

- [7] Семин Г. К., Алымов И. М., Бурбело В. М. и др. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1978. Т. 42. № 10. С. 2095—2100.
- [8] Жмурко В. С., Половинко И. И., Свелеба С. А. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1991. Т. 55. № 3. С. 491—495.
- [9] Srolovitz D. J., Eykholt R., Barnett D. M., Hirth J. P. // Phys. Rev. V. B35. N 12. P. 6107—6122.
- [10] Konak C. // Phys. Status Solidi A. 1979. V. 54. N 7. P. 99—102.

Львовский государственный университет им. И. Франко

Поступило в Редакцию  
4 февраля 1991 г.  
В окончательной редакции  
21 мая 1991 г.

УДК 548.0 . 537.634

© Физика твердого тела, том 33, № 10, 1991  
Solid State Physics, vol. 33, N 10, 1991

## ВОЗМОЖНЫЙ МЕХАНИЗМ МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

*М. И. Молоцкий*

1. В 1987 г. Альшиц и др. [1, 2] обнаружили магнитоэластический эффект (МПЭ) — заметное возрастание пластичности кристаллов при наложении магнитного поля. Этот эффект был совершенно неожиданным, так как в полях с индукцией  $B \leq 2$  Тл, используемых в опытах [1, 2], энергия зеемановского взаимодействия электрона с полем  $E_e = g\mu_e B \leq 2.3 \cdot 10^{-4}$  эВ на два порядка меньше тепловой энергии при комнатной температуре ( $\mu_e$  — магнетон Бора,  $g$  — фактор спектроскопического расщепления). Такие поля не способны вызвать сколько-нибудь заметного сдвига и расщепления электронных состояний, изменить энергетические барьеры при движении дислокаций.

В настоящей работе сделана попытка объяснения МПЭ на основе представлений о влиянии магнитного поля на вероятность интеркомбинационных переходов (ИКП) между синглетными и триплетными состояниями радикальных пар (РП), возникающих при взаимодействии неспаренных спинов ядра дислокации с парамагнитными примесями. Отметим, что именно ИКП хорошо объясняют магнитные эффекты, наблюдаемые в радикальных химических реакциях [3].

Несмотря на интенсивные теоретические исследования магнитоспиновых эффектов в химических реакциях, проводимых в течение 20 лет, до сих пор нет последовательной теории этих явлений, учитывающей спиновую, химическую и молекулярную динамику РП. Ни один из этих элементов теоретически точно не описан. При построении теории обычно используется ряд существенных упрощений, многие из которых трудно обосновать. Единственным критерием их справедливости является способность описать наблюдаемые эффекты (см., например [4]). Поэтому при построении механизма МПЭ, который только начинают изучать, мы не можем претендовать больше чем на описание основных закономерностей явления и грубую оценку порядков величин.

2. В ядрах дислокаций различных кристаллов, в том числе в щелочных галоидах [5] и металлах [6], возможно существование ненасыщенных орбиталей с неспаренными спинами. Взаимодействие таких орбиталей с парамагнитными примесями приводит к образованию РП в синглетном ( $S$ ) или триплетном ( $T$ ) состоянии. Обычно  $S$ -состояние лежит ниже по энергии, и поэтому отрыв дислокации от примеси определяется энергией разрыва РП в  $S$ -состоянии. В магнитном поле становятся возможными ИКП между  $S$ - и  $T$ -состояниями, которые приводят к увеличению заселенностей  $T$ -состояний РП, обладающих значительно меньшими энергиями разрыва, что приводит к увеличению подвижности дислокаций. Переходы между со-

стояниями различной мультиплетности возможны лишь на стадии образования РП, когда обменное взаимодействие слабо и уровни термов практически совпадают. В этом случае  $S-T$ -переходы представляют собой резонансный процесс.

ИКП происходят в основном или за счет разности зеемановских частот электронов пары ( $\Delta g$ -механизм), или за счет сверхтонкого взаимодействия электронов с магнитными ядрами (СТВ-механизм). Рассмотрим МПЭ в рамках  $\Delta g$ -механизма. В этом случае  $S$ -состояние будет смешиваться только с состоянием  $T_0$ , имеющим нулевую проекцию суммарного спина на направление магнитного поля. Разность  $g$ -факторов спинов индуцирует  $S-T_0$ -переходы с частотой  $\omega_{ST_0} = \Delta g \mu_B B / \hbar$ .

Если в момент времени  $t=0$  система находилась в  $S$ -состоянии, то заполнение  $T_0$ -состояния имеет вид [3]

$$\rho_{ST_0}(t) = \sin^2\left(\frac{1}{2} \omega_{ST_0} t\right). \quad (1)$$

Время преодоления барьера дислокацией является случайной величиной, которая описывается распределением Пуассона

$$f_{S, T_0}(t) = \frac{1}{\tau_{S, T_0}} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{S, T_0}}\right). \quad (2)$$

Здесь  $\tau_{S, T_0}$  — среднее время пребывания РП в области сближения термов, при котором возможны резонансные переходы между ними. Вероятность пребывания РП в этой области пропорциональна ее ширине  $\Gamma$ . При  $\Gamma \ll U_{S, T_0}$

$$\tau_{S, T_0} = \frac{\Gamma}{kT} \tau_{S, T_0}^0, \quad (3)$$

$$\tau_{S, T_0}^0 = \frac{1}{\nu_0} \exp\left(\frac{U_{S, T_0}}{kT}\right) \quad (4)$$

— время ожидания отрыва дислокации от примеси,  $U_{S, T_0}$  — энергия отрыва в  $S$ - и  $T_0$ -состоянии,  $\nu_0$  — частота колебаний дислокационного сегмента. Ширина  $\Gamma = \hbar/\tau$  определяется временем сохранения неравновесной поляризации электронов в радикалах  $\tau$ . При  $\tau = 10^{-7} \div 10^{-5}$  с [7] ширина  $\Gamma = 10^{-8} \div 10^{-10}$  эВ. Поэтому при комнатной температуре период пребывания РП в области сближения термов в  $10^6 \div 10^8$  раз меньше характерного времени отрыва дислокации от примеси.

Усредняя выражение (1) по функции распределения (2), получаем среднее число  $S-T_0$ -переходов.

$$\langle \rho_{ST_0} \rangle = \int_0^{\infty} \rho_{ST_0}(t) f_S(t) dt = \frac{1}{2} \frac{\omega_{ST_0}^2 \tau_{ST_0}^2}{1 + \omega_{ST_0}^2 \tau_{ST_0}^2}. \quad (5)$$

Наряду с  $S-T_0$ -переходами происходят обратные  $T_0-S$ -переходы с той же частотой  $\omega_{ST_0}$ , но другим временем  $\tau_{T_0}$ . Поскольку энергия отрыва  $U_S$  по крайней мере на несколько десятых электрон-вольта превышает  $U_{T_0}$ , то, согласно (3)–(5),  $\tau_S \gg \tau_{T_0}$  и  $\langle \rho_{ST_0} \rangle \gg \langle \rho_{T_0S} \rangle$ . Поэтому обратными  $T_0-S$ -переходами можно пренебречь. Тогда при наложении магнитного поля средняя энергия связи дислокации с примесью уменьшается на величину

$$\langle \delta U \rangle = (U_S - U_{T_0}) \langle \rho_{ST_0} \rangle = \frac{1}{2} (U_S - U_{T_0}) \frac{B^2}{B^2 + B_0^2},$$

где  $B_0 = \hbar/\Delta g \mu_B \tau_S$  — индукция поля, при котором становятся эффективными ИКП и, следовательно, должен активно проявляться МПЭ.

3. Оценим величину  $B_0$ . В условиях опытов [1, 2] средняя скорость дислокаций мала  $v_0 \sim 10^{-4}$  см/с. При типичной концентрации неконтролируемых примесей ( $\sim 10^{15}$  см $^{-3}$ ) среднее расстояние между ними  $l \sim 10^5$  см, а характерное время движения между стопорами  $\tau_d = l/v_0 \sim 0.1$  с. Стопоры

будут определять подвижность дислокаций, если характерное время ожидания  $\tau_S^0$  будет не меньше, чем  $\tau$ . При  $\tau_S^0 \sim \tau_d \sim 0.1$  с время пребывания РП в области сближения термов  $\tau_S \sim 10^{-7} \div 10^{-9}$  с. Если для  $\Delta g$  использовать типичное значение  $\sim 10^{-3}$  [3], то  $B_0 = 0.1 \div 1.0$  Тл, что находится в интервале полей, при которых наблюдается МПЭ.

Уменьшение средней энергии активации  $\langle \delta U \rangle$  приводит к увеличению скорости термоактивированного движения дислокаций. Относительное изменение скорости увеличивается в

$$\frac{\Delta v}{v_0} = \exp\left(\frac{\langle \delta U \rangle}{kT}\right) - 1$$

раз. При

$$\langle \delta U \rangle \ll kT, \quad B \ll B_0 \quad (6)$$

$$\frac{\Delta v}{v_0} = \frac{1}{2} \frac{(U_S - U_{T_0})}{kT} \left(\frac{B}{B_0}\right)^2,$$

т. е.  $\Delta v \propto B^2$ , что согласуется с опытами [1, 2]. Однако квадратичная зависимость изменения скорости дислокаций от поля наблюдается в [1, 2] даже в тех случаях, когда условия (6) не выполняются. Мы не можем дать объяснения этому эффекту.

Согласно [1, 2], МПЭ слабо зависит от температуры. В качестве возможного объяснения можно предположить, что при наложении магнитного поля большое число РП пар переходит в триплетное состояние, в котором энергия отрыва от примеси невелика и поэтому подвижность дислокаций слабо зависит от температуры.

Таким образом, механизм МПЭ, учитывающий влияние магнитного поля на ИКП, позволяет в принципе объяснить основные закономерности эффекта. Для экспериментальной проверки рассмотренного механизма представляет интерес проведение экспериментов с контролируемым введением парамагнитных примесей, а также с обнаружением предсказываемого насыщения эффекта в сильных полях.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Альшиц В. И., Даринская Е. В., Перекалина Т. М., Урусовская А. А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 2. С. 467—471.
- [2] Альшиц В. И., Даринская Е. В., Гектина И. В., Лаврентьев Ф. Ф. // Кристаллография. 1990. Т. 35. № 4. С. 1014—1016.
- [3] Бучаченко А. Л., Сагдеев Р. З., Салихов К. М. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Новосибирск, 1978. 296 с.
- [4] Шкроб И. А., Тарасов В. Ф. // Хим. физика. 1989. Т. 8. № 4. С. 546—555.
- [5] Sharp E. J., Avery D. A. // Phys. Rev. 1967. V. 158. N 2. P. 511—514.
- [6] Молоцкий М. И. // ФММ. 1982. Т. 54. № 1. С. 28—32; 1984. Т. 58. № 3. С. 458—462.
- [7] Бучаченко А. Л. Химическая поляризация электронов и ядер. М., 1974. 246 с.

Воронежский  
государственный университет

Поступило в Редакцию  
22 февраля 1991 г.  
В окончательной редакции  
27 мая 1991 г.