

МОДЕЛЬ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПЕРВОГО РОДА БЛИЗКОГО КО ВТОРОМУ

Косова Е.Н., *Лебедев В.И.

Северо-Кавказский государственный технический университет

Ставрополь, Россия

*lvi@ncstu.ru

Микроскопические методы исследования структурных фазовых переходов (СФП), показали, что мягкая мода прекращает свое смягчение и возникает узкий центральный пик, свидетельствующий о появлении переходной области и появлении ближнего порядка, проявляющегося в кластерах. Поэтому представляется весьма актуальным аналитическое описание СФП с образованием кластеров новой структуры.

Предлагается модель $\{j^3 j^4\}$ описания структурных фазовых переходов первого рода близких ко второму роду с помощью гамильтониана связанных ангармонических осцилляторов

$$H = \sum_i \left\{ \frac{p_i^2}{2m} + V_1(R_i) \right\} + \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_2(R_i, R_j) \quad (1)$$

в поле несимметричного одночастичного двухъямного потенциала

$$V_1(R_i) = \frac{A}{2} R_i^2 - \frac{D}{3} R_i^3 + \frac{B}{4} R_i^4. \quad (2)$$

В зависимости от соотношения параметров данный потенциал может принимать симметричную форму и описывать непрерывный СФП или асимметричный и тогда, описывать СФП первого рода близких ко второму. Парный потенциал с силовыми константами определяет взаимодействие активных при СФП атомов в соседних ячейках.

Гамильтониан (1) описывает «быстрые» степени свободы, характеризующие движения частиц в фононных модах и «медленные» степени свободы, которые проявляются в кластерах. Для их описания используется формула

$$l_s \cong 0, \quad l_{ms} = \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4 \frac{AB}{D^2}} \right] \frac{D}{B},$$

где l_i – среднее равновесное положение ячейки, которое при фазовом переходе зависит от температуры и может быть вычислено как для метастабильной фазы в низкотемпературной области, так и в стабильной фазе в высокотемпературной области.

В случае, если энергия вибрационного движения атома меньше энергии одночастичного барьера, имеем низкотемпературную фазы. Атомы активные при фазовом переходе располагаются в более глубоком минимуме. В функции распределения равновесных положений атомов, имеется один острый пик,

который указывает, что атомы находятся в низкотемпературной фазе и одинаково смещены в двухянном потенциале.

При увеличении температуры становится возможным заполнение другой ямы, что означает появление кластеров другой фазы в старой фазе и тогда имеем метастабильную фазу. При дальнейшем увеличении температуры энергия атомов увеличивается, и при переходе в критической точке покидают минимум и переходят в стабильную фазу. Функция распределения равновесных положений имеет один пик с центром в нуле и это означает, что частицы в высокотемпературной фазе находятся выше горба двухянного потенциала. При переходе из низкотемпературной фазы в стабильную в критической точке происходит скачек температурной зависимости среднего равновесного положения.

Гамильтониан (1) приближенно можно представить в виде суммы двух эффективных гамильтонианов для нелинейных возбуждений типа доменных стенок H_k и фононов H_ϕ с коэффициентами перенормировки, учитывающие кинк-фононное взаимодействие. Обоснованием разделения переменных в (1) является большая разница для характерных времен фононных и кинковых возбуждений системы $H = H_0 + H_k + H_\phi$.

В модели $\{j^3 j^4\}$ параметром порядка является среднее смещение атома из своего положения в узле решетки. Поведение параметра порядка с изменением температуры имеет характерный вид для фазовых переходов первого рода близких ко второму роду.

В фононном спектре «мягкой» моды метастабильной фазы имеется сдвиг относительно спектра фононов в стабильной фазе за счёт кластеров с различной симметрией, а квадрат её частоты испытывает типичный для СФП первого рода скачек при температуре СФП.

Аналитический расчет теплоемкости дает типичную для теории Ландау и теории среднего поля картину скачков теплоемкости для разных фаз, и частично учитывает вклад флуктуаций параметра порядка вблизи температуры перехода и дает слабую I -зависимость теплоемкости.

Для описания кинковой подсистемы на основе гамильтониана (1) получено уравнение Эйлера-Лагранжа, которое дает солитоноподобное решение. Наличие отрицательных значений энергии солитонов указывает на энергетическую выгодность системе образовывать солитоны в этой области температур.

Кинковая подсистема является ответственной за сдвиг фононных частот в усредненной решетке с кластерами разной фазы и за квазиупругий центральный пик в законе рассеяния, связанный с рассеянием излучения на стенках кластеров вблизи СФП.