[8] Голубев В.С., Кривенко Ю.Н., Леонов П.Г., Флеров В.Б. // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. В. 16. С. 1522-1526.

Институт проблем
механики АН СССР,
Москва

Поступило в Редакцию
20 ноября 1988 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 5 12 марта 1989 г.
01; 03

СИНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ СТЕКЛОВАНИИ ЖИДКОСТИ

М.И. Марьян, В.В. Химинец

Создание целостной картины перехода в стеклообразное (аморфное) состояние в процессе охлаждения жидкости или под действием облучения сопряжено помимо учета диссипации энергии с рассмотрением нелинейных, синергетических эффектов. В данной работе представлены результаты исследования специфики формирования структуры ближнего, среднего порядков слабо неравновесных (квазикристаллических) и сильно неравновесных (стеклообразных или аморфных) тел в зависимости от изменения внешней среды – скорости охлаждения расплава или интенсивности облучения твердого тела.

В интервале фазового превращения наряду с тепловыми колебаниями атомов существенно влияние на физические свойства и гетерофазных флуктуаций [1], представляющих собой образование микроскопических областей с отличающимся от исходной матрицы характером взаимодействия и топологией связи. Существование гетерофазных флуктуаций подтверждается экспериментальными исследованиями мессбауэровской спектроскопии, ИК-спектров, вязкости твердых тел в интервале плавления и стеклования [2–4]. Устойчивость различных микроскопических состояний, их взаимодействие и вероятность образования определяются изменением внешних условий, описываемых посредством управляющих параметров C_α, к которым относятся скорость охлаждения расплава q, интенсивность внешних полей J. Гамильтониан системы может быть представлен в виде

$$H=\sum_{\ell,\alpha,f}\left(T_f(\ell,C_\alpha)\sigma_f(\ell)-\mu\right)+\frac{1}{2}\sum_{\ell,\ell'}\sum_{\alpha f,f'}\Phi_{ff'}\left(r_{\ell\ell'},C_\alpha\right)\sigma_f(\ell)\sigma_{f'}(\ell'), \quad (1)$$

где $T_f(\ell, C_\alpha)=P_\ell^2/2M$ – кинетическая энергия атома ℓ, $\Phi_{ff'}(r_{\ell\ell'}, C_\alpha)$ – потенциальная энергия межатомного взаимодействия, μ – химический потенциал, элементы матрицы $\sigma_f(\ell)$ характеризуют два набора локально наблюдаемых микроскопических состояний: $\sigma_f(\ell)=1$, если атом ℓ находится в локализованном состоянии ($f=1$), и $\sigma_f(\ell)=0$, если атом ℓ находится в делокализованном состоянии ($f=2$). Введем эффективный гамильтониан системы

$$H_o=\sum_f\left\{\sigma_f\sum_{\ell,\alpha}\left(T_f(\ell,C_\alpha)-\mu\right)+\frac{\sigma_f^2}{2}\sum_{\ell,\ell',\alpha}\sum_{\gamma,\beta}\left[\phi(h_{\ell\ell'},C_\alpha)+\frac{1}{2}u^\gamma(\ell,\ell')\tilde{\Phi}_f^{\gamma\beta}(\ell,\ell')\times\right.\right.$$

$$\left.\times u^\beta(\ell,\ell')\right]+(1-\sigma_2)^2\sum_{\ell,\ell',\alpha,\beta}\tilde{\mathcal{F}}_\beta(\ell,\ell',C_\alpha)v_\beta(\ell),\quad v_\beta(\ell)=\sum_m v(\ell/m)\sigma_2(m), \qquad (2)$$

модельные параметры которого (вероятность нахождения атомов в делокализованном состоянии σ ($\sigma\equiv\sigma_2$), силовые постоянные $\tilde{\Phi}_f^{\gamma\beta}(\ell,\ell',C_\alpha)$ и усредненные среднеквадратичные смещения атомов $y_{\gamma\beta}(\ell,\ell')=\langle u^\gamma(\ell,\ell')u^\beta(\ell,\ell')\rangle$) расчитываются исходя из вариационного принципа для свободной энергии $F\leqslant F_o+$ $+\langle H-H_o\rangle_o$, $F_o=\sum_f F_{of}-\kappa T\ln\left[\prod_f^2 g_f!/N_f!\,(g_f-N_f)!\right]$.
Здесь введены обозначения: $r_\ell=R_\ell+u_\ell+v_\ell$, u_ℓ и v_ℓ – динамические и статические смещения атома, $u(\ell,\ell')=u_\ell-u'_\ell$ – относительные смещения, $v(\ell/m)$ – статические смещения атома ℓ, когда атом m находится в делокализованном состоянии, g_f – статический вес состояния f. Вариация F по параметрам σ, $\tilde{\Phi}_f^{\gamma\beta}(\ell,\ell',C_\alpha)$ и $y_{\gamma\beta}(\ell,\ell',C_\alpha)$ при фиксированных температуре Т и давлении Р

$$\delta F=\left[\frac{\partial F}{\partial\sigma}\right]_{y,\Phi}\delta\sigma+\left[\frac{\partial F}{\partial y_{\gamma\beta}(\ell,\ell',C_\alpha)}\right]_{\Phi,\sigma}\delta y_{\gamma\beta}(\ell,\ell',C_\alpha)+$$

$$+\left[\frac{\partial F}{\partial\tilde{\Phi}_f^{\gamma\beta}(\ell,\ell',C_\alpha)}\right]_{\sigma,y}\delta\tilde{\Phi}_f^{\gamma\beta}(\ell,\ell',C_\alpha) \qquad (3)$$

позволяет определить их температурную зависимость для равновесного ($\delta F=0$) и неравновесного ($\delta F\neq 0$) переходов.

Разлагая F в ряд по степеням отклонения $\eta=\sigma-\sigma_e$, $\eta_{y_{\alpha\beta}}=y_{\alpha\beta}(\ell,\ell')-y_{\alpha\beta}(\ell,\ell')_e$, $\eta_{\tilde{\Phi}_f^{\alpha\beta}}=\tilde{\Phi}_f^{\alpha\beta}(\ell,\ell')-\tilde{\Phi}_f^{\alpha\beta}(\ell,\ell')_e$ системы от состояния равновесия

$$F=F_o+\frac{1}{2}\sum_{i,j}a_{ij}(C_\alpha)\eta_i\eta_j+\frac{c(C_\alpha)}{3}\eta^3+\frac{b(C_\alpha)}{4}\eta^4,$$

где $a_{ij}=(\partial^2F/\partial\eta_i\partial\eta_j)_e$, $c=(1/2)(\partial^3F/\partial\eta^3)_e$, $b=(1/6)\times$ $\times(\partial^4F/\partial\eta^4)_e$, индекс е соответствует равновесному состоянию, с помощью (2), (3) приходим к следующей замкнутой системе нелинейных уравнений

$$\tilde{T}_2 - \tilde{T}_1 + 2\sigma(\tilde{\Phi}_2 + \tilde{\Phi}_1) - 2\tilde{\Phi}_1 - 4\tilde{\mathcal{J}}(1-\sigma)\sigma - 2kT\ln\frac{(g_2/\sigma - 1)}{(g_1/(1-\sigma)-1)} +$$

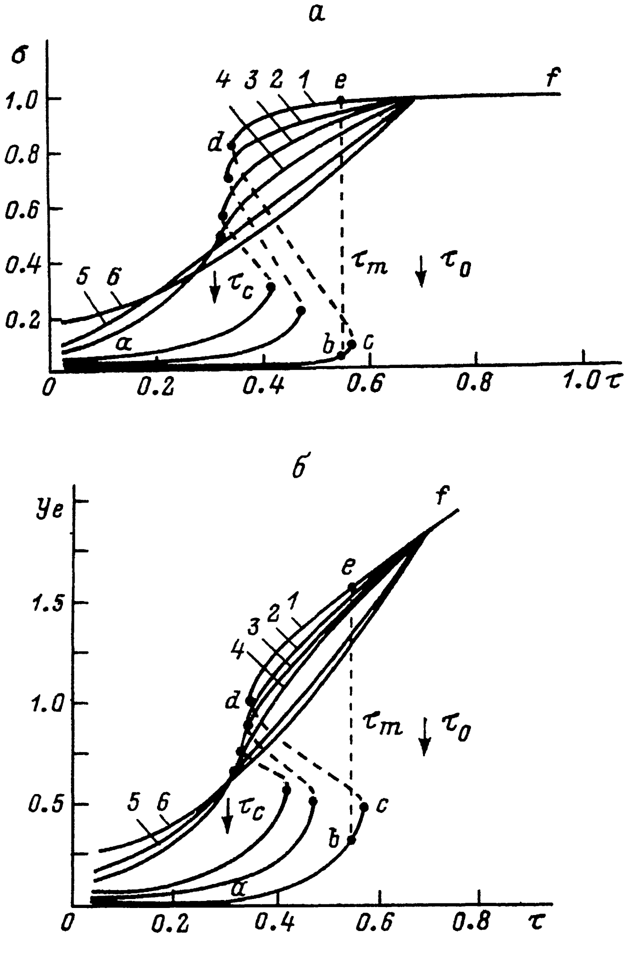
$$+ a_0\tilde{q}\eta - c\eta^2 - b\eta^3 = 0,$$

$$y_{\alpha\beta}(e,e') = \frac{\hbar}{MN}\sum_k \frac{2\sin^2\frac{k r_{ee'}}{2}}{\omega(k)}\,\mathrm{cth}\,\frac{\hbar\omega(k)}{2kT} + a_1\eta_{y_{\alpha\beta}}, \qquad (4)$$

$$\tilde{\Phi}_f^{\alpha\beta}(e,e') = \langle \nabla^{\alpha}_{ee'}\nabla^{\beta}_{ee'}\Phi_f(r_{e,e'})\rangle\sigma_f^2 + a_2\eta_{\tilde{\Phi}_f^{\alpha\beta}}.$$

Здесь $T_f = \sum_e \langle P_f^2(e)/2M\rangle$, $\tilde{\Phi}_f = (1/2)\sum_{e,e'}\langle\Phi_f(e,e')\rangle$, $\tilde{\mathcal{J}} = \langle\sum_{e,e',m}\tilde{\mathcal{J}}_{\alpha}(r_{e,e'})v_{\alpha}(e/m)\rangle$, $\tilde{q} = (q - q_c)/q_c$, q_c – критическая скорость охлаждения расплава.

Система уравнений (4) решена численно в рамках нулевого приближения теории самосогласованных фононов [5] для парного потенциала вида $\Phi(r) = \Phi_1(r) + \Phi_2(r)$, где короткодействующая часть $\Phi_1(r)$ аппроксимирована потенциалом типа твердых сфер, а дальнодействующая – потенциалом Морзе. Результаты расчета температурной зависимости вероятности образования делокализованных состояний и приведенных среднеквадратичных смещений $y = 36\, y_{\alpha\alpha}(0,\ell)/a^2$ ближайших атомов представлены на рисунке ($\tau = kT/V_0$ – приведенная температура, V_0 – энергия диссоциации связи, a – межатомное расстояние). Равновесному переходу из твердого состояния в жидкое соответствует кривая 1 ($q = 0$, $\tilde{q} = -1$): участок ab определяет долю делокализованных состояний в кристалле, ef – долю локализованных состояний в расплаве. При нагревании или охлаждении тела возможно образование метастабильных состояний – перегретого кристалла (участок bc) или переохлажденной жидкости (участок cd). При охлаждении расплава от температуры τ_0 со скоростью охлаждения $q < q_c$ (кривые 2, 3) температура перехода в слабо неравновесное квазикристаллическое состояние понижается. Следует отметить, что доля атомов в делокализованных состояниях и амплитуда колебаний для твердого тела, полученного со скоростями охлаждения $q < q_c$, увеличивается при заданной температуре с ростом q. При критической скорости охлаждения (кривая 4) метастабильные состояния исчезают, а особые точки на температурной зависимости $\sigma(\tau)$, $y(\tau)$ ($\partial\sigma/\partial\tau \to \infty$, $\partial y/\partial\tau \to \infty$) вырождаются в одну точку, соответствующую точке перегиба функций. Следовательно, кривая $\sigma(q_c)$ $y(q_c)$ разграничивает область существования равновесной переохлажденной



Температурная зависимость доли σ делокализованных состояний (а) и приведенных среднеквадратичных смещений y атомов (б) при различных скоростях охлаждения расплава. 1 - $\tilde{q}$ =-1, 2 - $\tilde{q}$ =-0.5, 3 - $\tilde{q}$ =-0.25, 4 - $\tilde{q}$ =0, 5 - $\tilde{q}$ =1, 6 - $\tilde{q}$ =10.

жидкости и неравновесного стеклообразного тела. При охлаждении расплава со скоростью $q > q_c$ (кривые 5, 6) перегиб функций $\sigma(\tau)$, $y(\tau)$ отсутствует, реализуется стеклообразное состояние, степень неравновесности которого описывается параметрами $\eta = \sigma - \sigma_e$, $\eta_y = y - y_e$.

Полученные результаты могут быть применены для объяснения возрастания флуктуаций ближнего порядка (межатомного расстояния и углов между связями) и температуры стеклования с увеличением скорости охлаждения, характера поведения физических свойств в процессе охлаждения расплавов.

Список литературы

[1] Шумовский А.С., Юкалов В.И. 2-й Междунар. симп. по избран. пробл. стат. мех. Дубна, 1981, с. 238-260.
[2] Регель А.Р., Глазов В.М. // ФТП. 1981. Т. 17. № 10, с. 1729-1747.
[3] Champeney D.C., Sedgwiek D.F.// J. Phys. C.: Solid State Phys., 1972. V. 5. N 14. P. 1903-1913.
[4] Киянченко Ю.Ф., Литвинов Ю.И. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 45. № 5. С. 215-217.
[5] Плакида Н.М. Статистическая физика и квантовая теория поля. М.: Наука, 1973, с. 205-240.

Ужгородский государственный университет
Поступило в Редакцию 31 декабря 1988 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 5 12 марта 1989 г.

05.4; 09

УСИЛЕНИЕ МАГНИТОСТАТИЧЕСКОЙ ВОЛНЫ ПОТОКОМ МАГНИТНЫХ ВИХРЕЙ В СТРУКТУРЕ ФЕРРИТ-СВЕРХПРОВОДНИК

А.Ф. Попков

Хорошо разработаны пассивные устройства на магнитостатических волнах (МСВ) различного функционального назначения [1, 2]. Однако активные устройства на МСВ [3] не получили должного развития в связи с трудностью реализации эффективных условий усиления МСВ при использовании для этих целей дрейфа носителей тока в полупроводниковом слое, покрывающем феррит. В настоящем сообщении обсуждается другая возможность усиления МСВ, связанная с движением магнитного потока, образуемого решеткой вихрей Абрикосова в сверхпроводнике II-го рода, под действием транспортного тока в структуре феррит-сверхпроводник. Эта идея представляет интерес в связи с тем, что открытые недавно высокотемпературные сверхпроводники [4, 5] характеризуются высокой подвижностью вихревой структуры $v/j = \rho_n/B_{c2} = 10^{-7}$–$10^{-8}$ м^3/А·с при 77 К, где v - скорость магнитного вихря, j - плотность тока, ρ_n-