text{sign}(\delta)}} (\xi - \delta)^2 M \approx \frac{\bar{\lambda}}{2} (\xi - \delta)^2 M - \frac{\bar{\lambda}^2}{2x} (\xi - \delta)^2 \text{sign}(\delta), \quad \bar{\lambda} = \frac{\lambda x}{\lambda + x}. \quad (4)$$

В (4) отброшены члены, следующего порядка малости по δ , $o(\delta^3)$. Минимизация (1) по η_m в соразмерной области с учетом близкодействия приводит полную потенциальную энергию двух цепочек к виду

$$\left. \begin{aligned} \tilde{H} &= \int_0^L \left[\frac{\bar{\lambda}}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \delta \right)^2 + V(\varphi) \right] dx - \frac{\bar{\lambda}^2}{2x} (\xi - \delta)^2 \rho L, \\ V(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} v(x+n), \quad \varphi(x) = \delta x + \xi(x) - \eta(x). \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

В пределе $x = \infty$ мы имеем модель [1], нечетный по δ член энергии отличает нашу модель от той, которая использовалась в [2, 3]. Совершая пере-

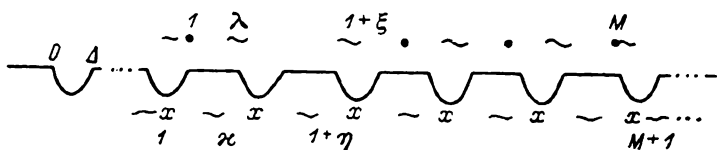


Рис. 1. Произвольный близкодействующий потенциал межатомного взаимодействия $v(x)$.

ход от дискретного описания (1) к непрерывному (5), мы выделили главные — четный и нечетный по δ члены энергии и оставляем без обсуждения другие возможные эффекты дискретности, такие как вторичная модуляция, стохастика и т. д. Потенциальная энергия (5) соответствует энергии цепочки из L атомов с периодом $1 + \delta$, упругой константой $\bar{\lambda}$, в периодическом поле $V(x)$ с периодом 1. Последний, нечетный относительно замены δ на $-\delta$ член в (5) следует рассматривать в качестве поверхностной энергии системы. Разлагая ξ по степеням ρ , окончательно запишем общий вид потенциальной энергии двух упругих цепочек с близкодействием

$$\left. \begin{aligned} \tilde{H} &= \int_0^L \left[\frac{\bar{\lambda}}{2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} - \delta \right)^2 + V(\varphi) \right] dx + H_{\text{ас}}, \\ H_{\text{ас}} &= \frac{\bar{\lambda}^2}{x} (-\alpha \delta^2 \rho + \beta \delta \rho^2 - \gamma \rho^3 + \dots) L, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

где $H_{\text{ас}}$ — нечетная по δ часть энергии; α, β, γ — положительные константы, величины которых порядка 1 и зависят от конкретного вида потенциала $v(x)$. Если первый член в $H_{\text{ас}}$ перенормирует параметр несоизмерности $\delta = \delta + \alpha \bar{\lambda} \delta^2 / x$, то второй приводит к асимметричному по δ характеру перехода из соразмерной в несоизмерную фазу (рис. 2). При $\delta > 0$ он непрерывен, при $\delta < 0$ — скачкообразен, $|\delta| \ll 1$.

Основываясь на работах [4, 5], запишем плотность свободной энергии в виде

$$\left. \begin{aligned} F &= \frac{\bar{\lambda}}{2} \delta^2 - \beta \frac{\bar{\lambda}^2}{x} \delta \rho^2 + \epsilon \left(i \frac{\bar{\lambda}}{T} k_0 \right), \\ k_0 &= \delta + \alpha \frac{\bar{\lambda}}{x} \delta^2 - \frac{2\bar{\lambda}}{x} \beta \delta \rho, \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

где $\varepsilon(k)$ — собственное значение дифференциального уравнения

$$\left[-\frac{T^2}{2\lambda} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi_k(x) = \varepsilon(k) \psi_k(x). \quad (8)$$

Параметр порядка ρ находится из уравнения

$$\rho = -\frac{1}{\lambda} \frac{\partial \varepsilon \left(i \frac{\lambda}{T} k_0 \right)}{\partial k_0}. \quad (9)$$

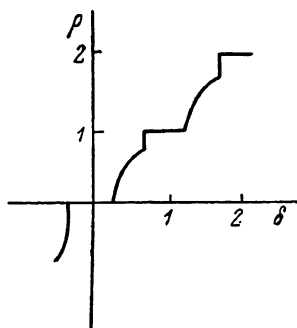


Рис. 2. Зависимость параметра порядка от δ .

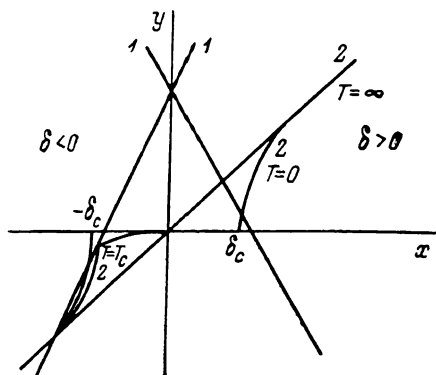


Рис. 3. Линии 1 задаются уравнением $y(x) = -(x-\delta) \kappa/2 \lambda \beta \delta$. Семейство линий 2 задается уравнением

$$y(x) = -\frac{1}{\lambda} \frac{\partial \varepsilon \left(i \frac{\lambda}{T} x \right)}{\partial x} \text{ при } T=0, T_c, \infty.$$

Из графического решения уравнения (9) (рис. 3) получим, как и в [6], интервал значений δ , в котором имеет место температурный фазовый переход со скачком плотности дислокаций

$$-\left(1 + \beta \frac{\lambda}{x} \delta_c\right) \delta_c \leq \delta \leq -\delta_c, \quad \delta_c \sim \sqrt{\frac{V_{\max} - V_{\min}}{\lambda}}. \quad (10)$$

Вычисленный в [5] структурный фактор нашей модели при $\kappa = \infty$ имеет вид

$$S(q) = \frac{S_0}{[q(1-n) + \rho(q+n)]^2 + \left(\frac{1}{2} T \frac{\partial \rho}{\partial \delta} n^2\right)^2}, \quad (11)$$

где n — целая часть q . $S(q)$ имеет максимумы в точках

$$q = \frac{\rho n}{1 - \delta + \rho}. \quad (12)$$

Расстояние между ними есть

$$\Delta q = \frac{\rho}{1 - \delta + \rho}. \quad (13)$$

Ширина пика структурного фактора пропорциональна

$$\gamma \simeq \frac{1}{2} T \frac{\partial \rho}{\partial \delta} n^2. \quad (14)$$

Если $T \ll 1$, $|\delta| > \delta_c$, то $\gamma \sim T$, $\gamma/\Delta q \ll 1$, и только отсутствие δ -функциональных особенностей в структурном факторе не позволяет идентифицировать эту фазу с периодической решеткой дислокаций, но ее можно интерпретировать как «квазирешетку дислокаций». При $|\delta| < \delta_c$ из (9)–(14) следует, что $\gamma \sim \rho$, $\gamma/\Delta q \sim 1$, т. е. порядок в расположении

термически возбужденных дислокаций отсутствует. Фаза характеризуется тем, что плотность дислокаций мала, среднее расстояние между ними много больше размера одной дислокации — назовем эту фазу «газом дислокаций». Следовательно, температурный переход в области (10) является переходом типа «газ дислокаций»—«квазирешетка дислокаций». Обращаясь к квантовым свойствам системы, можно предположить, что в области (10) существуют состояния, обусловленные тунелированием между двумя локальными минимумами с $\rho=0$ и $\rho=\rho_c$.

В заключение, выражаю благодарность Р. А. Сурису за сотрудничество, определившее решение задачи.

Л и т е р а т у р а

- [1] Покровский В. Л., Талапов А. Л. ЖЭТФ, 1978, т. 75, № 3 (9), с. 1151—1157.
- [2] Люксютов И. Ф. ЖЭТФ, 1982, т. 82, № 4, с. 1267—1276.
- [3] Талапов А. Л. ЖЭТФ, 1982, т. 83, № 1 (7), с. 442—448.
- [4] Сурис Р. А. ЖЭТФ, 1964, т. 47, № 4 (10), с. 1427—1433.
- [5] Filonov A. N., Zaslavsky G. M. Phys. Lett., 1981, vol. 86, p. 237—242.
- [6] Филонов А. Н. ФТТ, 1983, т. 25, № 8, с. 2524—2526.

Красноярский институт цветных
металлов им. М. И. Калинина
Красноярск

Поступило в Редакцию
24 июня 1987 г.