

НЕСОРАЗМЕРНАЯ ФАЗА В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ КРИСТАЛЛА С ЧАСТИЦАМИ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ

А.В. Самсонов

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
г. Барнаул, Россия

В рамках предложенной автором двумерной модели кристалла с частицами конечных размеров моделируется несоизмерная фаза, возникающая в модели под действием внешнего двухосного давления. Модель содержит два нелинейных члена, которые, в зависимости от соотношения параметров, допускают устойчивость $1q$, $2q$ или $3q$ модулированных фаз. Численно изучается переход между $1q$ и $3q$ фазами, характерный для кристаллов с гексагональной симметрией. Модель в деталях воспроизводит последовательность фазовых переходов, наблюдаемых в кварце (SiO_2) при охлаждении, и объясняет экспериментально наблюдаемое увеличение температурного интервала $1q$ фазы при одноосном внешнем давлении.

Для континуального уравнения

$$u_{tt} + F_x u_{xxxx} + 2F_{xy} u_{xxyy} + F_y u_{yyyy} + P_x u_{xx} + P_y u_{yy} + u + Hu^2 + u^3 = 0, \quad (1)$$

где $u(x, y, t)$ - неизвестная функция перемещений, F_x , F_{xy} , F_y - упругие константы анизотропной среды, P_x , P_y - компоненты внешнего давления, H - параметр нелинейной части уравнения.

Пусть векторы $a = (1, 0)$ и $b = (-1/2, \sqrt{3}/2)$ генерируют гексагональную решетку с узлами $ma + nb$, где m, n - целые числа. Обратная решетка генерируется векторами a^*, b^* .

Дискретный аналог уравнения (1), построенный на гексагональной решетке, имеет вид

$$\ddot{u}_{m,n} + (3P_x - P_y - 48F)(u_{m+1,n} + u_{m-1,n}) + 2(P_y - 24F)(u_{m+1,n+1} + u_{m,n+1} + u_{m-1,n-1} + u_{m,n-1}) + 16F(u_{m+2,n+1} + u_{m+1,n+2} + u_{m-1,n+1} + u_{m-2,n-1} + u_{m-1,n-2} + u_{m+1,n-1}) + (1 - 6P_x - 6P_y + 192F)u_{m,n} + Hu_{m,n}^2 + u_{m,n}^3 = 0, \quad (2)$$

где мы ограничились случаем изотропной среды, $F_x = F_{xy} = F_y = F$.

Гамильтониан двумерной модели, основанной на гексагональной решетке, имеет вид

$$H = \frac{1}{2} \sum_{m,n} (\dot{u}_{m,n})^2 + \frac{1}{2} (3P_x - P_y - 48F) \sum_{m,n} u_{m,n} (u_{m+1,n} + u_{m-1,n}) + (P_y - 24F) \sum_{m,n} u_{m,n} (u_{m+1,n+1} + u_{m,n+1} + u_{m-1,n-1} + u_{m,n-1}) + 8F \sum_{m,n} u_{m,n} (u_{m+2,n+1} + u_{m+1,n+2} + u_{m-1,n+1} + u_{m-2,n-1} + u_{m-1,n-2} + u_{m+1,n-1}) + \frac{1}{2} (1 - 6P_x - 6P_y + 192F) \sum_{m,n} u_{m,n}^2 + \frac{H}{3} \sum_{m,n} u_{m,n}^3 + \frac{1}{4} \sum_{m,n} u_{m,n}^4. \quad (3)$$

Возможны различные физические интерпретации модели (2), (3). Мы рассматриваем двумерный слой абсолютно жестких треугольных частиц (молекул), соединенных упругими шарнирами. Если угол между осями двух соседних молекул отличен от нуля, то в упругом шарнире возникает момент сил, стремящийся уменьшить абсолютное значение этого угла. Жесткость шарнира обозначена через F . Каждый шарнир имеет одну степень свободы - перемещение перпендикулярное плоскости (x, y) . Шарниры испытывают действие потенциала содержащего ангармонические члены третьего и четвертого порядков. Потенциал призван описать влияние остальной части кристалла на рассматриваемый слой молекул. Модель подвержена внешнему давлению с компонентами P_x , P_y , действующему вдоль плоскости (x, y) .

Гармоническая часть уравнения (2) приводит к следующему дисперсионному соотношению $\omega^2(\kappa_x, \kappa_y) =$

$$= 32F[C_x C_y (1 + 2C_x + 2C_y) + S_x S_y (1 - 2C_x - 2C_y) - C_x - C_y] + 2(3P_x - P_y - 48F)C_x + 2(2P_y - 48F)(C_x C_y - S_x S_y + C_y) + 1 - 6P_x - 6P_y + 192F, \quad (4)$$

где $C_x = \cos(2\pi\kappa_x)$, $C_y = \cos(2\pi\kappa_y)$, $S_x = \sin(2\pi\kappa_x)$, $S_y = \sin(2\pi\kappa_y)$, $\kappa = \kappa_x a^* + \kappa_y b^*$.

Мы полагаем упругую константу F и параметр H температурно зависящими. Изменение температуры и/или внешнего давления P_x , P_y приводит к движению точки в четы-

рехмерном фазовом пространстве модели и к возможности фазовых переходов.

Уравнение (2) имеет очевидное тривиальное решение $u_{m,n} = 0$ (нормальная фаза). Это решение устойчиво, если функция $\varpi^2(\kappa_x, \kappa_y)$, заданная уравнением (4), строго положительна. При изменении параметров модели, функция (4) изменяется и возможно ее обращение в нуль в некоторой точке (κ_x, κ_y) , что приводит к появлению мягкой моды

$$u_{m,n} = Q_1 \cos[2\pi(m\kappa_x + n\kappa_y) + \varphi_1] + Q_2 \cos[2\pi(m\kappa_x - n\kappa_y) + \varphi_2], \quad (5)$$

где по крайней мере один из коэффициентов Q_1, Q_2 отличен от нуля. Если точка (κ_x, κ_y)

лежит на одном из высокосимметричных направлений a^*, b^* , или $b^* - a^*$, то уравнение (5) описывает 1q модулированную фазу, в противном случае, это может быть 1q или 2q фаза (в зависимости от значения коэффициентов Q_1 и Q_2). Если структура, определяемая уравнением (5), имеет наименьшую энергию при обоих Q_1 и Q_2 отличных от нуля, то это соответствует 2q фазе, если же один из коэффициентов оказывается равным нулю, то 1q фазе. Если функция (5) обращается в нуль одновременно в нескольких точках зоны Бриллюэна, то перемещения в модулированной фазе представляются линейной суперпозицией всех мягких мод (5).