

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

**P17-88-559**

**Е.П.Каданцева, В.И.Юкалов**

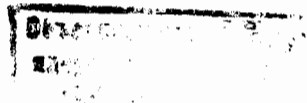
**ТЕРМОДИНАМИКА ТВЕРДЫХ ТЕЛ  
С ОБЛАСТЯМИ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ**

Направлено в "International Journal of Modern  
Physics. B"

**1988**

Существует несколько типов областей разупорядочения в твердых телах. Например, при радиационном воздействии образуются поры и макроскопические скопления различных дефектов. При механическом напряжении возникают трещины и скопления дислокаций. Все эти области разупорядочения с точки зрения статистической физики можно трактовать как зародыши некоторой разреженной фазы в более плотной<sup>/1/</sup>. В случае пор говорят о газовой фазе, в случае скопления дефектов - об аморфизированной фазе. Подробное обсуждение общих свойств и условий возникновения таких областей разупорядочения, а также обзор литературы по этим вопросам даны в<sup>/2/</sup>. В этой работе предложена простая модель, описывающая статистические характеристики твердого тела со случайно распределенными областями разупорядочения. В частности, было выяснено, что если эффективное взаимодействие между частицами системы соответствует притяжению, то двухфазная система неустойчива. Это означает наличие в твердом теле тенденции к залечиванию пор. Однако известно, что некоторые твердые тела с областями разупорядочения могут стабилизироваться и сохранять свою гетерогенную структуру десятки лет. Следовательно, должны существовать по крайней мере метастабильные двухфазные системы, обладающие термической и механической устойчивостью. С точки зрения термодинамики, как отмечали Уайдом и Роулинсон<sup>/3/</sup>, сосуществование двух фаз с разными плотностями возможно при любых температурах. Кроме того, имеются примеры других устойчивых гетерофазных систем, таких, как смеси ферро- и парамагнитных фаз<sup>/4/</sup> или кристаллической и жидкостной фаз<sup>/5/</sup>. Возникает вопрос, может ли модель работы<sup>/2/</sup> описывать и такие твердые тела с областями разупорядочения, которые были бы устойчивы относительно термических и механических возмущений?

Ответ на этот вопрос предлагается в настоящей статье, где показывается, что если взаимодействие между частицами имеет характер отталкивания, то твердое тело с областями разупорядочения действительно стабилизируется в интервале температур от нуля до температуры распада, при которой вся система переходит в фазовое состояние с меньшей плотностью. Для подтверждения сказанного проводится подробный анализ основных термодинамических функций.



После усреднения по распределению гетерофазных областей<sup>/5/</sup> ренормированный гамильтониан твердого тела с областями разупорядочения имеет вид<sup>/2/</sup>

$$H = H_1 + H_2,$$

$$H_\alpha = \frac{1}{2} L w_\alpha \left( \frac{1}{4} w_\alpha \phi - \mu \right) + \frac{1}{2} w_\alpha \left( \frac{1}{2} w_\alpha \phi - \mu \right) \sum_{i=1}^L \sigma_{i\alpha} + \frac{1}{8} w_\alpha^2 \sum_{ij}^L \phi_{ij} \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\alpha}, \quad /1/$$

где  $L$  - число узлов кристаллической решетки,  $\mu$  - химический потенциал,  $\sigma_{i\alpha} = \pm 1$ , эффективное взаимодействие носит отталкивательный характер,

$$\phi \equiv \frac{1}{L} \sum_{ij}^L \phi_{ij} > 0, \quad /2/$$

$w_\alpha$  обозначает вероятность фазы  $\alpha$ , далее используются обозначения

$$w_1 \equiv w, \quad w_2 = 1 - w, \quad /3/$$

причем  $w_1$  соответствует твердой, более плотной фазе,  $w_2$  - разупорядоченной, менее плотной фазе, значение  $w$  задается минимизацией термодинамического потенциала<sup>/5/</sup>. Согласно определению плотность твердой фазы

$$a = \frac{1}{2} (1 + \langle \sigma_{11} \rangle) \quad /4/$$

больше плотности разупорядоченной фазы

$$b = \frac{1}{2} (1 + \langle \sigma_{12} \rangle), \quad /5/$$

то есть условие

$$a > b \quad /6/$$

является критерием различия фаз. В дальнейшем удобно использовать безразмерные температуру, химический потенциал, большой потенциал и плотность:

$$T \equiv \frac{\Theta}{\phi}, \quad \mu_* \equiv \frac{\mu}{\phi}, \quad \omega_w \equiv \frac{\Omega}{L\phi}, \quad n \equiv \frac{N}{L}. \quad /7/$$

Для большого потенциала в приближении среднего поля имеем

$$\omega_w = 2a(1-a)w^2 + 2b(1-b)(1-w)^2 - T \ln \operatorname{ch} \frac{aw^2 - \mu_* w}{2T} - T \ln \operatorname{ch} \frac{b(1-w)^2 - \mu_*(1-w)}{2T}. \quad /8/$$

Химический потенциал, как функция температур и плотности, находится из нормировки

$$n = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} w_{\alpha} (1 + \langle \sigma_{i\alpha} \rangle) = w_1 a + w_2 b. \quad /9/$$

Минимизация /8/ по плотностям фаз дает

$$2a = 1 - \operatorname{th} \left\{ \frac{(n-b)b[2ab - n(a+b)]}{2T(a-b)^3} \right\}, \quad /10/$$

$$2b = 1 - \operatorname{th} \left\{ \frac{(n-a)a[2ab - n(a+b)]}{2T(b-a)^3} \right\},$$

а минимизация по вероятности твердой фазы приводит к равенству

$$w = \frac{n-b}{a-b}. \quad /11/$$

Из уравнения /9/ следует выражение для химического потенциала

$$\mu_* = \frac{a^2(n-b) + b^2(n-a)}{(a-b)^2}. \quad /12/$$

Уравнение состояния в безразмерных единицах принимает вид

$$P = \frac{1}{2} [a^2 w^2 + b^2 (1-w)^2] - T \ln [(1-a)(1-b)]. \quad /13/$$

Для выяснения устойчивости системы необходимо вычислить теплоемкость

$$C_V = T \left[ \left( \frac{\partial a}{\partial T} \right)_n \ln \frac{1-a}{a} + \left( \frac{\partial b}{\partial T} \right)_n \ln \frac{1-b}{b} \right] \quad /14/$$

и коэффициент сжимаемости

$$\kappa_T = \frac{(a-b)^2}{n^2} \left\{ a^2 + b^2 + \left( \frac{\partial a}{\partial n} \right)_T [b^2(1-2w) - 2abw] + \left( \frac{\partial b}{\partial n} \right)_T [a^2(2w-1) - 2ab(1-w)] \right\}^{-1}. \quad /15/$$

Система устойчива термически, если теплоемкость положительна и устойчива механически, если положителен коэффициент сжимаемости,

$$C_V > 0, \quad \kappa_T > 0. \quad /16/$$

Кроме того, должно выполняться очевидное условие

$$0 < w_\alpha < 1, \quad (\alpha = 1, 2), \quad /17/$$

из которого следует

$$a > n, \quad b < n. \quad /18/$$

Если условие /17/ несправедливо, то разделение системы на области с разными фазами теряет смысл, т.е. система гетерофазно неустойчива. В том случае, когда гетерофазная система с термодинамической точки зрения более выгодна по сравнению с чистой, большой потенциал /8/ должен быть меньше соответствующего потенциала чистой твердотельной фазы:

$$\omega_1 = 2a(1-a) - T \ln ch \frac{a - \mu_*}{2T} - T \ln 2 - \frac{1}{2} \mu_*. \quad /19/$$

При нулевой температуре единственное решение уравнений /10/, удовлетворяющее условиям устойчивости /16/, /18/, определяется системой уравнений

$$2ab - n(a+b) = 0,$$

$$a(n-a) \ln \frac{1-a}{a} + b(n-b) \ln \frac{1-b}{b} = 0, \quad (T=0)$$

при следующем ограничении на среднюю плотность:

$$0 < n < 0,323. \quad /20/$$

Поведение системы при конечных температурах исследовалось численно. Из всех решений выбирались только те, для которых выполняются все условия устойчивости. Плотности фаз как функции температуры при различных средних плотностях изображены на рис.1. Вероятность твердой фазы при двух значениях плотностей в зависимости от температуры показана на рис.2. На других рисунках изображены следующие термодинамические характеристики как функции температуры: химический потенциал /12/ - на рис.3, давление /1/ - на рис.4, теплоемкость /14/ - на рис.5, коэффициент сжимаемости /15/ - на рис.6, термодинамические потенциалы /8/ и /19/ - на рис.7. Кривые на всех рисунках заканчиваются в тех точках, где гетерофазная система теряет устойчивость и переходит в чистое состояние, соответствующее разупорядоченной фазе.

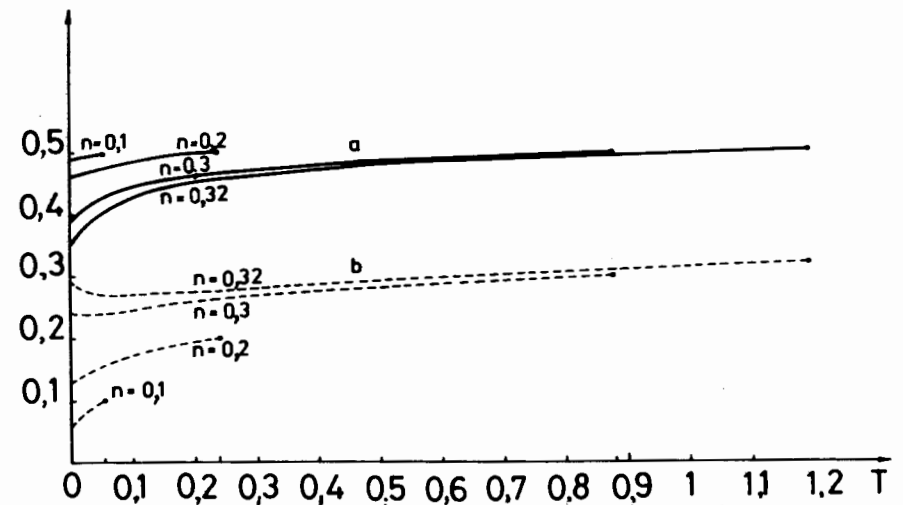


Рис.1. Плотности твердой фазы /сплошные линии/ и разупорядоченной фазы /пунктирные линии/ при разных средних плотностях в зависимости от температуры. Решения задаются уравнениями /10/. Кривые заканчиваются в точках, где система теряет устойчивость.

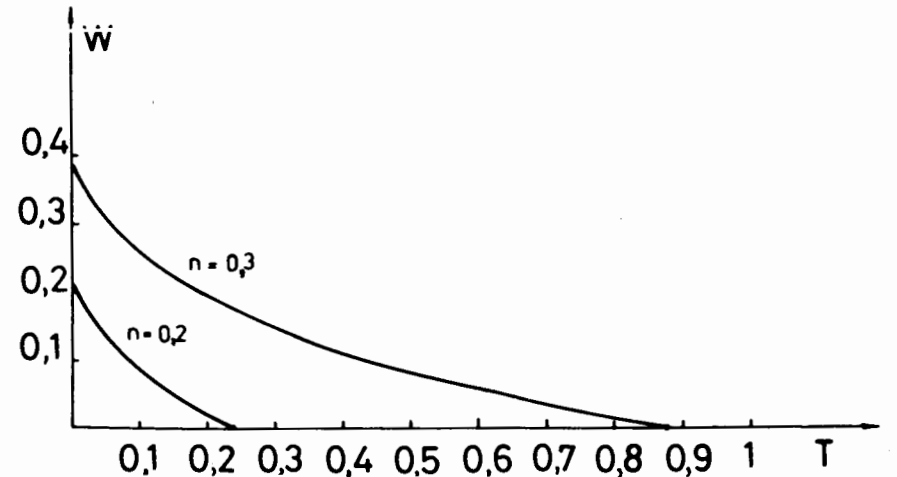


Рис.2. Вероятность твердой фазы /11/ как функция температуры.

Проведенный анализ показывает, что имеется интервал температур, в котором сосуществуют две фазы с разными плотностями.

Более плотную фазу можно интерпретировать как твердотельную, менее плотную - как некоторую разупорядоченную фазу /газовую или сильноаморфизированную/. Рассмотренная система оказывается устойчивой и термически, и механически. При повышении температуры от нуля первой возникает гетерофазная неустойчивость,

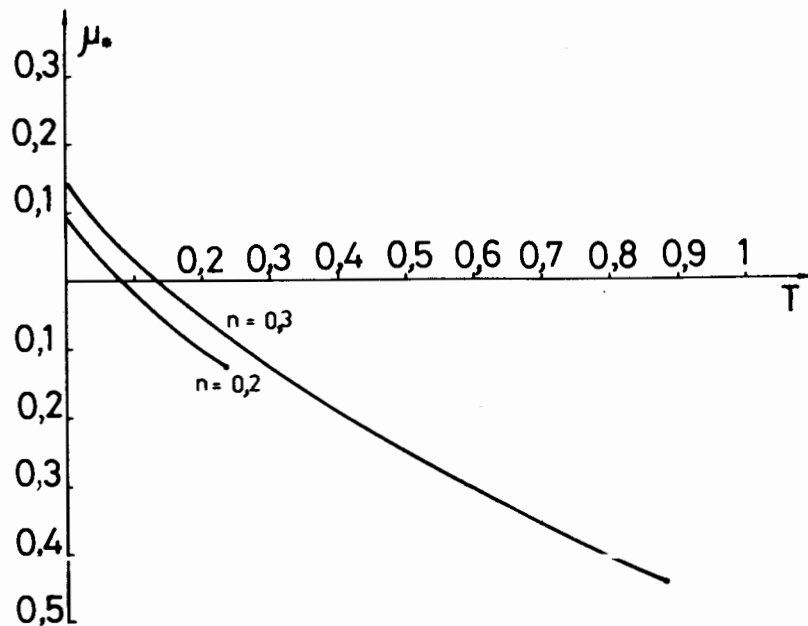


Рис.3. Химический потенциал /12/ как функция температуры.

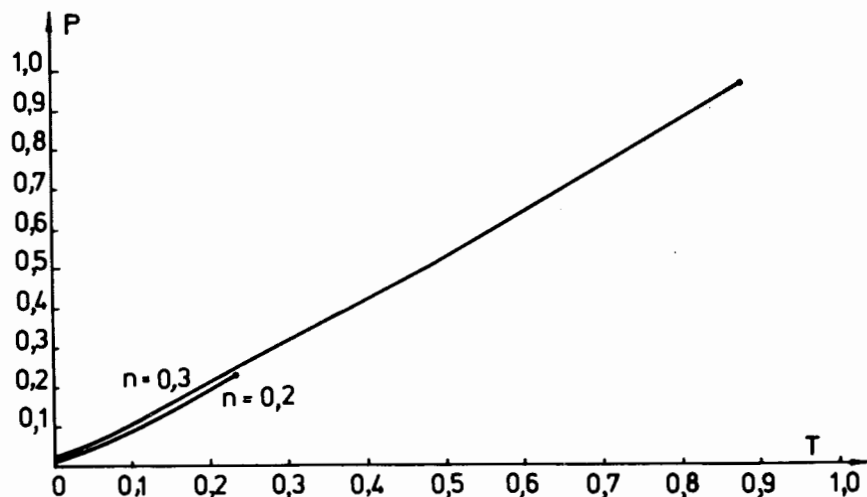


Рис.4. Давление /13/ как функция температуры.

когда перестает выполняться условие /17/. Тогда система переходит в чистую разупорядоченную фазу.

В силу своей простоты исследованная модель обладает достаточной общностью и дает качественную картину поведения различных смешанных систем, состоящих из фаз с существенно отличающимися плотностями. Предложенный метод, можно, по-видимому, распространить и на стационарные системы, в которых появляются состояния с пространственно неоднородной плотностью тока /8-8/. Такие неоднородные токовые распределения возникают в полупроводниках с отрицательной дифференциальной проводимостью /9-10/

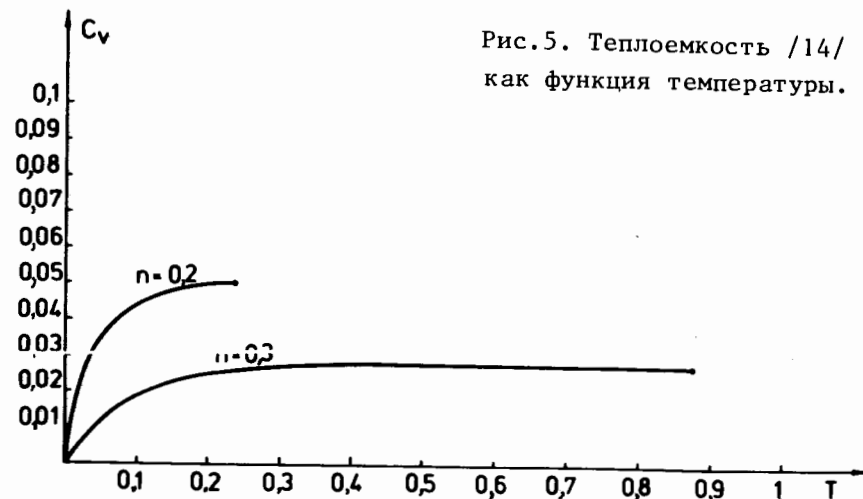


Рис.5. Теплоемкость /14/ как функция температуры.

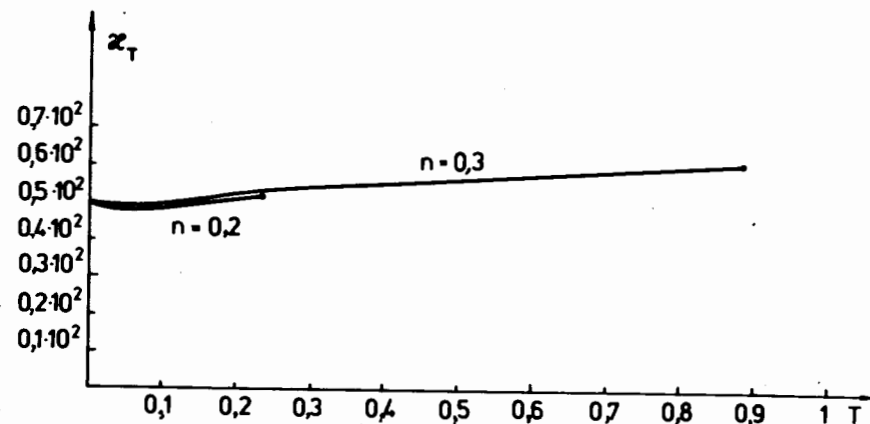


Рис.6. Коэффициент сжимаемости /15/ как функция температуры.

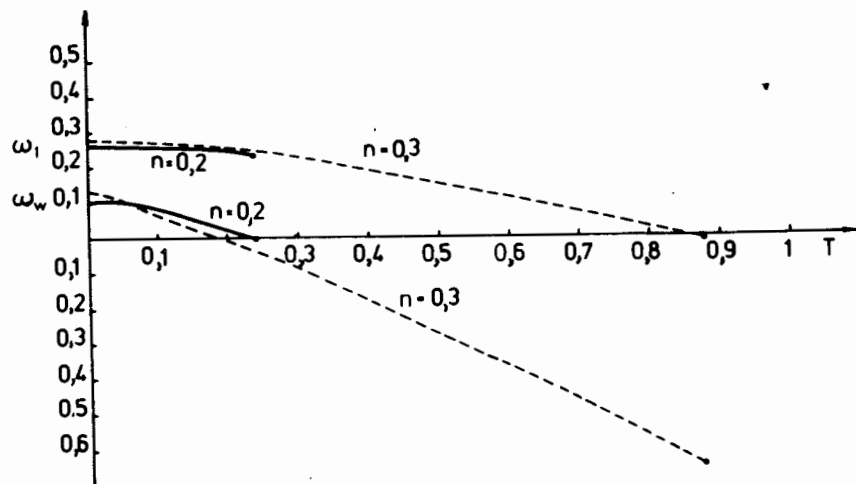


Рис.7. Термодинамические потенциалы гетерофазной системы /8/ и чистой твердотельной системы /19/ в зависимости от температуры при двух значениях средних плотностей. Сплошные линии для  $n = 0,2$ , пунктирные для  $n = 0,3$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Curran D., Seaman L., Shockey D. - Phys.Rep., 1987, 147, p.253.
2. Юкалов В.И. ОИЯИ, P17-88-304, Дубна, 1988.
3. Widom B., Rowlinson J. - J.Chem.Phys., 1970, 52, p.1670.
4. Shumovsky A.S., Yukalov V.I. - Physica, 1982, 110A, p.518.
5. Yukalov V.I. - Phys.Rev., 1985, B32, p.436.
6. Волков А.Ф., Коган Ш.М. - ЖЭТФ, 1967, 52, с.1647.
7. Киквидзе Р.Р., Рухадзе А.А., Фетисов Е.П. - ФТТ, 1967, 9, с.1349.
8. Oliver M.R., McWhorter A.L., Foyt A.G. - Appl.Phys.Lett., 1967, 11, p.111.
9. Волков А.Ф., Коган Ш.М. - УФН, 1968, 96, с.633.
10. Владимиров В.В., Волков А.Ф., Мейлихов Е.З. - Плазма полупроводников. М.: Атомиздат, 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел  
25 июля 1988 года.

Каданцева Е.П., Юкалов В.И.  
Термодинамика твердых тел с областями  
разупорядочения

P17-88-559

Рассмотрена модель твердого тела со случайно распределенными областями разупорядочения, например порами или трещинами. Показано, что в случае эффективного отталкивания между частицами такая система устойчива и термически, и механически. Проведено детальное численное исследование основных термодинамических величин как функций температуры при различных плотностях.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

#### Перевод авторов

Kadantseva E.P., Yukalov V.I.  
Thermodynamics of Solids with Regions  
of Disorder

P17-88-559

A model of a solid with randomly distributed regions of disorder is considered. In particular cases these regions of disorder can be pores or cracks. It is shown that in the case of an effective repulsion between particles the system is stable thermally as well as mechanically. A detailed numerical investigation of main thermodynamical quantities as functions of temperature at several densities is presented.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988