

Из совокупности (11) и (12) находим:

$$E\left(\frac{\pi}{2}, k\right) = v \frac{\pi}{2} \cos^2 \frac{\alpha}{2}. \quad (18)$$

Формула (10) следует из (18) при $v=1$ и, соответственно можно заключить, что при деформировании окружности на плоскости сумма длин главных полуосей образуемого эллипса не изменяется и равна диаметру окружности, как и при отображении её на плоскость с наклоном $\alpha \leq 45^\circ$.

Определение интеграла (13) и его геометрическое представление допускает интерпретируемость изменения периода колебаний математического маятника длиной ℓ с изменением угла отклонения его от вертикали на угол θ . При замене эллиптического интеграла его приближённым выражением (13) период колебаний маятника [3] равен:

$$T = \sqrt{\ell/g} \, 4F(\pi/2, k) \approx \sqrt{\ell/g} \, \frac{2\pi}{1 - \operatorname{tg}^2(\theta/4)}. \quad (19)$$

Выражение (15) совпадает с (19) и, если ассоциировать период колебаний со временем прохождения маятника по замкнутой кривой, то это движение происходит по растянутому эллипсу, полученному из окружности радиусом $R = \sqrt{\ell/g}$. Погрешность в определении периода колебаний по (19) достигает 2,3 % только при отклонении маятника от вертикали на 90° .

Можно заключить, что введённое геометрическое представление нормальных эллиптических интегралов первого и второго рода позволяет их интерпретировать и определить элементарными выражениями с оценкой допущений. Оно оказалось результативным при определении параметров эластичности продольного изгиба стержня [4].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. — М.: Наука, 1984. — С. 751–761.
2. Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции (формулы, графики, таблицы). — М.: Наука, 1968. — С. 103–108.
3. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Теоретическая физика: Т. 1. Механика. — М.: Наука, 1988. — С. 41.
4. Анфилов А.В. Стрела прогиба и сближение концов стержня в продольном изгибе // Прикладная механика и техническая физика. — 2001. — Т. 42. — № 2. — С. 188–193.

УДК 538

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ В СТРУКТУРНО НЕУСТОЙЧИВОМ КРИСТАЛЛЕ

Е.Е. Слядников

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН. г. Томск
Томский научный центр СО РАН
E-mail: opi@hq.tsc.ru

Теоретически показано, что в окрестности структурного перехода мартенситного типа внешнее воздействие уменьшает площадь горба, разделяющего минимумы двухмногого потенциала атома. Это приводит к возникновению эффекта квантового туннелирования и уменьшению асимметрии двухмногого потенциала, что открывает возможность переходов из узлов исходной решетки в узлы конечной решетки (конфигурационных смещений) и возникновения предпереходного состояния.

1. Введение

Классические континуальные модели кристаллических сред описывают далеко не все явления, происходящие в твердых телах при изменении внешнего воздействия [1, 2]. К этим явлениям в первую очередь относятся эффекты нелинейной упругости, неупругости, сдвиговой неустойчивости, предпереходные состояния, структурные превращения мартенситного типа. Причина этого в том, что в теории упругости сплошной среды [3] постулируется неизменность ближайшего окружения атома в процессе деформирования, структура решетки и силовые связи при упругой деформации не перестраиваются.

Поэтому для описания подобных явлений необходимо формулировать новые микроскопические модели кристаллов, учитывающие изменения кристаллической структуры реальных тел и возбуждение дополнительных степеней свободы атомной решетки [2, 4].

В этой работе построена микроскопическая модель кристалла, испытывающего структурный переход мартенситного типа, в которой атомная решетка рассматривается как двухуровневая квантовая система (квантовая система псевдоспинов) [4]. В рамках этой модели обосновывается, что средний одночастичный потенциальный рельеф атома имеет двухмногой характер, а сами атомы решетки структурно неустойчивого кристалла подчиняются законам квантовой механики. К выбору модельного одночастичного потенциального рельефа атома в виде двухмногого можно прийти из анализа связи сдвиговой устойчивости кристалла и ближнего порядка смещений атомов решетки.

Кристаллогеометрические характеристики твердого тела определяются состоянием электрон-атомной системы, в частности, концентрацией, локальной конфигурацией электронов, наличием эффектов ангармонизма в потенциале межатомного

взаимодействия [5, 6]. Это обстоятельство обуславливает, с одной стороны, возникновение конечных (конфигурационных) смещений атомов из узлов решетки в окрестности структурного превращения [1, 2]. С другой стороны, внешнее воздействие приводит к изменению топологии поверхности Ферми, сдвигу уровня Ферми электронов и к постепенной подготовке решетки к переходу из исходной структуры в конечную структуру. Конфигурационные смещения атомов из узлов решетки возрастают, начинают коррелировать между собой, в результате чего возникает ближний порядок смещений (статические смещения) атомов. Эти эффекты нарастают по мере увеличения внешнего воздействия и при достижении порогового значения приводят к потере устойчивости решетки в определенных кристаллографических направлениях. Неупругость кристалла в окрестности структурного превращения резко возрастает, что связано с облегчением зарождения структурных дефектов в кристаллах со сдвиговой неустойчивостью [1, 2].

2. Кристаллический потенциал в структурнонеустойчивом кристалле

Экспериментальные особенности в поведении структурнонеустойчивого кристалла и результаты теоретических исследований [1–4] позволяют предположить, что средний одночастичный потенциальный рельеф атома можно выбирать в виде суперпозиции одночастичных потенциальных рельефов исходной и конечной структуры (в виде асимметричного двухямого потенциала). Под структурнонеустойчивым кристаллом здесь и далее будем понимать кристалл, испытывающий превращение мартенситного типа (как полиморфное, так и изоморфное), вызванное изменением температуры или внешней механической силы. Например, при значении внешнего воздействия ниже критического более глубокая потенциальная яма соответствует исходной структуре, а мелкая яма соответствует конечной структуре. Состояние атома в глубокой яме будет основным, а состояние атома в мелкой яме возбужденным, поскольку совместный переход атомов в возбужденное состояние в кристалле возможен только в результате структурного перехода [1, 2], то есть когерентно. Условия появления когерентного поведения атомов решетки при изменении внешнего воздействия могут быть разными, и эта работа посвящена нахождению возможной физической причины возникновения когерентности в структурнонеустойчивом кристалле. И как следствие когерентности — определению возможного физического механизма возникновения предпереходного состояния в структурнонеустойчивом кристалле, как «суперпозиции двух структур с появлением в пространстве междоузлий новых разрешенных состояний» [1, 2].

Для определения понятия потенциального рельефа атомов рассмотрим плотность распределения атомов в кристалле

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i v_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)), \quad (1)$$

где v_i — объем i -ого атома, суммирование ведется по всем атомам кристалла, расположенным в точках $\mathbf{r}_i(t)$ в момент времени t . Энергию атомной системы, которой соответствует плотность распределения атомов $\rho(\mathbf{r}, t)$, можно представить в виде функционального ряда

$$E(t) = E_0 + \int V_1(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} + (1/2) \int V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + \dots \quad (2)$$

Здесь V_k — потенциал k -частичного взаимодействия атомов, интегрирование ведется по всему объему кристалла. По определению одночастичный потенциальный рельеф атома в момент времени t имеет вид

$$u(\mathbf{r}, t) = \delta E(t) / \delta \rho(\mathbf{r}, t). \quad (3)$$

Подставляя (1, 2) в выражение (3), получим

$$u(\mathbf{r}, t) = V_1(\mathbf{r}, t) + \int V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' + \dots, \quad (4)$$

где наличие переменной t в одночастичном потенциале учитывает зависимость внешнего поля от времени. Суммируя бесконечный ряд (4) по известным потенциалам k -частичного взаимодействия атомов V_k , в каждый момент времени t можно найти форму рельефа $u(\mathbf{r}, t)$, задающего распределение атомов $\rho(\mathbf{r}, t)$. Однако, согласно (4), вид рельефа $u(\mathbf{r}, t)$ определяется зависимостью $\rho(\mathbf{r}, t)$, и поэтому решать задачу требуется самосогласованно. Такое решение может быть достигнуто либо с использованием теории псевдопотенциала [7], либо по аналогии с методом функционала электронной плотности [8], либо методами машинного моделирования [9].

Имея в виду дальнейшее рассмотрение макроскопических свойств, везде далее следует провести процедуру усреднения по времени t , отвечающему микроскопическим флуктуациям в распределении атомов $\rho(\mathbf{r}, t)$. Следуя эргодической гипотезе [10], для проведения такого усреднения вместо одного рельефа $u(\mathbf{r}, t)$, заданного в микроскопически определенный момент времени t , введем ансамбль сглаженных по времени эффективных рельефов $\{U(\mathbf{r})\}$. Они играют роль самосогласованных полей, действующих на атом, которые определены с учетом распределений $\rho(\mathbf{r})$, получающихся при усреднении (1). Неравновесность системы выражается в медленном изменении усредненных величин $U(\mathbf{r})$, $\rho(\mathbf{r})$ со временем. Наличие ансамбля рельефов $\{U(\mathbf{r})\}$ является отражением возможности перестройки заданного микроскопического рельефа $u(\mathbf{r}, t)$ в результате внешнего воздействия и взаимодействия атомов в кристаллической системе.

Оставляя в стороне вопрос о причинах той или иной перестройки потенциального рельефа $u(\mathbf{r}, t)$, представим ее заданием ансамбля эффективных рельефов $\{U(\mathbf{r})\}$. Тогда по определению средний потенциальный рельеф будет иметь вид функционального интеграла

$$\langle U(\mathbf{r}) \rangle = \int U(\mathbf{r}) P\{U(\mathbf{r})\} DU(\mathbf{r}). \quad (5)$$

где $P\{U(\mathbf{r})\}$ – плотность вероятности конкретного потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$ из ансамбля $\{U(\mathbf{r})\}$. Разумно предположить, что в структурнонеустойчивом кристалле наиболее вероятными являются потенциальные рельефы исходной решетки $U_A(\mathbf{r})$ и конечной решетки $U_M(\mathbf{r})$. Для простоты выберем плотность вероятности $P\{U(\mathbf{r})\}$ при температуре структурного перехода в виде суммы δ -функций

$$P\{U(\mathbf{r})\} = (1/2)\delta[U(\mathbf{r}) - U_A(\mathbf{r})] + (1/2)\delta[U(\mathbf{r}) - U_M(\mathbf{r})]. \quad (6)$$

Тогда подставляя (6) в (5), получим

$$\langle U(\mathbf{r}) \rangle = (1/2)U_A(\mathbf{r}) + (1/2)U_M(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Поскольку средний одночастичный потенциальный рельеф является периодической функцией координат, то достаточно рассмотреть его в одной элементарной ячейке с центром в начале координат. Потенциальные ямы узла исходной структуры и узла конечной структуры в элементарной ячейке при превращении мартенситного типа находятся на расстоянии, много меньшем межатомного, $b \approx 10^{-9}$ см [1, 2]. В случае, когда ширина локальной ямы исходной структуры $U_A(\mathbf{r}+\mathbf{b}/2)$ с центром в точке $\mathbf{r}=-\mathbf{b}/2$ и ширина локальной ямы конечной структуры $U_M(\mathbf{r}-\mathbf{b}/2)$ с центром в точке $\mathbf{r}=\mathbf{b}/2$ много меньше расстояния между ними, для потенциала $\langle U(\mathbf{r}) \rangle$ (7), в котором находится атом, можно использовать следующее представление

$$\langle U(\mathbf{r}) \rangle = -Vd[\delta(\mathbf{r}+\mathbf{b}/2) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{b}/2)]. \quad (8)$$

Из (8) следует, что средний одночастичный потенциальный рельеф атома в структурнонеустойчивом кристалле имеет двухямный характер.

3. Атом в двухямном асимметричном потенциале

Рассмотрим кристалл, в котором происходит структурный переход, исходная структура – конечная структура при критическом значении внешнего воздействия. Для изоморфного превращения элементарная ячейка кристалла содержит только один атом, вектора конечных конфигурационных смещений атомов одинаковы, поэтому атомы кристалла образуют только одну подрешетку. В случае полиморфного превращения элементарная ячейка кристалла содержит несколько атомов, причем вектора конечных конфигурационных смещений атомов разные, поэтому кристаллическую решетку удобно разбить на несколько подрешеток с одинаковыми векторами конечных конфигурационных смещений.

Пусть значение внешнего воздействия меньше критического, то есть кристалл находится в исходной структуре. Тогда согласно результатам, полученным в предыдущем параграфе, каждый атом подрешетки будет находиться в асимметричном потенциале, который имеет два различных по глубине локальных минимума. Левая глубокая яма соответствует исходной структуре подрешетки, а правая мелкая яма конечной структуре подрешетки. Для

простоты вычислений будем считать, что минимумы исходной и конечной структур подрешетки лежат на одной оси, например x . Когда ширина локальных ям много меньше расстояния между ними для потенциала $U_a(x)$, в котором находится атом, можно использовать следующее представление

$$U_a(x) = -V_1 d \delta(x+b/2) - V_2 b \delta(x-b/2). \quad (9)$$

Здесь $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, ось x совпадает с осью, вдоль которой идет структурный переход в подрешетке, b – расстояние между левым и правым минимумом потенциала, V_1, V_2 – глубина левой, правой ямы соответственно, d – ширина левой и правой локальной ямы. Интегралы

$$\int_{-\infty}^{\infty} V_1 d \delta(x+b/2) = V_1 d, \quad \int_{-\infty}^{\infty} V_2 d \delta(x-b/2) = V_2 d$$

дают нам площадь (мощность) локальной ямы в точке $-b/2$ и $b/2$ соответственно. Мы считаем, что левая локальная яма больше правой ($V_1 > V_2$), а расстояние между локальными ямами значительно больше ширины локальной ямы ($b \gg d$). Удобно разделить асимметричный потенциал $U_a(x)$ (9) на симметричную часть $U_s(x)$, с локальными ямами одинаковой глубины, и поправку $\Delta U_a(x)$, связанную с разной глубиной (асимметрией) локальных ям

$$U_a(x) = U_s(x) + \Delta U_a(x),$$

$$U_s(x) = -V_2 d \delta(x+b/2) - V_2 d \delta(x-b/2), \quad (10)$$

$$\Delta U_a(x) = (V_2 - V_1) d \delta(x+b/2).$$

Предполагая асимметричную поправку малой ($V_1 > V_2$)/ $V_1 \ll 1$, сначала исследуем движение атома подрешетки в симметричном потенциале, а асимметрию потенциала затем учтем по теории возмущений. Хорошо известно, что движение атома в потенциальной яме $U_s(x)$ (10) подчиняется уравнению Шредингера [11]

$$[-(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2 + U_s(x)]\Psi(x) = -\varepsilon\Psi(x). \quad (11)$$

где $\Psi(x)$ – волновая функция атома, $-\varepsilon$ – собственное значение энергии атома, которое выбрано явно отрицательным ($\varepsilon > 0$) так, как ищем только локализованные в потенциальной яме решения уравнения Шредингера. Симметричный потенциал $U_s(x)$ задает два равновесных положения атома, причем при классическом движении атома его основное состояние в каждой локальной яме дважды вырождено, то есть $\varepsilon_+ = \varepsilon_-$ для четной $\Psi_+(x)$ и нечетной $\Psi_-(x)$ собственной волновой функции (рисунк). Учет квантового туннелирования атома через потенциальный барьер между левой и правой локальной ямой снимает это вырождение ($\varepsilon_+ > \varepsilon_-$) и существенно влияет на динамику такой двухуровневой системы. Чтобы найти собственные энергии $\varepsilon_+, \varepsilon_-$ и собственные функции Ψ_+, Ψ_- из уравнения (11) запишем волновые функции Ψ_+, Ψ_- в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm} &= A_{\pm} \{ \exp[\kappa_{\pm}(x-b/2)] \pm \exp[\kappa_{\pm}(x+b/2)] \}, \\ &\text{для } x < -b/2, \\ \Psi_{\pm} &= A_{\pm} \{ \exp[\kappa_{\pm}(x-b/2)] \pm \exp[-\kappa_{\pm}(x+b/2)] \}, \\ &\text{для } -b/2 < x < b/2, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\Psi_{\pm} = A_{\pm} \{ \exp[-\kappa_{\pm}(x-b/2)] \pm \exp[-\kappa_{\pm}(x+b/2)] \},$$

для $x > b/2$.

Здесь $\kappa_{\pm}^{-1}$ – характерный радиус локализации четной (+) и нечетной (–) волновой функции, $A_{\pm}$ – нормировочная константа. Волновые функции (12) должны удовлетворять граничным условиям и условиям нормировки, которые позволяют определить величины $\kappa_{\pm}$ и $A_{\pm}$:

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm}(-b/2-0) &= \Psi_{\pm}(-b/2+0), \\ \Psi_{\pm}(b/2-0) &= \Psi_{\pm}(b/2+0), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} -(\hbar^2/2m)[\partial_x \Psi_{\pm}(-b/2+0) - \\ - \partial_x \Psi_{\pm}(-b/2-0)]\Psi(x) &= -V_2 d \Psi_{\pm}(-b/2), \\ -(\hbar^2/2m)[\partial_x \Psi_{\pm}(b/2+0) - \\ - \partial_x \Psi_{\pm}(b/2-0)]\Psi(x) &= -V_2 d \Psi_{\pm}(b/2), \end{aligned} \quad (14)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_{\pm}(x)|^2 dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{+}(x) \Psi_{-}(x) dx = 0. \quad (15)$$

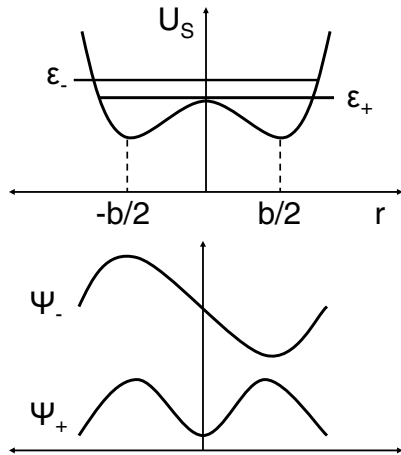


Рисунок. Основное состояние и собственные функции для симметричного двухямного потенциала

Решая уравнение Шредингера (11) совместно с (13–15), получим

$$\begin{aligned} (\hbar^2/m)\kappa_{\pm} &= V_2 d [1 \pm \exp(-\kappa_{\pm} b)], \\ (2A_{\pm}^2/\kappa_{\pm})[1 \pm (1 + \kappa_{\pm} b) \exp(-\kappa_{\pm} b)] &= 1, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\varepsilon_{\pm} = (\hbar^2/2m)\kappa_{\pm}^2. \quad (17)$$

Поправку к собственной энергии атома $\hbar\Delta$, связанную с влиянием асимметрии потенциала $\Delta U_a(x)$, вычислим в первом порядке теории возмущений по волновым функциям четного и нечетного состояний (12)

$$\begin{aligned} \hbar\Delta = \langle \Psi_- | \Delta U_a | \Psi_+ \rangle &= (V_2 - V_1) d A_+ A_- \times \\ \times [1 + \exp(-\kappa_+ b) - \exp(-\kappa_- b) - \exp(-\kappa_+ b - \kappa_- b)]. \end{aligned} \quad (18)$$

В пределе «слабого» туннелирования $\kappa_{\pm} b \gg 1$, что соответствует случаю почти классической атомной решетки, выражения (16–18) принимают вид

$$\begin{aligned} (\hbar^2/m)\kappa_{\pm} &= V_2 d [1 \pm \exp(-K_q^{-1})], \\ A_{\pm}^2 &= \kappa_{\pm}/2, \quad k_0 = V_2 d / (\hbar^2/m), \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \hbar\omega = \varepsilon_+ - \varepsilon_- &= (\hbar^2/2m)[\kappa_+^2 - \kappa_-^2] = \\ &= 2V_2 d k_0 \exp(-K_q^{-1}) \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (20)$$

$$\hbar\Delta = (V_2 - V_1) d \kappa_+ / 4, \quad (21)$$

$$K_q = (\hbar^2/m)/(V_2 d b). \quad (22)$$

Здесь $\hbar\omega$ – расщепление энергий четного и нечетного состояний атома (величина, характеризующая туннельный эффект), K_q – коэффициент квантовости двухуровневой системы, который мал, когда туннелирование мало, и стремится к единице, когда туннелирование велико. Из (19–22) видно, что в пределе $\kappa_{\pm} b \gg 1$ расщепление энергий $\hbar\omega$ стремится к нулю, туннельный эффект практически отсутствует. Следовательно, когерентная связь между четным и нечетным состоянием атома отсутствует, и мы имеем дело с классическим движением атома в левой потенциальной яме. Проведем оценку величин (19–22) для типичного переходного металла. Для значений $V_2 = 6,5 \cdot 10^{-12}$ эрг, $d = 10^{-10}$ см, $b = 10^{-8}$ см, $m = 10^{-22}$ г, $V_1 - V_2 = 1,6 \cdot 10^{-16}$ эрг, получим $K_q^{-1} = 6,4 \cdot 10^2$, $\kappa_{\pm} \approx \kappa_- = 6,4 \cdot 10^{10}$ см⁻¹, $\hbar\omega \rightarrow 0$, $\hbar\Delta = 1,6 \cdot (V_2 - V_1) = -2,6 \cdot 10^{-16}$ эрг. Это означает, что на расстоянии $b = 10^{-8}$ см площадь горба, разделяющего левый и правый минимумы двухямного потенциала, равна $V_2 b = 6,5 \cdot 10^{-20}$ эрг·см и квантовое туннелирование атома практически отсутствует, а асимметрия потенциала велика.

В пределе «среднего» туннелирования $\kappa_{\pm} b \approx 1$, что соответствует случаю «среднеквантовой» атомной решетки, выражения (16–18) принимают вид

$$K_q \kappa_{\pm} b = [1 \pm \exp(-\kappa_{\pm} b)], \quad (23)$$

$$(2A_{\pm}^2/\kappa_{\pm})[1 \pm (1 + \kappa_{\pm} b) \exp(-\kappa_{\pm} b)] = 1, \quad (24)$$

$$\hbar\omega = \varepsilon_+ - \varepsilon_- = (\hbar^2/2m)[\kappa_+^2 - \kappa_-^2], \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \hbar\Delta = (V_2 - V_1) d A_+ A_- [1 + \exp(-\kappa_+ b) - \\ - \exp(-\kappa_- b) - \exp(-\kappa_+ b - \kappa_- b)]. \end{aligned} \quad (26)$$

Из (23–26) видно, что в пределе $\kappa_{\pm} b \approx 1$ расщепление энергий отлично от нуля, а туннельный эффект велик. Следовательно, когерентная связь между четным и нечетным состоянием атома существует, и мы имеем дело с квантовым движением атома в двухямном потенциале. Проводя оценку величин (23–26) для значений $V_2 = 1,5 \cdot 10^{-13}$ эрг, $d = 10^{-10}$ см, $b = 10^{-9}$ см, $m = 10^{-22}$ г, $V_1 - V_2 = 1,6 \cdot 10^{-16}$ эрг, получим $K_q^{-1} = 1,5$, $\kappa_+ = 1,7 \cdot 10^9$ см⁻¹, $\kappa_- = 0,5 \cdot 10^9$ см⁻¹, $\hbar\omega = 3,6 \cdot 10^{-14}$ эрг, $\hbar\Delta = 0,16 \cdot (V_2 - V_1) = -1,6 \cdot 10^{-17}$ эрг. Это означает, что на расстоянии $b = 10^{-9}$ см площадь горба равна $V_2 b = 1,5 \cdot 10^{-22}$ эрг·см, квантовое туннелирование атома велико, и необходимо учитывать квантовые свойства атомов решетки, а асимметрия потенциала значительно уменьшилась.

В пределе «сильного» туннелирования $\kappa_+ b \rightarrow 1$, $\kappa_- b \ll 1$, что соответствует случаю «сильноквантовой» атомной решетки, выражения (16–18) принимают вид

$$K_q \kappa_+ b = [1 \pm \exp(-\kappa_+ b)], \quad (27)$$

$$(\hbar^2 / m) \kappa_- = V_2 d[\kappa_- b - (1/2) \kappa_-^2 b^2], \quad (28)$$

$$A_+^2 = \kappa_+ / 4, \quad A_-^2 = 1/(2\kappa_- b^2), \quad (29)$$

$$\hbar \omega = \varepsilon_+ - \varepsilon_- \cong (\hbar^2 / 2m) \kappa_+^2, \\ \hbar \Delta = (V_2 - V_1) d A_+ A_- \kappa_- b [1 + \exp(-\kappa_+ b)]. \quad (30)$$

Из (27–30) видно, что в пределе $\kappa_+ b \rightarrow 1$, $\kappa_- b \ll 1$ расщепление энергий $\hbar \omega$ четного и нечетного состояний велико, туннельный эффект велик. Следовательно, когерентная связь между четным и нечетным состоянием атома велика, и мы имеем дело с сугубо квантовым движением атома в двухямном потенциале. Отметим, что при стремлении коэффициента квантовости K_q к единице радиус локализации нечетной волновой функции $\kappa_-^{-1} = b/(2/[1 - K_q])$ стремится к бесконечности, а асимметрия двухямного потенциала $\hbar \Delta \approx k^{1/2} \rightarrow 0$. Это свидетельствует о полной делокализации атома в двухямном потенциале и о неустойчивости состояния исходной кристаллической подрешетки с асимметричным двухямным потенциалом ($\hbar \Delta < 0$) относительно перехода в состояние кристаллической подрешетки с симметричным двухямным потенциалом ($\hbar \Delta = 0$), когда $K_q \rightarrow 1$. Состояние кристаллической подрешетки с симметричным двухямным потенциалом ($\hbar \Delta = 0$) будем называть предпереходным. Проводя оценку величин (27–30) для значений $V_2 = 10^{-13}$ эрг, $d = 10^{-10}$ см, $b = 10^{-9}$ см, $m = 10^{-22}$ г, $V_1 - V_2 = 1,6 \cdot 10^{-16}$ эрг, получим $K_q^{-1} = 1$, $\kappa_+ = 1,3 \cdot 10^9$ см $^{-1}$, $\kappa_- = 0,0$ см $^{-1}$, $\hbar \omega = 2,6 \cdot 10^{-14}$ эрг, $\hbar \Delta = 0,0$ эрг. Это означает, что на расстоянии $b = 10^{-9}$ см площадь горба равна $V_2 b = 10^{-22}$ эрг·см и квантовое туннелирование атома играет главную роль в его движении, атом полностью делокализован в двухямном потенциале, а асимметрия потенциала равна нулю.

4. Обсуждение результатов

Предложенная модель позволяет заключить, что средний кристаллический потенциал в кристалле, испытывающем структурный переход мартенситного типа, имеет двухямный характер. Поэтому систему конфигурационных возбуждений в структурно неустойчивом кристалле необходимо описывать как квантовую систему псевдоспинов (квантовую двухуровневую систему). Эффект квантового поведения атомов решетки становится существенным, когда характерное расстояние между узлами исходной структуры и сопряженными узлами конечной структуры составляет менее 0,1 Å (меньше амплитуды нулевых колебаний атома), а площадь горба, разделяющего левый и правый минимумы двухямного потенциала, менее $V_2 b = 1,5 \cdot 10^{-22}$ эрг·см.

В окрестности структурного перехода исходная — конечная структура внешнее воздействие уменьшает площадь горба, разделяющего минимумы двухямного потенциала атома. Это приводит к возникновению эффекта квантового туннелирования атома и уменьшению асимметрии двухямного потенциала, что открывает возможность переходов из узлов исходной решетки в узлы конечной решетки (конфигурационных смещений) и возникновения предпереходного состояния. Под предпереходным состоянием кристалла здесь понимается такое конденсированное состояние кристалла, в котором атом решетки, вследствие эффекта квантового туннелирования, полностью делокализован в симметричном двухямном потенциале, то есть когда вероятность обнаружить атом в узле исходной и конечной структуры одинакова.

Таким образом, по мере увеличения внешнего воздействия ангармонические эффекты нарастают, а конфигурационные смещения атомов из узлов решетки увеличиваются и начинают коррелировать между собой. В результате этой корреляции происходит потеря устойчивости решетки в определенных кристаллографических направлениях, возникает ближний порядок смещений (статические смещения) атомов, протекает структурное превращение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Пушин В.Г., Кондратьев В.В., Хачин В.Н. Предпереходные явления и мартенситные превращения. — Екатеринбург: УрО РАН, 1998. — 367 с.
- Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. — Новосибирск: Наука, 1985. — 229 с.
- Ландау Л.Д. Теория упругости. — М.: Наука, 1987. — 248 с.
- Слядников Е.Е. Предпереходное состояние и структурный переход в деформированном кристалле // Физика твердого тела. — 2004. — Т. 46. — № 6. — С. 1065–1071.
- Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. — М.: Мир, 1975. — 270 с.
- Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. — М.: Наука, 1973. — 327 с.
- Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. — М.: Мир, 1973. — 557 с.
- Марч Н., Кон В. Теория неоднородного электронного газа. — М.: Мир, 1987. — 400 с.
- Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике. — М.: Мир, 1982. — 337 с.
- Резибуа П., Де Ленер М. Классическая кинетическая теория жидкостей и газов. — М.: Мир, 1980. — 423 с.
- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1989. — 521 с.