

риментальных точек в отличие от очень плавной экспериментальной кривой в остальных областях температур. Однако этот разброс имеет хаотический характер и выделить минимум или максимум в этом районе по экспериментальным точкам не представляется возможным.

Природа аномалий, обнаруженных нами на температурной зависимости теплоемкости в тетраборате лития, пока не ясна. Для выяснения этого проводятся исследования других физических свойств и тонкой кристаллической структуры кристаллов тетрабората лития.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Shiosaki T., Adaki M., Kobajashi M., Araki K. // Jap. J. Appl. Phys. 1985. V. 24. N 1. P. 25—27.
- [2] Ebata Y., Suzuki H., Matsumura S., Fukuta K. // Jap. J. Appl. Phys. 1983. V. 21. N 3. P. 160—162.
- [3] Shiosaki T., Adachi M., Kawabata A. // ISAF86 Proc. sixth IEEE Int. Symp. on Application of Ferroelectrics. 1986. P. 455—464.
- [4] Борман К. Л., Бурак Я. В., Перро И. Т., Кундзиньш М. А., Лисейко И. Т. // Актуальные проблемы физики и химии сегнетоэлектриков. Рига. 1987. С. 140—153.
- [5] Sebery A. A., Somerford D. J. // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1. N 12. P. 2279—2281.

Институт физики
твёрдого тела и полупроводников
АН БССР
Минск

Поступило в Редакцию
7 марта 1990 г.

УДК 539.219.3

© Физика твёрдого тела, том 32, № 8, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 8, 1990

МЕХАНИЗМ ПРОТЕКАНИЯ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ, БЛИЗКИХ К ПЛАВЛЕНИЮ

И. В. Удовичкий

При температурах, близких к плавлению, в твердом теле наблюдаются аномалии ряда физических свойств. Это приводит к необходимости введения понятия предрасплавленного состояния. Природа такого состояния связывается с образованием разупорядоченных областей в кристаллической решетке [1]. Считается, что к этому могут привести повышенное содержание дефектов и ангармонизм колебаний кристаллической решетки.

Образование неоднородной матрицы в предрасплавленном состоянии сказывается на ее свойствах переноса, в частности теплопроводности и диффузии. Однако для понимания этого явления с точки зрения теории перколяции необходимо, чтобы доля неоднородностей превышала величину порога протекания $\sim 16\%$ [2], что не подтверждается экспериментально. В связи с этим следует предположить, что возникающая в предрасплавленном состоянии система является динамичной, в которой перемещаются неоднородности и происходят гетерофазные флуктуации.

В настоящей работе предложен механизм переноса в неоднородной системе, в которой возможны флуктуации образования и перемещение областей ускоренного переноса (проводящие области) в блокирующей матрице. В такой системе, даже при полном пренебрежении переносом в матрице, перенос становится возможным и ниже порога протекания.

Рассмотрим диффузию в матрице, в которой распределение проводящих областей равномерно и поддерживается постоянной их концентрация. При эволюции структуры такой системы становится возможным осуществление дополнительного переноса при перераспределении вещества в образующихся проводящих областях и при их перемещении как целых. В дальней-

шем будем пренебрегать диффузией в матрице. Такое допущение справедливо для случая, когда кинетические характеристики проводящих областей — скорость движения или время жизни — обеспечивают осуществление переноса внутри этих областей, но превосходят диффузионные характеристики в окружающей матрице.

Рассмотрим два крайних случая эволюции неоднородной системы. Проводящие области существуют постоянно в матрице, а перенос осуществляется только при блуждании и контакте содержащих вещество проводящих областей — динамическое протекание [3]. Проводящие области возникают в матрице случайно и неподвижны в течение своего времени жизни. Перенос в этом случае происходит при перекрытии участков, содержащих вещество, проводящими областями — флуктуационное протекание.

На самом деле эти два механизма проявляются одновременно, однако при определенном соотношении кинетических характеристик проводящих областей становится преобладающим один из них.

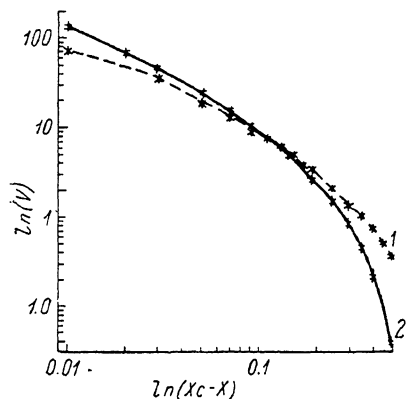
Моделирование указанных механизмов производилось на ЭВМ методом Монте-Карло. Для упрощения задачи рассматривалась двумерная дискретная решетка. Пускай каждый узел этой решетки является проводящим или блокирующим перенос. Считалось, что на одной грани решетки находится источник вещества. Моделирование проводили по двум следующим алгоритмам. В случае динамического протекания в начальный момент в решетке равномерно распределялась заданная концентрация проводящих узлов. За

единицу времени выбиралось время перемещения проводящего узла в соседний узел. Вероятность перемещения считалась равной для всех направлений. В процессе блуждания проводящие узлы, получившие вещество на поверхностном источнике, перераспределяют его между проводящими узлами, с которыми находятся в контакте. При этом образуются вторичные переносчики вещества. В случае флуктуационного протекания в каждый момент времени независимо от предыдущего состояния производится равномерное распределение в решетке проводящих узлов с заданной концентрацией. При этом распространение вещества осуществляется в рамках существующего на данный момент кластера проводящих узлов, если хотя бы один из таких узлов содержит диффузанта.

Задача заключалась в изучении продвижения диффузионного фронта. Глубиной фронта диффузии считалась максимальная глубина проникновения вещества. Изучение влияния размеров системы на результаты моделирования показало, что решетка 80×80 узлов обеспечивает нечувствительность к изменению размеров. Каждый модельный опыт проводили не менее 40 раз, что обеспечивает относительную погрешность результатов, не превышающую 10 %.

В результате моделирования установлено, что в обоих случаях продвижение диффузионного фронта происходит с постоянной скоростью. На рисунке приведена зависимость скорости протекания V от концентрации проводящих узлов X . При концентрации $X \rightarrow X_c$ (X_c — порог протекания для квадратной решетки) функция $V(X)$ неаналитична и определяется стандартной для критических явлений зависимостью $V = V_0(X_c - X)^\alpha$, где $\alpha = 0.9 \pm 0.1, 1.0 \pm 0.1$ — критические индексы для динамического и флуктуационного механизмов протекания соответственно.

При больших X преобладающим является флуктуационный, а при малых X — динамический механизм протекания. В первом случае за едини-



ду времени перенос происходит в пределах размеров проводящего кластера, а во втором — в пределах прилегающих к проводящему кластеру узлов при их блуждании. Последнее верно при низких концентрациях проводящих узлов, когда вероятность контакта с иным кластером пренебрежима. Поэтому с указанными ограничениями концентрацию X_m , разделяющую области, в которых превалирует один из механизмов, можно оценить из равенства количества узлов в кластере количеству прилегающих соседних узлов. Это условие зависит от формы кластера. Предполагая квадратную форму, такому условию будет отвечать квадрат со стороной 4 узла. В случае более сложной формы следует выбирать размер кластера > 4 . Тогда если положить, что размер кластера описывается соотношением $R_{cl} = (X_c - X)^{-\nu}$ ($\nu = 1.33$) [2], последует нижняя оценка $X_m > 0.24$.

Реально в системе в каждый момент времени средний размер кластера R_{cl} является статистически постоянным. Однако с учетом эволюции структуры в процессе переноса можно рассматривать некий эффективный размер кластера, характеризующий область проникновения диффузанта. Размер такого кластера изменяется во времени, и при $t \rightarrow \infty$ $R_{cl}^{eff} \rightarrow \infty$ даже при $X \rightarrow 0$. Учитывая линейность продвижения диффузионного фронта от времени, можно ввести $R_{cl}^{eff}(t) = R_{cl}(X, X_c) + V(X, X_c)t$ как величину, определяющую размер области, пораженной диффузантом, в зависимости от времени.

Итак, в сильно неоднородных системах, структура которых эволюционирует во времени, возможно ускорение явлений переноса при объемной доли проводящих структур ниже порога протекания.

Список литературы

- [1] Уббелодде А. Р. Расплавленное состояние вещества. М.: Металлургия. 1982. 374 с.
- [2] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука. 1979. 416 с.
- [3] Кановский И. Я., Удовичский И. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 5. С. 1405—1408.

Черновицкий
государственный университет

Поступило в Редакцию
30 ноября 1989 г.
В окончательной редакции
11 марта 1990 г.

© Физика твердого тела, том 32, № 8, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 8, 1990

ИЗМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕПЛОЕМКОСТИ [СПЛАВА (Fe, Ni)Rh ПРИ АНТИФЕРРО—ФЕРРОМАГНИТНОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПОЛЯ

Н. В. Баранов, М. Н. Хлопкин

Сплавы FeRh относят к числу объектов, в которых наличие антиферро(АФ)—ферромагнитных(Ф) переходов первого рода при изменении температуры, концентрации компонентов под действием магнитного поля или давления может быть обусловлено особенностями энергетического спектра электронов [1]. Наряду с магнитной неустойчивостью для него характерна также структурная неустойчивость, проявляющаяся в превращении упорядоченной кубической структуры типа CsCl в неупорядоченную ГЦК-структуру при пластической деформации [2]. Для объяснения природы АФ—Ф-переходов в FeRh в ранних работах использовали обменно-инверсионную модель Киттеля (см., например, [3]).