

05

Источники возникновения модулированных структур в кристалле при изменении внешнего воздействия

© Е.Е. Слядников

Томский научный центр СО РАН

E-mail: slyad@cc.tpu.edu.ru

Поступило в Редакцию 21 июля 2004 г.

Показано, что локальными источниками образования модулированной структуры (неоднородной неупругой деформации) в структурно-неустойчивом кристалле являются пейсмекеры, которые спонтанно возникают на неоднородностях среды.

Во многих кристаллах, испытывающих мартенситные переходы при изменении внешнего воздействия (температуры, внешней силы) экспериментально обнаружены предпереходные состояния, модулированные структуры [1,2]. Полученные данные свидетельствуют о том, что в процессе изменения внешнего воздействия в образцах самопроизвольно возникает неоднородное распределение неупругой деформации, которое является результатом самоорганизации кристалла. Наблюдаемая пространственно-временная картина неоднородной неупругой деформации имеет вид бегущей вдоль образца фазовой автоволны [3]. Экспериментально установлено, что закон дисперсии фазовых автоволн имеет параболический характер (рис. 1 [4]).

В рамках микроскопической модели [5,6] образование предпереходного состояния с модулированной кристаллической структурой связано с образованием неоднородного конденсата автосолитонов, неоднородного распределения фазы параметра порядка. Однако термодинамический подход, использованный в [6], позволяет определить лишь начальное и конечное состояние кристалла, поэтому актуально исследовать динамику перехода в модулированную кристаллическую структуру.

При достижении критического значения внешнего воздействия σ_c (температуры, внешней силы) взаимодействие автосолитонов с ло-

кальными смещениями атомов приводит к неустойчивости состояния кристалла с идеальным газом автосолитонов относительно образования Бозе-конденсата автосолитонов [5,6]. Возникает предпереходное состояние кристалла — когерентное состояние с конденсатом автосолитонов. Благодаря когерентности движение конденсата может быть описано с помощью волновой функции единственного автосолитона $\Psi = |\Psi| \exp(-i[\omega_0 t - \Phi(\mathbf{r})])$, которая является параметром порядка системы. Квадрат амплитуды параметра порядка равен плотности конденсата автосолитонов, а градиент фазы равен волновому вектору модулированной кристаллической структуры. Флуктуация параметра порядка с градиентом фазы приведет к возникновению, с одной стороны, неоднородности в конденсате, а с другой стороны, модулированной кристаллической структуры (неоднородной неупругой деформации). Однако для стабильного существования неоднородности в конденсате автосолитонов необходим источник образования градиента фазы. Покажем, что в кристалле источниками образования неоднородного конденсата автосолитонов являются пейсмекеры, возникающие в областях неоднородности кристалла.

Неоднородный комплексный параметр порядка $\Psi(\mathbf{r}, t)$ описывается уравнением эволюции [6]

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

Здесь точка обозначает дифференцирование по времени, $\lambda(\rho) = -\alpha_1 - \beta_1|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, $\omega(\rho) = \alpha_2 + \beta_2|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, а коэффициенты α_1 , α_2 , β_1 , β_2 и константы определены и вычислены в работе [6]. 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, конденсат автосолитонов представляет собой автоколебательную среду, которая описывается „ λ - ω -моделью“ [7].

Если комплексный коэффициент диффузии $D = D_1 + iD_2$ в уравнении (1) равен нулю, то конденсат представляет собой совокупность не связанных между собой точек, совершающих автоколебания по закону $\Psi(t) = \rho_0 \exp[-i(\omega_0 t + \varphi)]$ с амплитудой ρ_0 , определенной из условия $\lambda(\rho_0) = 0$, и частотой $\omega_0 = \omega(\rho_0)$. Здесь ρ_0^2 — плотность генерированных автосолитонов, частота ω — энергия автосолитонов в конденсате, φ — начальная фаза автоколебаний. Такому однородному режиму автоколебаний соответствует состояние с однородны-

ми плотностью конденсата и кристаллической структурой. Согласно $\delta\dot{\rho} = \rho_0\lambda'(\rho_0)\delta\rho$, где штрих обозначает дифференцирование по ρ , малые возмущения амплитуды $\delta\rho = \rho - \rho_0$ для точки конденсата затухают со временем, причем время релаксации амплитуды равно $t_{rel} = |\rho_0(\partial\lambda/\partial\rho)_{\rho=\rho_0}|^{-1} = |(1/2\alpha_1)|$.

Считая ($D \neq 0$) и подставляя параметр порядка в виде $\Psi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \exp[-i(\omega_0 t + \varphi(\mathbf{r}, t))]$ в уравнение (1), получим уравнения

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

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

Предполагая, что время релаксации фазы t_L велико по сравнению со временем релаксации амплитуды t_{rel} , рассмотрим только плавные распределения параметра порядка с большой пространственной длиной L в духе [8]. Тогда отклонения амплитуд $\delta\rho(\mathbf{r}, t)$ будут адиабатически подстраиваться к значениям $\nabla\varphi$ и $\nabla^2\varphi$ в соответствующих точках конденсата. Подставляя $\rho = \rho_0 + \delta\rho$, $\delta\rho = \rho_0 t_{rel} [D_2\nabla^2\varphi - D_1(\nabla\varphi)^2]$ в уравнение (3), получим для однородного кристалла

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

где коэффициенты $a = -(\beta_2/\beta_1)D_1 + D_2$, $b = (\beta_2/\beta_1)D_2 + D_1$ обладают размерностью коэффициента диффузии, а $\omega(\rho) = \omega_0$. Из уравнения (2) видно, что время t_L имеет порядок величины $t_L \approx L^2/b$. Поэтому уравнение фазовой динамики (4) применимо лишь для описания плавных распределений фазы с большой пространственной длиной $L \gg (bt_{rel})^{1/2}$.

С помощью подстановки $\varphi(\mathbf{r}, t) = (b/a) \ln(Q(\mathbf{r}, t))$ уравнение (4) сводится к уравнению

$$\dot{Q} = b\nabla^2 Q. \quad (5)$$

Из уравнения (5) видно, что эволюцию фазы конденсата определяет знак коэффициента b . Если этот коэффициент положителен, любая локальная неоднородность Q , φ с характерной длиной L полностью размывается и исчезает за время порядка t_L . Таким образом, в однородном конденсате любая флуктуация фазы параметра порядка размывается, а модуляция кристаллической структуры, вызванная этой флуктуацией, исчезает.

При распространении фазовой волны в конденсате в нем устанавливается постоянный градиент фазы автоколебаний $\nabla\varphi = -\mathbf{q} = \text{const}$ [6,8]. Вдоль направления вектора \mathbf{q} автоколебания соседних точек конденсата происходят с постоянным сдвигом по фазе, как будто по конденсату движется фазовая автоволна. Такая волна отвечает частному решению уравнения (4) $\varphi = -\mathbf{q}\mathbf{r} + aq^2t$. Сдвиг частоты автоколебаний равен $\omega = \omega_0 + aq^2$, а скорость распространения волны равна $c = \omega_0/q + aq$. Из уравнения (4) видно, что все автоволны устойчивы при $b > 0$. Такому режиму автоколебаний конденсата соответствует состояние с модулированной кристаллической структурой (неоднородной неупругой деформацией), с волновым вектором \mathbf{q} .

Для возбуждения фазовых волн в конденсате необходимо создать начальный градиент фазы автоколебаний, что возможно лишь при существовании источника градиента фазы — неоднородности кристалла. В области неоднородности кристалла частота автоколебаний $\omega(\mathbf{r})$ превышает частоту колебаний остальных точек конденсата ω_0 , причем $\omega(\mathbf{r}) \rightarrow \omega_0$ при $r \rightarrow \infty$. Тогда фазовая динамика конденсата в неоднородном кристалле описывается уравнением

$$\dot{\varphi} = \omega(\mathbf{r}) - \omega_0 + a(\nabla\varphi)^2 + b\nabla^2\varphi. \quad (6)$$

После преобразования $\varphi(\mathbf{r}, t) = (b/a) \ln(Q(\mathbf{r}, t))$ оно сводится к линейному уравнению

$$\dot{Q} = b\nabla^2Q + (a/b)[\omega(\mathbf{r}) - \omega_0]Q, \quad (7)$$

которое эквивалентно уравнению Шредингера. В рамках уравнения Шредингера выполнение условия $\omega(\mathbf{r}) > \omega_0$ внутри некоторой области означает, что в этой области имеется потенциальная яма. Известно [9], что для любого связанного состояния частицы в потенциальной яме волновая функция экспоненциально спадает на достаточно больших расстояниях от центра ямы. Предполагая, что в потенциальной яме имеется всего одно связанное состояние, получим вдали от области локализации возмущения

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = (b/a) \ln[C_0 + C_1 \exp(\lambda_1 t - (\lambda_1/b)^{1/2} r)], \quad (8)$$

где λ_n — собственные значения для линейного оператора $\widehat{L}\mu = \lambda\mu$, $\widehat{L} = b\nabla^2 + (a/b)[\omega(\mathbf{r}) - \omega_0]$. Это решение описывает рождающий-

ся в области неоднородности кристалла источник фазовых автоволн (пейскекер). Внутри растущей сферической области радиуса $R(t) = (b\lambda_1)^{1/2}t$ имеем систему концентрически расходящихся фазовых автоволн $\varphi(\mathbf{r}, t) = (b/a)[\lambda_1 t - (\lambda_1/b)^{1/2}r]$ с частотой $\omega = \omega_0 + (b/a)\lambda_1$ и волновым числом $k = (\lambda_1 b/a^2)^{1/2}$, которые приводят к образованию модулированной кристаллической структуры (неоднородной неупругой деформации).

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что кристалл, испытывающий структурный переход, стимулированный изменением внешнего воздействия (температуры, внешней силы) ведет себя как автоколебательная среда. Динамика формирования модулированной кристаллической структуры (неоднородной неупругой деформации) имеет форму бегущей вдоль образца фазовой автоволны, причем закон дисперсии автоволны $\omega = \omega_0 + aq^2$ имеет параболический характер, наблюдаемый экспериментально [4]. Такое поведение дисперсии связано с наличием в конденсате автосолитонов нелокального взаимодействия, пропорционального $\nabla^2\Psi(\mathbf{r}, t)$. В свою очередь, физической причиной возникновения конденсата автосолитонов является взаимодействие локальных атомных смещений (одиночных возбуждений решетки) и автосолитонов (коллективных возбуждений решетки), которое и приводит к генерации неоднородного конденсата автосолитонов. Картина поведения конденсата автосолитонов является нелинейной и подчиняется нелинейному уравнению Шредингера (1). Локальными источниками образования модулированной структуры (неоднородной неупругой деформации) в кристалле являются пейскекеры, спонтанно возникающие на неоднородностях среды.

Список литературы

- [1] Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука, 1985. 229 с.
- [2] Пушин В.Г., Кондратьев В.В., Хачин В.Н. Предпереходные явления и мартенситные превращения. Екатеринбург: УрО РАН, 1998. 367 с.
- [3] Зуев Л.Б., Данилов В.И., Семухин Б.С. // Успехи физ. мат. 2002. Т. 3. № 3. С. 237–304.
- [4] Баранникова С.А. // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. В. 8. С. 75–80.
- [5] Слядников Е.Е. // ФТТ. 2004. Т. 46. В. 6. С. 1065–1071.

- [6] *Слядников Е.Е.* // Изв. вузов. Физика. 2004. № 7. Приложение. С. 59–71.
- [7] *Vak P., Etery V.J.* // Phys. Rev. Lett. 1976. V. 36. P. 978–984.
- [8] *Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С.* Введение в синергетику. М.: Наука, 1990. 272 с.
- [9] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 521 с.