1993 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 35, № 10
1993 SOLID STATE PHYSICS Vol. 35, N 10



# ИНВЕРСИЯ ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ АТОМОВ ПО КРИСТАЛЛИЧЕСКИМ УЗЛАМ ИЛИ МЕЖДУУЗЛИЯМ ПРИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ

*В.И.Сугаков*

Показано, что при структурных фазовых переходах I рода при наличии нескольких минимумов для атомов в элементарной ячейке в окрестности границы раздела фаз возникает инверсная заселенность атомов по кристаллическим положениям (узлам или междоузлиям). Явление объясняется тем, что при движении фронта волны фазового перехода, при котором атомы перестраиваются из одного положения в другое, сначала меняет знак разность энергий атомов в минимумах, а затем происходит изменение знака параметра порядка. Таким образом, имеет место запаздывание в установлении равновесной заселенности, что и приводит к появлению в некоторой области пространства инверсной заселенности. Рассмотрены особенности возникновения инверсии для различных моделей фазовых переходов. Наличие инверсии может привести к различным когерентным явлениям (ускорению атомов, излучению электромагнитных волн и др.).

В кристаллах возможно наличие нескольких минимумов для каждого атома в ячейке. В частности, это часто реализуется в сплавах внедрения ОЦК и ГЦК решеток (октаэдрические и тетраэдрические положения, несколько различных типов октаэдрических положений и др. [1,2]). В случае термодинамического равновесия атомы находятся в минимуме с более низкой энергией. Наблюдаются разнообразные фазовые переходы, при которых атомы из одного минимума переходят в другой. При фазовых переходах I рода существует область температур, когда различные фазы могут реализоваться одновременно; одна их них стабильная, другая — метастабильная. При этом в равновесии атомы всегда расположены в более глубоких минимумах, однако в разных фазах наиболее глубокие минимумы соответствуют разным положениям атома в ячейке. В метастабильной фазе наиболее глубокий минимум имеет бо́льшую энергию, чем наиболее глубокий минимум стабильной фазы. При фазовом переходе происходит перестройка решетки таким образом, что наиболее глубокий минимум до и после перехода расположен при разных положениях атома в ячейке.

В данной работе показано, что в окрестности раздела двух фаз в процессе динамики фазового перехода (в сторону увеличения области стабильной фазы) возможно возникновение инверсной заселенности, когда атомы располагаются в минимуме с более высокой энергией. При этом картина расположения атомов по потенциальным ямам выглядит примерно так, как представлено на рис. 1. В системе с инверсной заселенностью можно ожидать появления различных когерентных явлений.

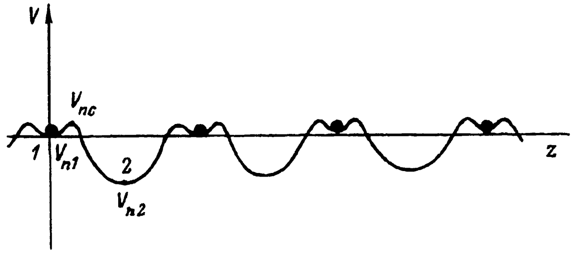


**Рис. 1.** Зависимость потенциальной энергии атома вдоль кристаллической оси кристалла. Кружки показывают расположение атомов.

В частности, в работе [3] показано, что при инверсной заселенности атомов одинакового сорта, расположенных вдоль некоторого кристаллического ряда (рис. 1), возможна когерентная релаксация, когда при последовательном соударении атомы переходят из верхнего минимума в нижний, отдавая избыток энергии соседнему атому. При этом один из атомов (последний в цепочке столкновений) ускоряется. Наличие в кристаллах известного явления фокусировки [4] способствует протеканию многократных последовательных столкновений. При этом возможно ускорение частицы до нескольких десятков электронвольт. Кроме того, если разрешены оптические переходы между состояниями, при появлении инверсии должно наблюдаться избыточное (над тепловым) электромагнитное излучение. Также возможны процессы стимулированной эмиссии фононов.

В данной работе мы не будем касаться этих явлений, а покажем возможность возникновения инверсной заселенности атомов при фазовых переходах и характерные ее особенности.

## 1. Критерии возникновения инверсной заселенности

Рассмотрим простую модель фазового перехода в приближении самосогласованного поля при плоской границе раздела фаз и системе с двумя минимумами потенциальной энергии для каждого атома в кристаллической ячейке: *1* и *2* (рис. 1). В рассматриваемой системе должно происходить движение волны фазового перехода таким образом, чтобы область стабильной фазы росла. При этом по одну сторону от границы раздела атомы будут расположены преимущественно в одном минимуме потенциальной энергии, а по другую сторону — в другом. Если глубина минимумов намного превышает $kT$, то вероятность пребывания атомов в окрестности минимума намного превышает вероятность перехода между минимумами. Тогда можно воспользоваться методом Крамерса [5] и ввести вероятности пребывания атомов в минимумах *1* и *2*.

Для ячейки кристалла с вектором трансляции $n$ обозначим эти величины через $P_{n1}$ и $P_{n2}$. Вероятности заселения потенциальных ям $P_{n1}$ и $P_{n2}$ удовлетворяют кинетическому уравнению

$$\frac{dP_{n1}}{dt} = -\frac{dP_{n2}}{dt} = -W_{n1,n2}P_{n1} + W_{n2,n1}P_{n2}, \tag{1}$$

где $W_{ni,nj}$ — вероятность атому в ячейке $n$ перейти из положения $i$ в положение $j$.

Уравнение (1) справедливо, если в процессе кинетики атом не покидает ячейку. Например, это имеет место, когда два атома кристалла связаны водородными связями, а атом водорода имеет две потенциальные ямы.

Также такая ситуация возникает при произвольном движении атомов по ячейкам, число атомов равно числу ячеек, но существует сильное отталкивание между атомами при их расположении в одной ячейке. В системе могут быть другие атомы, которые не перестраиваются при фазовых переходах. Они влияют на динамику через вероятности перехода $W_{ni,nj}$.

Энергии атомов, находящихся в минимумах 1 и 2 ячейки $n$, обозначим соответственно через $V_{n1}$ и $V_{n2}$. Поскольку в разных фазах относительное значение энергий $V_{n1}$ и $V_{n2}$ меняется, разность величин $P_{n1} - P_{n2}$ не определяет наличия инверсии. Кроме разности заселенностей, требуется учитывать значение энергий. За меру инверсии возьмем величину

$$\delta P = S_n \operatorname{sign}(\Delta V_n), \tag{2}$$

где

$$\Delta V_n = V_{n1} V_{n2},$$
$$S_n = P_{n1} - P_{n2} \tag{3}$$

— параметр порядка, характеризующий распределение атомов по потенциальным ямам. Величина $\delta P$ представляет собой отношение разности числа атомов, расположенных на верхнем и нижнем уровнях, к полному числу атомов.

Кроме того, для физического анализа проявления инверсии удобно ввести еще одну величину, характеризующую инверсию

$$\delta \mathcal{E} = \Delta V_n S_n. \tag{4}$$

В состоянии термодинамического равновесия величина $\delta\mathcal{E} < 0$ (нижний уровень заселен больше, чем верхний). В случае инверсии обе величины становятся положительными ($\delta P > 0$, $\delta\mathcal{E} > 0$). В этом случае возможно упоминавшееся выше ускорение атомов при релаксации [3] и величина $\delta\mathcal{E}$ определяет в среднем за многие столкновения приобретаемую частицей энергию на периоде решетки. Также величина (4) определяет баланс энергий при индуцированном излучении света или фононов при вынужденных переходах атомов между минимумами (т.е. будет ли наблюдаться поглощение света $\delta\mathcal{E} < 0$ или излучение $\delta\mathcal{E} > 0$).

При высоте барьера, между ямами намного превышающей $kT$, вероятность перехода между ямами описывается формулой Аррениуса

$$W_{n1,n2} = W_0 \exp\left(-\frac{V_{nc} - V_{n1}}{kT}\right),$$

$$W_{n2,n1} = W_0 \exp\left(-\frac{V_{nc} - V_{n2}}{kT}\right), \tag{5}$$

где $W_0$ — некоторая константа, $V_{nc}$ — энергия в максимальной точке барьера (рис. 1). Вероятности прямых и обратных процессов удовлетворяют принципу детального равновесия.

Вводя параметр порядка $S$ и учитывая, что $P_{n1} + P_{n2} = 1$, получим уравнение

$$\frac{dS_n}{dt} = W_{n2,n1} - W_{n1,n2} + (W_{n2,n1} + W_{n1,n2})S_n. \tag{6}$$

Поскольку вероятности переходов $W_{n1,n2}$, $W_{n2,n1}$ зависят от величин $V_{n1}$, $V_{n2}$, $V_{nc}$, которые в свою очередь также зависят от параметра порядка $S_n$, при всех значениях $n$ соотношение (6) является сложным трансцендентным уравнением для определения зависимости $S_n(t)$. Предположим, что в стационарном однородном случае имеется несколько решений для параметра порядка $S$. Рассмотрим движение фронта волны фазового перехода, когда граница раздела фаз плоская и по разные стороны границ раздела имеются различные фазы, а фронт волны движется так, чтобы при этом увеличивался объем стабильной фазы за счет метастабильной. Будем считать, что параметр порядка мало меняется на периоде решетки и $S_n$ является медленной функцией $n$. Тогда можно положить $n \to x$, $S_n(t) = S(x,t)$, где ось $Ox$ направлена перпендикулярно границе раздела фаз. Движение волнового фронта фазового перехода описывается автоволновой переменной $S(x,t) = S(\xi)$, где $\xi = x - ut$, $u$ — скорость волны движения фронта. Тогда из выражения (6) следует

$$-uS'(\xi) = W_{1,2}\left(\exp\left(-\frac{\Delta V}{kT}\right) - 1 + \left(\exp\left(-\frac{\Delta V}{kT}\right) + 1\right) S\right), \qquad (7)$$

где $W_{1,2} = W_{n1,n2}$ являются функционалами $S(\xi)$, т.е. зависят не только от значения $S$ в точке $\xi$, но и от значения $S$ в других точках.

Решение уравнения (7) описывает изменение параметра порядка от его значения в одной фазе при $\xi \to -\infty$ до его значения в другой фазе при $\xi \to \infty$. Для определенности будем полагать, что $S(-\infty) < S(\infty)$. Поскольку фронт волны фазового перехода движется таким образом, что размеры метастабильной области уменьшается, при изменении температуры скорость движения границы раздела фаз меняет знак при $T = T_c$, где $T_c$ — температура фазового перехода.

Предположим, что уравнение (7) решено и значения скорости $u$ и параметра порядка $S(\xi)$ известны. Тогда из уравнения (7) можно определить значение $\Delta V$ и, подставив его в (4), найти инверсию $\delta\mathcal{E}$

$$\delta\mathcal{E} = -kTS\ln\left(1 + \frac{2S - uS'/W_{1,2}}{1 - S}\right). \qquad (8)$$

Соотношение (8) не определяет окончательно $\delta\mathcal{E}$, поскольку величина $W_{12}$ зависит также от $\Delta V$ и, следовательно от $\delta\mathcal{E}$. Однако оно позволяет найти закономерности появления инверсии. Инверсия существует, если $\delta\mathcal{E} > 0$. Как следует из (8), это имеет место при выполнении условий

$$0 < S < \frac{uS'}{2W_{1,2}} \qquad \text{при} \qquad u > 0 \qquad (9)$$

или

$$\frac{uS'}{2W_{1,2}} < S < 0 \qquad \text{при} \qquad u > 0. \qquad (10)$$

Из соотношений (9) и (10) следуют выводы.

1) Инверсия существует в области, где $S' \neq 0$, т.е. в области неоднородности.

2) Инверсия возникает в неравновесных условиях, когда имеет место движение фронта волны ($u \neq 0$). Она отсутствует при фазовых переходах

II рода, а также при переходах I рода при температуре фазового перехода ($T = T_c$), когда возможно сосуществование фаз. Однако инверсия может возникнуть и при фазовых переходах II рода при движении доменных антифазных границ во внешних полях.

3) При структурных фазовых переходах I рода, при которых параметр порядка меняет знак, инверсия в окрестности границы раздела фаз существует всегда. При фазовых переходах порядок–беспорядок, когда $S$ меняется от нуля до некоторого значения, возможность образования инверсии требует отдельного исследования.

4) Условия (9) и (10) соответствуют различным значениям температуры по отношению к $T_c (T < T_c$ и $T > T_c)$. Одно условие выполняется при перегреве образца, другое — при переохлаждении. При изменении температуры и пересечении точки $T_c$ стабильная фаза становится метастабильной, и наоборот. Поскольку величины $u$ и $W_{12}$ зависят от температуры, то области существования инверсий при нагреве и охлаждении образца, вообще говоря, различны.

## 2. Изучение инверсии для некоторых моделей фазовых переходов

Более определенные данные об образовании инверсии заселенностей на границе раздела фаз можно получить для конкретных моделей фазовых переходов. Для нахождения параметра порядка из решения уравнения (7) нужно знать зависимости $V_{n1}$, $V_{n2}$, $V_{nc}$ от параметра порядка $S_n$. В приближении самосогласованного поля для энергии атома в положении $i$ можно записать

$$V_{ni} = V_{ni}^{\text{out}}[S] + \sum_{n',j=1,2} V_{ni,n'j}[S] P_{n',j}, \tag{11}$$

где $i$ принимает значения 1,2 и $c$; $V_{ni}^{out}[S]$ — энергия взаимодействия атома $n$ в положении $i$ с атомами остова (атомами, не испытывающими перестройку при фазовом переходе); $V_{ni,n'j}[S]$ — энергия взаимодействия между атомами, меняющими положение при фазовом переходе и находящимися в ячейке $n$ в положении $i$ и в ячейке $n'$ в положении $j$. Аргумент в квадратных скобках $V_{ni}^{\text{out}}[S]$ и $V_{ni,n'j}[S]$ означает, что обе величины зависят нелокально от параметра порядка, т.е. значение энергии $n$-го атома в общем случае определяется распределением атомов по минимумам в других ячейках. Такая зависимость может возникнуть вследствие изменения периода решетки или поляризации остова при изменении параметра порядка. Кроме того, значение $V_{nc}$ (энергия в максимуме потенциального барьера между минимумами) должно быть менее чувствительным к перераспределению атомов по минимумам, чем $V_{n1}$ и $V_{n2}$. По крайней мере разложение $V_{nc}$ по параметру порядка должно начинаться с более высокой степени $S$, чем аналогичные разложения $V_{n1}$ и $V_{n2}$.

Само наличие фазового перехода и зависимость параметра порядка от координат определяются главным образом разностью энергий в минимумах: $\Delta V = V_{n1} - V_{n2}$. Поэтому для дальнейших расчетов целесообразно ввести новые обозначения

$$V_{n1} = V + \frac{\Delta V}{2}, \tag{12}$$

$$V_{n2} = V - \frac{\Delta V}{2}, \tag{13}$$

где

$$V = (V_{n1} + V_{n2})/2.$$

В силу вышесказанного о наибольшей чувствительности результатов к $\Delta V$ в дальнейшем мы решим ряд задач в предположении, что величины $V$ и $V_c$ не зависят от параметра порядка. Полагая плавность изменения $S_n$ от $n$, можно положить $S_n = S(x)$. Тогда $\Delta V$ является функционалом $S(x)$ ($\Delta V = \Delta V[S(x)]$). Учитывая соотношение (13), уравнение (3) можно переписать в виде

$$\Delta V = -2kT \ln \frac{1}{2} \left( -\frac{uS'}{W(1-S)} + \left[ \left( \frac{uS'}{W(1-S)} \right)^2 + \frac{4(1+S)}{(1-S)} \right]^{1/2} \right), \quad (14)$$

где

$$W = W_0 \exp\left( -\frac{V_c - V}{kT} \right). \quad (15)$$

Соотношение (14) эквивалентно формуле (8). В частности, оно приводит к ранее полученным условиям возникновения инверсии (9) и (10). Однако в соотношении (14) при сделанном предположении о независимости $V$ и $V_c$ от $S$ величина $\Delta V$ найдена в явном виде (в формуле (8) и правая, и левая части зависят от $\Delta V$).

Рассмотрим ряд конкретных примеров.

а) Величины $V_{ni}$ и $V_{ni,nj}$ не зависят от параметра порядка $V_{n1} \neq V_{n2}$, т.е. минимумы энергии, создаваемые остовом, различны по величине (при $V_{n1} = V_{n2}$ реализуется фазовый переход II рода, при котором рассматриваемый эффект отсутствует). Различная глубина ям может возникать при неэквивалентности положений минимумов или в системе с эквивалентными минимумами и фазовым переходом II рода при наличии внешних полей (давления, электрического поля в сегнетоэлектриках).

Из формулы (11) следует

$$\Delta V = Q - \sum A_{nn'} S_{n'}, \quad (16)$$

где

$$Q = V_{n1} - V_{n2} + \frac{1}{2} \sum_{n'} (V_{n1,n'1} + V_{n1,n'2} - V_{n2,n'1} - V_{n2,n'1}), \quad (17)$$

$$A_{nn'} = \frac{1}{2} (V_{n1,n'2} + V_{n2,n'1} - V_{n1,n'1} - V_{n2,n'2}). \quad (18)$$

В силу периодичности кристалла величина $q$ на зависит от $n$, а $A_{nn'}$, зависит от разности $n - n'$. Предполагая, что энергия взаимодействия между атомами $V_{ni,n'j}$ быстро убывает на расстоянии, характерном для изменения $S$, получим

$$\Delta V = Q - SA - DS'', \quad (19)$$

где

$$A = \sum A_{nn'}, \quad (20)$$

$$D = 1/2 \sum_{n'} A_{nn'}(n_x - n'_x)^2. \tag{21}$$

При переходе к безразмерным единицам за единицу энергии выберем величину $|A|$ — модуль коэффициента перед линейным членом в функции (19). Тогда, принимая во внимание соотношение (19), из (14) получим следующее дифференциальное уравнение для параметра порядка $S$:

$$\frac{d^2 S}{d\tilde{\xi}^2} = f(S) + 2\tilde{T} \ln \left( -\frac{\tilde{u}}{2(1-S)} \frac{dS}{d\tilde{\xi}} + \left[ \left( \frac{\tilde{u}}{2(1-S)} \frac{dS}{d\tilde{\xi}} \right)^2 + \frac{(1+S)}{1-S} \right]^{1/2} \right), \tag{22}$$

где

$$a = \frac{A}{|A|}, \qquad q = Q/|A|, \qquad T = kT/|A|,$$

$$\tilde{\xi} = (|A|/D)^{1/2}\,\xi, \qquad \tilde{u} = \frac{u}{W}(|A|/D)^{1/2}, \tag{23}$$

$$f(S) = q - aS. \tag{24}$$

В однородном случае параметр порядка $S_i$ находится из условия

$$f(S_i) + \tilde{T} \ln \frac{1+S_i}{1-S_i} = 0. \tag{25}$$

Если функция $f(S)$ имеет вид (24), то во всей области температур существует одно стабильное состояние и в определенной области температур может реализоваться метастабильное состояние. В последнем случае существует фазовый переход из метастабильного состояния в стабильное, описываемый рассматриваемой здесь автоволной.

Уравнение (22) при $f(S)$ вида (24) имеет три особые точки, две из которых типа седла соответствуют значениям параметра порядка однородного состояния. Фазовая траектория в пространстве переменных $S$ и $dS/d\xi$ проходит из одной седловой точки в другую. Уравнение (22) решалось численно.

На рис. 2 представлены зависимости параметра порядка и инверсии для рассматриваемого случая неэквивалентных ям при некоторых параметрах (их значения представлены в подписи к рис. 2). Видно, что вдали

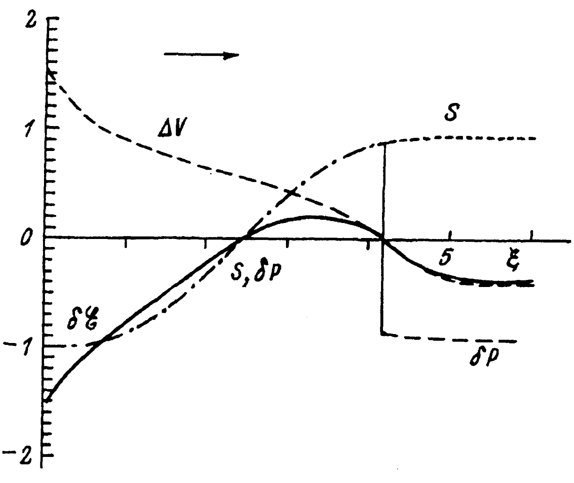


**Рис. 2.** Пространственные зависимости параметра порядка $S$, разности энергий $\Delta V$ и величин, характеризующих инверсию $\delta P$ и $\delta\mathcal{E}$ при фазовом переходе для случая, когда функция $f(S)$ в уравнении (22) представлена в виде (24) при следующих параметрах: $a = 1.0$, $q = 0.5$, $\tilde{T} = 0.13$. Безразмерная скорость волны $\tilde{u} = 10.7$.

от области фазового перехода ($\xi \to \pm\infty$) параметр порядка $S$ и разность энергий в минимуме $\Delta V$ имеют разные знаки. Это естественно, поскольку в случае равновесия атомы расположены преимущественно в минимумах с более низкой энергией. Однако в области фазового перехода величины $S$ и $\Delta V$ меняют знак не одновременно — сначала меняет знак $\Delta V$, а затем $S$. Существует запаздывание в установлении равновесных значений заселенностей. Поэтому в окрестности границы раздела фаз в области пространства между точками, где $\Delta V = 0$ и $S = 0$, имеет место инверсия и $\delta\mathcal{E}$ и $\delta P > 0$. При этом величина $\delta P$ значительная, на верхнем уровне может находиться свыше 90% атомов. В точке $\Delta V = 0$ зависимость величины $\delta P$ от $\xi$ испытывает разрыв, однако не следует ожидать физического проявления разрыва, поскольку при этом энергии минимумов совпадают. Расчеты показывают, что с понижением температуры величина инверсии растет.

б) Глубина минимумов, создаваемых остовом, меняется с температурой таким образом, что разность между минимумами при некоторой температуре меняет знак. Такая ситуация возникает при структурных фазовых переходах, когда по-разному меняется с температурой глубина минимумов, например вследствие изменения периода решетки при температурном расширении кристалла. В результате происходит структурная перестройка и атомы переходят их одного положения в другое. Представим величину $q$ в окрестности $T_0$ в виде

$$q = \alpha\left(\tilde{T} - \tilde{T}_0\right). \tag{26}$$

Из соотношений (24)–(26) следует, что в системе имеет место фазовый переход I рода. Величина области, в которой фазы сосуществуют ($\tilde{T}_1 < \tilde{T} < \tilde{T}_2$), зависит от параметра $\alpha$.

На рис. 3 представлены полученные из решения уравнения (22) зависимости параметра порядка и инверсии в области температур $\tilde{T}_1 < \tilde{T} < \tilde{T}_c$ ($a$) и $\tilde{T}_c < \tilde{T} < \tilde{T}_2$ ($б$). При переходе от одного случая к другому стабиль-

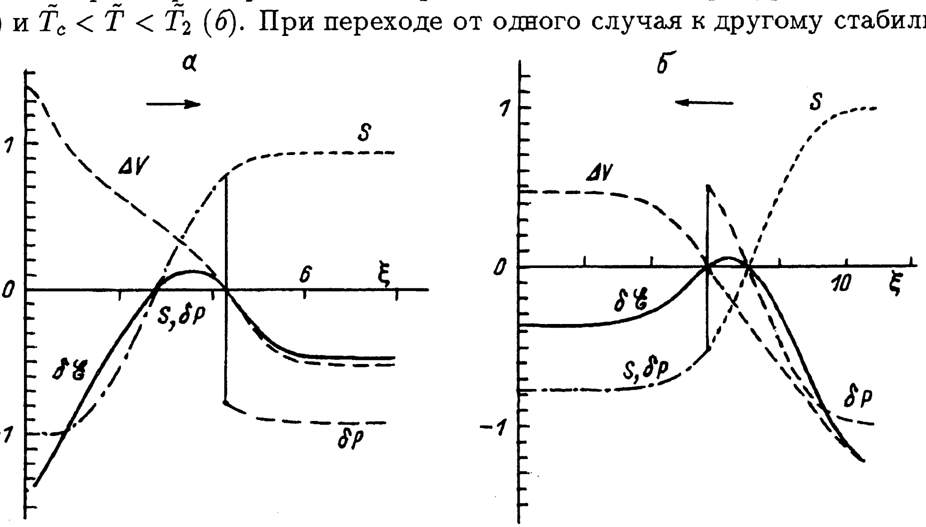


**Рис. 3.** Те же величины, что и на рис.2, при функции $f(S)$ вида (24),(26) при следующих параметрах: $a = 1.0$, $\alpha = -10$, $T_0 = 0.2$ для различных температур.
$a$ — $\tilde{T} = 0.16$, $\tilde{u} = 5.4$; $б$ — $\tilde{T} = 0.23$, $\tilde{u} = -3.6732$.

ная и метастабильная фазы меняются местами и выполняются условия (9) или (10). Максимального значения инверсия достигает на границах температурной области существования двух фаз ($\tilde{T} = \tilde{T}_1$ и $\tilde{T} = \tilde{T}_2$). На рис. 3 стрелками указано направление движения волны фазового перехода. Видно, что как функция координат инверсия наблюдается в области после изменения знака разности энергий атомов в минимумах, перед изменением знака параметра порядка. При увеличении $\alpha$ (увеличении роли остова) величина инверсии растет.

в) Симметричные ямы. Фазовый переход порядок–беспорядок. В общем случае взаимодействие между атомами и внешний потенциал зависят от параметра порядка. Эта зависимость может быть обусловлена изменением периода решетки или поляризации атомов остова при фазовом переходе. Раскладывая величины $V^{\text{out}}_{ni}[S]$ и $V_{ni,n'j}[S]$ по степеням $S$ из уравнений (11), (15), получим для определения параметра порядка уравнение (22), в котором $f(S)$ является нелинейной функцией $S$. В случае симметричных ям $f(S)$ является антисимметричной функцией $S$. Представим $f(S)$ в виде ряда, ограничиваясь членами пятого порядка по $S$, что достаточно для описания фазового перехода I рода «порядок–беспорядок»

$$f(S) = -aS + bS^3 + cS^5. \tag{27}$$

Исследование уравнения (22) при $f(S)$ вида (27) показывает, что при $c > 0$ инверсия существует, если $a < 0$, $b < 0$. Симметричная ($S = 0$) и несимметричная ($S \neq 0$) фазы могут реализоваться одновременно в области температур

$$0 < \tilde{T} < \tilde{T}_2 = \left(\frac{b^2}{8c} - \frac{a}{2}\right).$$

При температуре фазового перехода $\tilde{T} = T_c < T_2$ скорость фронта волны меняет знак. Инверсия ($\delta\mathcal{E} > 0$) имеет место в области температур $T_c < T < T_2$, т.е. в области существования переохлажденной упорядоченной фазы. Как функция координат инверсия заселенности в принципе существует во всей области неупорядоченной фазы, но максимальна в

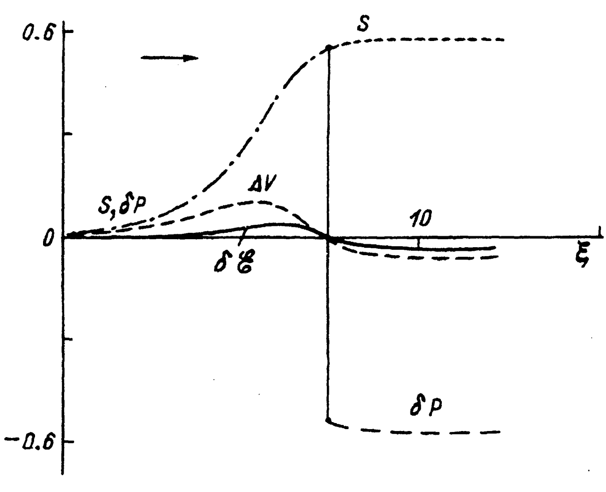


**Рис. 4.** Те же величины, что и на рис. 2, для фазового перехода порядок-беспорядок. Функция $f(S)$ представлена в виде (33) при следующих параметрах: $a = -1$, $б = -7.5$, $c = 12.5$, $\tilde{T} = 0.05$. Безразмерная скорость волны $\tilde{u} = 20.66$.

окрестности фронта волны и быстро убывает при удалении от границы раздела фаз.

На рис. 4 приведены значения параметра порядка и инверсии как функции координат, полученные в результате численного решения уравнения (22) с функцией $f(S)$, определяемой формулой (27).

Таким образом, в процессе динамики фазового перехода возможно возникновение инверсной заселенности атомов кристалла по узельным или межузельным положениям. Инверсия имеет место в окрестности границы раздела двух фаз, при этом в некоторой области пространства практически все атомы могут находиться в потенциальных ямах с более высокой энергией. Можно ожидать различных когерентных явлений, связанных с инверсной заселенностью, — ускорения атомов, индуцированного излучения. Поскольку перестройка фазового состояния обусловлена взаимодействием между атомами, то разница между минимумами потенциальных ям должна быть порядка этого взаимодействия, т.е. иметь значение порядка $kT_c$. В рассмотренных примерах оказалось, что $\delta\mathcal{E} < kT_c$. Исходя их типичных значений температур фазового перехода, можно сказать, что величина инверсии $\delta\mathcal{E}$ может достигать нескольких единиц $10^{-2}$ эВ и ее максимальное значение $\sim 10^{-1}$ эВ.

## Список литературы


[1] Хачатурян А.Г. Теория фазовых переходов и структура твердых растворов. М.: Наука, 1974. 384 с.

[2] Смирнов А.А. Теория сплавов внедрения. М.: Наука, 1979. 366 с.

[3] Сугаков В.И. // УФЖ. 1992. Т. 37. № 8. С. 1212–1217.

[4] Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М.: Мир, 1971.

[5] Гардинер К.В. Стохастические методы в естественных науках. М.: Мир, 1986. 526 с.



Институт ядерных исследований АН Украины
Киев



Поступило в Редакцию
19 мая 1993 г.