

Динамика краудиона в трехмерном неоднородно деформированном кристалле

В. Д. Нацик

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины
Украина, 61164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: natsik@ilt.kharkov.ua*

Е. И. Назаренко

*Харьковский государственный университет, Украина, 61047, г. Харьков, пл. Свободы, 4
E-mail: nazarenko@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 8 сентября 1999 г.

Задача о движении краудиона сформулирована и проанализирована как динамическая проблема трехмерной кристаллической решетки, образованной атомами нескольких сортов, взаимодействующих между собой посредством парных короткодействующих потенциалов. Сформулированы требования к микроскопическим параметрам кристаллической структуры, позволяющие выделить краудионные возбуждения плотноупакованных атомных рядов на фоне малых динамических деформаций кристалла в целом. В рамках формализма Лагранжа выведено уравнение движения краудиона в произвольном поле упругих деформаций кристалла. Получены соотношения, связывающие эффективную массу и энергию покоя краудиона с геометрическими и силовыми параметрами кристаллической решетки.

Задачу про рух краудіона сформульовано і проаналізовано як динамічну проблему тривимірної кристалічної ґратки, утвореної атомами кількох сортів, котрі взаємодіють між собою через парні короткодійчі потенціали. Сформульовано вимоги до мікроскопічних параметрів кристалічної структури, які дозволяють відокремити краудіонні збудження щільнопакованих атомних рядів на фоні малих динамічних деформацій кристалу в цілому. В межах формалізму Лагранжа виведено рівняння руху краудіона в довільному полі пружних деформацій кристалу. Одержано співвідношення, котрі пов'язують ефективну масу та енергію спокою краудіона з геометричними і силовими параметрами кристалічної ґратки.

PACS: 61.70.Ey, 63.20.Ry, 66.30.Lw, **61.80.-x**

Введение

Во многих достаточно сложных кристаллических структурах присутствуют плотноупакованные ряды атомов, относительно слабо связанные со своим окружением. Собственный междоузельный атом в таком ряду образует специфическую конфигурацию — размытое сгущение, получившее название краудион, а вакансия также локализуется, образуя размытое разрежение, которое можно назвать антикраудионом. Такие дефекты сравнительно легко перемещаются вдоль плотноупакованных рядов, движение краудионов имеет существенно кооперативный характер и кардинально отличается от диффузионных перемещений локализованных междоузельных атомов или вакансий.

Краудионы могут играть значительную роль в динамике и кинетике радиационных дефектов, в процессах диффузии и в некоторых других явлениях неупругой деформации кристаллов [1–7]. В физике кристаллов важное значение имеет и широко обсуждается физически весьма содержательная аналогия между краудионом и элементарным носителем пластичности — дислокацией [3,8,9]. Кроме того, смещения атомов плотноупакованного ряда при движении краудионов представляют собой один из примеров солитона (нелинейной уединенной волны), поэтому математическое описание динамики краудиона имеет непосредственное отношение к проблемам современной нелинейной механики и ее приложений [8–11].

Для качественного описания основных свойств краудиона в физике кристаллов широко исполь-

зуется модель одномерного кристалла Френкеля—Конторовой — цепочка сильно взаимодействующих между собой атомов, совершающая одномерное движение в относительно слабом статическом периодическом потенциале [12]. Различные аспекты нелинейной динамики, связанные с моделью Френкеля—Конторовой, обсуждены в обзоре [13]. При сопоставлении этой модели с реальным кристаллом предполагается, что подвижная цепочка соответствует плотноупакованному ряду атомов, а периодический потенциал моделирует взаимодействие этого ряда с остальными атомами кристалла, которые считаются неподвижными. Анализ свойств краудиона как уединенной волны смещений в трехмерном кристалле посвящена серия работ Косевича и Ковалева с сотр. [14–17]. Ими предложена и проанализирована модель плотноупакованного атомного ряда, погруженного в упругий сильно анизотропный континуум. Одним из основных результатов этих работ является вывод о существенной делокализации поля деформаций краудиона в трехмерной упругой среде по сравнению с экспоненциально локализованными деформациями, которые создает солитон в одномерном кристалле Френкеля—Конторовой. Второй интересный результат этих работ — описание акустической эмиссии от движущегося краудиона в объеме кристалла [14,15].

Однако при обсуждении вопроса о соответствии свойств краудиона в трехмерном деформируемом кристалле свойствам солитона (дислокации) в модели Френкеля—Конторовой возникают определенные сложности [14,15]. Остается невыясненной в полном объеме возможность отделения краудионного возбуждения от других возбуждений кристалла: свободных гармонических колебаний (фононов) или вынужденных деформаций кристаллической решетки.

Специального обсуждения и анализа заслуживает проблема вывода уравнения движения краудиона и описания взаимодействия краудиона с динамическими и статическими деформациями, создаваемыми другими дефектами или возбуждениями кристалла, а также внешними силами. Солитон в кристалле Френкеля—Конторовой ведет себя как частица с эффективными значениями собственной энергии и массы, а перемещение его центра в поле сил, действующих на подвижную цепочку атомов, определяется уравнением, аналогичным одномерному уравнению движения классической механики [9,13,18]. Однако строгий вывод уравнения движения краудиона в трехмерном деформированном кристалле, подобный выполненному Косевичем [19] выводу уравнения

движения дислокации, в настоящее время отсутствует.

В данной работе задача о движении краудиона сформулирована и проанализирована как динамическая проблема трехмерной кристаллической решетки. Рассмотрен достаточно общий случай кристаллической структуры, образованной атомами нескольких сортов, взаимодействующих между собой посредством короткодействующих парных потенциалов. Сформулированы требования к кристаллогеометрическим параметрам и параметрам межатомного взаимодействия, позволяющие выделить краудионные возбуждения плотноупакованных атомных рядов на фоне малых динамических деформаций кристалла в целом. Получены соотношения, связывающие собственную энергию и эффективную массу краудиона с микроскопическими параметрами кристалла. Выведено уравнение движения центра краудиона в произвольном поле упругих деформаций кристалла.

1. Формулировка изучаемой модели, динамические переменные и функция Лагранжа

Рассмотрим сложную многоатомную кристаллическую решетку, в которой можно выделить плотноупакованный ряд одинаковых атомов. Пронумеруем химически различные атомы индексом α и будем считать для определенности, что атомы выделенного ряда имеют номер $\alpha = 1$. Пространственную ориентацию выделенного атомного ряда и период трансляций внутри него зададим вектором \mathbf{b}^* , а вектор трансляций кристалла в этом направлении обозначим \mathbf{b} ; в сложных кристаллических структурах эти векторы могут отличаться по величине. Равновесные положения атомов в идеальной кристаллической структуре зададим набором векторов \mathbf{R} и разделим его на совокупности векторов двух типов: $\mathbf{R} = \{\mathbf{p}, \mathbf{R}^{(\alpha)}\}$, где \mathbf{p} и $\mathbf{R}^{(\alpha)}$ — соответственно равновесные положения атомов выделенного ряда и окружающей его кристаллической матрицы. Начало координат для отсчета векторов \mathbf{p} и $\mathbf{R}^{(\alpha)}$ удобно выбрать на одном из атомов выделенного ряда, имеющем максимальную энергию связи с решеткой (рис. 1).

Будем считать, что межатомное взаимодействие в кристалле описывается набором короткодействующих парных потенциалов $U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ (\mathbf{r} и \mathbf{r}' — координаты двух произвольных атомов) и каждый отдельный атом с координатой \mathbf{r} может также испытывать действие изменяющихся во

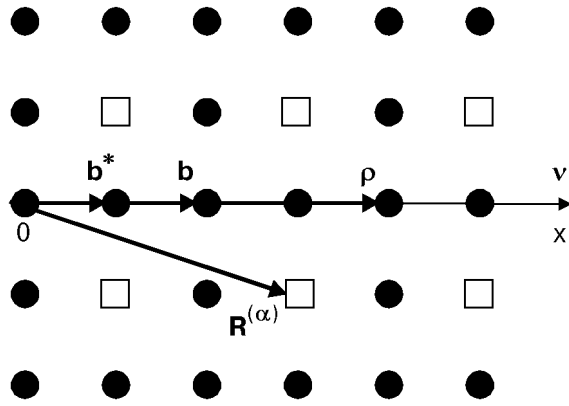


Рис. 1. Фрагмент кристаллической структуры с плотноупакованным рядом атомов (двухмерная схема): \mathbf{b}^* и \mathbf{b} — соответственно элементарные векторы трансляций внутри и вдоль выделенного ряда; ρ и $\mathbf{R}^{(\alpha)}$ — соответственно равновесные положения атомов выделенного ряда и окружающей его кристаллической матрицы; 0 — начало координат.

времени внешних сил, которым соответствуют потенциалы $U_{\alpha}^{(e)}(\mathbf{r}, t)$.

Отметим, что все основные результаты, полученные при анализе описанной выше модели, переносятся без существенных ограничений на случаи упорядоченных рядов примесных атомов внутри кристалла или рядов адсорбированных атомов на поверхности кристалла, а также на случай двумерных кристаллов или квазиодномерных структур типа двойных полимерных цепей. В случае молекулярных структур следует, разумеется, в качестве «атомов» рассматривать молекулы или относительно «жесткие» мономеры молекулярных цепей, внутренними степенями свободы которых можно пренебречь.

Смещения атомов $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{R}, t)$ от равновесных положений в идеальном кристалле представим в виде

$$\boldsymbol{\eta}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{R}, t) + \frac{bz(\rho, t)}{b^*} [\mathbf{b}^* + \mathbf{u}(\rho, t) - \mathbf{u}(\rho - \mathbf{b}^*, t)] \delta_{\mathbf{R}\rho} \quad (1)$$

Здесь δ_{ik} — символ Кронекера; $\mathbf{u}(\mathbf{R}, t)$ — произвольные малые смещения, удовлетворяющие условию $|\mathbf{u}(\mathbf{R}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{R}', t)| \ll |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|$; z — дополнительные безразмерные смещения, описывающие распространение вдоль выделенного ряда атомов $\mathbf{R} = \rho$ краудионного возбуждения. Существенно, что описываемые вторым слагаемым в (1) краудионные смещения в любой момент времени направлены вдоль вектора $\mathbf{b}^* + \mathbf{u}(\rho, t) - \mathbf{u}(\rho - \mathbf{b}^*, t)$, т.е. по касательной к мгновенной конфигурации оси выделенного атомного ряда,

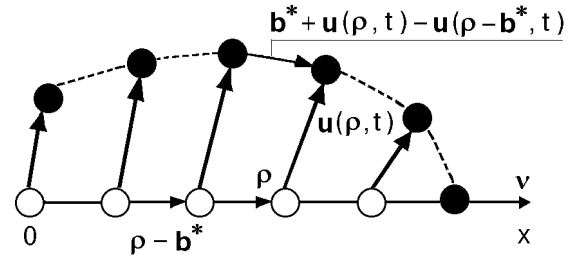


Рис. 2. Изгиб плотноупакованного ряда атомов в результате упругих деформаций кристалла: \circ — равновесные положения атомов в недеформированном кристалле; \bullet — мгновенные положения атомов в деформированном кристалле; $\mathbf{b}^* + \mathbf{u}(\rho, t) - \mathbf{u}(\rho - \mathbf{b}^*, t)$ — вектор, задающий направление краудионного смещения на узле ρ .

изогнутой упругими смещениями $\mathbf{u}(\mathbf{R}, t)$ по отношению к ее конфигурации $0x$ в идеальном кристалле (рис. 2). Зарождение и перемещение краудиона сопровождается изменениями безразмерного смещения z на величину $|z| \leq 1$.

Задаваемая соотношением (1) структура смещений, по нашему мнению, наилучшим образом отражает физический смысл краудиона и обеспечивает корректное разделение нелинейных краудионных возбуждений и линейных собственных или вынужденных деформаций кристалла.

Обозначим массы атомов символом m_{α} и будем вначале рассматривать в качестве динамических переменных кристалла полные смещения $\boldsymbol{\eta}(\mathbf{R}, t)$ и скорости $\dot{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{R}, t) \equiv \partial \boldsymbol{\eta}(\mathbf{R}, t) / \partial t$. Используя введенные выше потенциалы межатомного взаимодействия $U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ и потенциалы внешних полей $U_{\alpha}^{(e)}(\mathbf{r}, t)$, а также учитывая особую роль выделенного ряда атомов, запишем общее выражение для функции Лагранжа рассматриваемой задачи в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \mathbf{R}^{(\alpha)}} m_{\alpha} [\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{R}^{(\alpha)}, t)]^2 + \frac{1}{2} \sum_{\rho} m_1 [\dot{\boldsymbol{\eta}}(\rho, t)]^2 - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \mathbf{R}^{(\alpha)}} \sum_{\alpha', \mathbf{R}'^{(\alpha')}} U_{\alpha\alpha'} [\mathbf{R}^{(\alpha)} - \mathbf{R}'^{(\alpha')} + \mathbf{u}(\mathbf{R}^{(\alpha)}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{R}'^{(\alpha')}, t)] - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\rho} \sum_{\rho'} U_{11} [\rho - \rho' + \boldsymbol{\eta}(\rho, t) - \boldsymbol{\eta}(\rho', t)] - \\ & - \sum_{\rho} \sum_{\alpha, \mathbf{R}^{(\alpha)}} U_{1\alpha} [\rho - \mathbf{R}^{(\alpha)} + \boldsymbol{\eta}(\rho, t) - \mathbf{u}(\mathbf{R}^{(\alpha)}, t)] - \\ & - \sum_{\alpha, \mathbf{R}^{(\alpha)}} U_{\alpha}^{(e)} [\mathbf{R}^{(\alpha)} + \mathbf{u}(\mathbf{R}^{(\alpha)}, t)] - \sum_{\rho} U_1^{(e)} [\rho + \boldsymbol{\eta}(\rho, t)] \quad (2) \end{aligned}$$

Удобство такой формы записи функции Лагранжа заключается в том, что в ней разделены кинетическая и потенциальная энергии матрицы (первое и третье слагаемые), выделенного атомного ряда (второе и четвертое слагаемые) и энергия взаимодействия атомного ряда с матрицей (пятое слагаемое). В выражении (2) сравнительно просто произвести адекватные изучаемой задаче упрощения, без которых невозможен дальнейший анализ.

2. Упрощение функции Лагранжа

Прежде всего обсудим главное приближение теории краудионов, без использования которого вообще невозможно корректно ввести понятие краудионного возбуждения, — качественное предположение о большой величине энергии взаимодействия атомов внутри выделенного ряда (четвертое слагаемое в (2)) по сравнению с энергией взаимодействия этого ряда с кристаллической матрицей (пятое слагаемое в (2)). В рамках нашей модели это предположение позволяет считать, что наряду с малостью упругих деформаций кристалла достаточно малыми являются также и краудионные деформации, т.е. одновременно выполняются два неравенства:

$$\begin{aligned} |\mathbf{u}(\mathbf{R}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{R}', t)| &\ll |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|, \\ b^*|z(\boldsymbol{\rho}, t) - z(\boldsymbol{\rho}', t)| &\ll |\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'|. \end{aligned} \quad (3)$$

Количественный критерий, уточняющий условия выполнения второго из неравенств (3), будет записан ниже (см. (20)). Отметим также, что выполнение неравенств (3) сопряжено с требованием малости и достаточно плавных пространственно-временных зависимостей потенциалов внешних сил (последние два слагаемых в (2)).

Неравенства (3), как известно, позволяют при описании динамических процессов или статических деформаций в кристалле переходить от дискретного (решеточного) к континуальному приближению, заменяя конечные разности смещений производными:

$$\begin{aligned} u_i(\mathbf{R}, t) - u_i(\mathbf{R}', t) &\approx (R_k - R'_k) u_{ik}(\mathbf{R}, t), \\ u_{ik}(\mathbf{R}, t) &= \frac{\partial u_i(\mathbf{R}, t)}{\partial R_k}; \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} z(\boldsymbol{\rho}, t) - z(\boldsymbol{\rho}', t) &\approx (\rho_i - \rho'_i) v_i z'(\boldsymbol{\rho}, t), \\ z' &\equiv \frac{\partial}{\partial x} z, \quad \boldsymbol{\rho} = \mathbf{v}x. \end{aligned}$$

Здесь $u_{ik}(\mathbf{R}, t)$ — тензор упругих дисторсий кристалла, b^*z' — локальная краудионная деформация выделенного атомного ряда, \mathbf{v} — единичный направляющий вектор этого ряда; по повторяющимся координатным индексам подразумевается суммирование. Отметим, что использование соотношений (4) означает пренебрежение пространственными производными более высоких порядков от смещений \mathbf{u} и z , т.е. пренебрежение в уравнениях движения кристаллической решетки эффектами пространственной дисперсии. Очевидно, что неравенства (3) эквивалентны неравенствам

$$|u_{ik}| \ll 1, \quad b^*|z'| \ll 1. \quad (5)$$

Сформулированные выше требования к внешним силам позволяют наряду с малостью пространственных производных от смещений считать малыми также и производные по времени, что эквивалентно пренебрежению в рассматриваемых динамических процессах эффектами запаздывания звуковых волн:

$$|\dot{\mathbf{u}}| \ll c, \quad b^*|\dot{z}'| \ll c, \quad (6)$$

где c — характерная скорость звука.

Короткодействующий характер межатомных потенциалов и малость деформаций позволяют представить функцию Лагранжа (2) в виде разложения в ряд Тейлора по производным u_{ik} , z' , \dot{u}_i , \dot{z} или соответствующим им конечным разностям. Основное приближение динамической теории кристаллов соответствует, как известно, учету квадратичных членов при таком разложении. Эта точность является приемлемой и при решении интересующей нас задачи, однако, выполняя разложение, следует учитывать, что при наличии краудионного возбуждения разность смещений атомов выделенного ряда и окружающей его кристаллической матрицы содержит слагаемое bz , которое нельзя считать малой величиной:

$$\begin{aligned} \eta_i(\boldsymbol{\rho}, t) - u_i(\mathbf{R}^{(\alpha)}, t) &= b_i z(\boldsymbol{\rho}, t) + u_i(\boldsymbol{\rho}, t) - \\ &- u_i(\mathbf{R}^{(\alpha)}, t) + \frac{b}{b^*} z(\boldsymbol{\rho}, t) [u_i(\boldsymbol{\rho}, t) - u_i(\boldsymbol{\rho} - \mathbf{b}^*, t)] \approx \\ &\approx b_i z(\boldsymbol{\rho}, t) + [\rho_k - R_k^{(\alpha)} + b_k z(\boldsymbol{\rho}, t)] u_{ik}(\boldsymbol{\rho}, t). \end{aligned} \quad (7)$$

Вместе с тем потенциал внешних сил, действующих на атомы выделенного ряда, можно упростить, учитывая, что $|z| \leq 1$ и предполагая $b^*|z| \ll |\boldsymbol{\rho} + \mathbf{u}|$:

$$U_1^{(e)}[\boldsymbol{\rho} + \boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{\rho}, t), t] \approx$$

$$\approx U_1^{(e)}[\boldsymbol{\rho} + \mathbf{u}(\boldsymbol{\rho}, t), t] - b_i F_i^{(e\alpha)}[\boldsymbol{\rho} + \mathbf{u}(\boldsymbol{\rho}, t), t] z(\boldsymbol{\rho}, t),$$

$$\mathbf{F}^{(e\alpha)}(\mathbf{r}, t) = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} U_\alpha^{(e)}(\mathbf{r}, t). \quad (8)$$

В этом разложении мы пренебрегли членами порядка $F^{(e1)}u_{ik}$, принимая во внимание оговоренную выше малость внешних сил $F^{(e1)}$.

Выполняя разложение выражения (2) по производным u_{ik} , z' , \dot{u}_i , \dot{z} с точностью до квадратичных членов, учитывая следствия трансляционной симметрии кристалла и произведя удобную для дальнейшего анализа перегруппировку слагаемых, получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \mathbf{R}} m_\alpha [\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{R}, t)]^2 - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \mathbf{R}} \sum_{\alpha', \mathbf{R}'} A_{ik}^{(\alpha\alpha')}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') u_i(\mathbf{R}, t) u_k(\mathbf{R}', t) - \\ & - \sum_{\alpha, \mathbf{R}} U_\alpha^{(e)}[\mathbf{R} + \mathbf{u}(\mathbf{R}, t), t] + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{\rho}} \{ m_1 b^2 [\dot{z}(\boldsymbol{\rho}, t)]^2 - \omega b^2 [z'(\boldsymbol{\rho}, t)]^2 - 2\Phi[z(\boldsymbol{\rho}, t)] \} + \\ & + \sum_{\boldsymbol{\rho}} \{ m_1 b_i \dot{u}_i(\boldsymbol{\rho}, t) \dot{z}(\boldsymbol{\rho}, t) - b\omega_{ik} u_{ik}(\boldsymbol{\rho}, t) z'(\boldsymbol{\rho}, t) - \\ & - u_{ik}(\boldsymbol{\rho}, t) \Phi_{ik}[z(\boldsymbol{\rho}, t)] + b_i F_i^{(e1)}[\boldsymbol{\rho} + \mathbf{u}(\mathbf{R}, t), t] z(\boldsymbol{\rho}, t) \}. \end{aligned} \quad (9)$$

При записи выражения (9) использованы следующие обозначения:

$$A_{ik}^{(\alpha\alpha')}(\mathbf{R}) = - \frac{\partial^2 U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R})}{\partial R_i \partial R_k},$$

$$\omega = - \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{\rho}} A_{ik}^{(11)}(\boldsymbol{\rho}) \rho_i \rho_k, \quad (10)$$

$$\omega_{ik} = - \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{\rho}} A_{ni}^{(11)}(\boldsymbol{\rho}) \rho_n \rho_k,$$

$$\Phi(z) = \sum_{\alpha, \mathbf{R}^{(\alpha)}} [U_{1\alpha}(\mathbf{R}^{(\alpha)} + \mathbf{b}z) - U_{1\alpha}(\mathbf{R}^{(\alpha)})],$$

$$\Phi_{ik}(z) =$$

$$= \sum_{\alpha, \mathbf{R}^{(\alpha)}} \left[\frac{\partial U_{1\alpha}(\mathbf{R}^{(\alpha)} + \mathbf{b}z)}{\partial (R_i^{(\alpha)} + b_i z)} (R_k^{(\alpha)} + b_k z) - \frac{\partial U_{1\alpha}(\mathbf{R}^{(\alpha)})}{\partial R_i^{(\alpha)}} R_k^{(\alpha)} \right].$$

Отметим, что в выражении (9) мы пренебрегли квадратичным по малым деформациям слагаемым

$$\left| \sum_{\alpha, \mathbf{R}^{(\alpha)}} [A_{ik}^{(1\alpha)}(\mathbf{R}^{(\alpha)} + \mathbf{b}z) -$$

$$- A_{ik}^{(1\alpha)}(\mathbf{R}^{(\alpha)})] u_{in} u_{km} \right| \ll |b\omega_{ik} u_{ik} z'|,$$

предполагая оговоренную выше малую величину взаимодействия выделенного ряда атомов с кристаллической матрицей:

$$\left| \sum_{\alpha, \mathbf{R}^{(\alpha)}} A_{ik}^{(1\alpha)}(\mathbf{R}^{(\alpha)}) R_n^{(\alpha)} R_m^{(\alpha)} \right| \ll |\omega_{ik}|.$$

Переходя к обсуждению полученного для \mathcal{L} выражения (9), напомним, что решеточный вектор $\mathbf{R} = \{\mathbf{R}^{(\alpha)}, \boldsymbol{\rho}\}$ пробегает все равновесные положения атомов сложной кристаллической решетки, а величины $A_{ik}^{(\alpha\alpha')}(\mathbf{R})$ представляют собой силовую матрицу кристалла. Поэтому первые три слагаемые в (9) описывают динамику идеального гармонического кристалла с учетом действия на него внешних сил.

Четвертое слагаемое в (9) аналогично функции Лагранжа одномерного кристалла Френкеля—Конторовой. Однако динамическая переменная z имеет более общий смысл, чем смещения атомов в модели Френкеля—Конторовой, так как в общем случае z описывает смещения вдоль изогнутого плотноупакованного атомного ряда. Кроме того, по сравнению с моделью Френкеля—Конторовой более общий смысл приобретают параметр ω и решеточный потенциал $\Phi(z)$: величина ω определяется не только взаимодействием ближайших соседей, а периодическая функция $\Phi(z)$ может весьма существенно отличаться от синусоиды $\Phi(z) \sim \sin^2 \pi z$, использованной в [12]. Отметим, что различные особенности в нелинейной динамике одномерного кристалла, обусловленные сложной формой потенциала $\Phi(z)$, обсуждены в обзоре [13].

И, наконец, последнее слагаемое в (9) описывает эффекты, обусловленные взаимодействием линейных и нелинейного (краудиионного) возбуждений кристалла, а также влияние на движение краудииона внешних сил. Очевидно, что возмож-

ность эффективного разделения этих возбуждений возникает в тех случаях, когда последнее слагаемое в (9) можно считать малой добавкой к остальным слагаемым.

В заключение данного раздела обсудим основные свойства решеточных параметров и функций (10), существенные для дальнейшего анализа.

1. Важнейшим свойством параметра w , характеризующего межатомное взаимодействие внутри выделенного плотноупакованного ряда атомов, является его положительная определенность ($w > 0$), обусловленная устойчивостью кристаллической структуры. Положительно определенной является также и функция $\Phi(z) \geq 0$, что обеспечивается соответствующим выбором начала отсчета для энергии взаимодействия отдельного атома выделенного ряда с кристаллической матрицей (см. разд. 1).

2. Прямым следствием свойств симметрии кристалла и формул (10), определяющих эти функции, является их периодичность, обращение в нуль в точках $z = n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ и четность:

$$\begin{aligned} \Phi(z + n) &= \Phi(z), \quad \Phi_{ik}(z + n) = \Phi_{ik}(z); \\ \Phi(n) &= 0, \quad \Phi_{ik}(n) = 0; \end{aligned} \quad (11)$$

$$\Phi(z) = \Phi(-z), \quad \Phi_{ik}(z) = \Phi_{ik}(-z).$$

3. Следствием перечисленных выше свойств является обращение в нуль первых производных от $\Phi(z)$ и $\Phi_{ik}(z)$ в точках $z = n$ и возможность пользоваться в окрестностях этих точек $|z - n| \ll 1$ разложениями

$$\Phi(z) = \frac{1}{2} \kappa (z - n)^2 + \dots, \quad \kappa = \left. \frac{\partial^2 \Phi(z)}{\partial z^2} \right|_{z=n} > 0; \quad (12a)$$

$$\Phi_{ik}(z) = \frac{1}{2} \kappa_{ik} (z - n)^2 + \dots, \quad \kappa_{ik} = \left. \frac{\partial^2 \Phi_{ik}(z)}{\partial z^2} \right|_{z=n}. \quad (12b)$$

4. В частном случае центрально-симметричных межатомных потенциалов $U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r}) = U_{\alpha\alpha'}(r)$ матрицы w_{ik} и $\Phi_{ik}(z)$ симметричны по координатным индексам:

$$w_{ik} = w_{ki} = w \nu_i \nu_k, \quad \Phi_{ik}(z) = \Phi_{ki}(z). \quad (13)$$

3. Краудион в жесткой кристаллической матрице

В предыдущем разделе мы убедились, что в кристалле, способном испытывать упругие деформации ($\mathbf{u}(\mathbf{R}, t) \neq 0$), поле нелинейных смещений $z(\mathbf{p}, t)$ не может быть строго отделено от линейных возбуждений кристалла. Можно только надеяться, что такое разделение удастся произвести по теории возмущений [14,15], если существуют малые параметры, позволяющие считать последнее слагаемое в (9) малым возмущением. Поэтому в качестве нулевого приближения теории возмущений естественно рассмотреть краудион как топологический солитон на выделенном ряду атомов в отсутствие внешних сил ($\mathbf{F}^{(e\alpha)}(\mathbf{r}) \equiv 0$), предполагая кристаллическую матрицу абсолютно жесткой ($\mathbf{u}(\mathbf{R}, t) \equiv 0$). Этому приближению соответствует лагранжиан

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} [m_1 b^2 (\dot{z})^2 - w b^2 (z')^2 - 2\Phi(z)] \quad (14)$$

и вытекающее из него уравнение движения

$$m_1 b^2 \ddot{z} - w b^2 z'' + \frac{d}{dz} \Phi(z) = 0. \quad (15)$$

Интересующий нас топологический солитон представляет собой решение уравнения (15) вида $z(\mathbf{v}x, t) = z_s[\mathbf{v}(x - x_s)]$ ($x_s = v_s t$, $v_s = \text{const}$), которое удовлетворяет следующим граничным условиям на концах атомного ряда:

$$z_s(-\infty) \equiv 0, \quad z_s(\infty) = s, \quad z'_s(\pm\infty) \equiv 0. \quad (16)$$

Символ $s = \pm 1$ обозначает знак солитона (краудиона): значение $s = 1$ соответствует делокализованной вакансии, а $s = -1$ — делокализованному междоузлию в атомном ряду. Процедура интегрирования уравнения (15) хорошо известна и подробно описана в литературе: если функция $\Phi(z)$ четная ($\Phi(s z) = \Phi(z)$), положительно определенная и удовлетворяет условию $\Phi(0) = \Phi(s) = 0$, то первый и второй интегралы можно записать в виде соотношений (см. [8,13])

$$z'_s = s \left[\frac{c_0^2}{c_0^2 - v_s^2} \frac{2\Phi(z_s)}{b^2 w} \right]^{1/2}, \quad c_0^2 = \frac{w}{m_1}; \quad (17)$$

$$\int_{1/2}^{sz_s} \frac{dz}{\sqrt{2\Phi(z)}} = \left[\frac{c_0^2}{(c_0^2 - v_s^2) w} \right]^{1/2} \frac{x - x_s}{b}, \quad x_s = v_s t. \quad (18)$$

Соотношение (18) определяет центр краудиона как точку $x = x_s$, в которой смещение $z_s(0) = s/2$.

В дальнейшем мы будем рассматривать только сравнительно медленные («нерелятивистские») краудионы $v_s \ll c_0$, так как, согласно (17), при $v_s \rightarrow c_0$ нарушается основное исходное предположение $b^*|z'| \ll 1$, позволяющее получить упрощенное выражение для функции Лагранжа (9). Поскольку на больших расстояниях от центра краудиона $x - x_s \rightarrow \pm\infty$ согласно условиям (16) значение потенциала $\Phi(z)$ можно заменить разложением (12а), то из соотношения (18) легко получить асимптотики смещений $z_s[\mathbf{v}(x - x_s)]$ для медленного краудиона:

$$sz_s[\mathbf{v}(x - x_s)] \approx \begin{cases} \frac{1}{2} \exp\left(\frac{x - x_s}{\lambda_s}\right), & x < x_s - \lambda_s; \\ 1 - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{x - x_s}{\lambda_s}\right), & x > x_s + \lambda_s, \end{cases} \quad (19)$$

$$\lambda_s = b \left(\frac{\omega}{\kappa}\right)^{1/2}.$$

Параметр λ_s имеет смысл полуширины краудиона: относительная локальная деформация атомного ряда $b^*z'[\mathbf{v}(x - x_s)]$ заметно отлична от нуля только вблизи его центра на интервале $x_s \pm \lambda_s$ и достигает максимального значения в центре краудиона:

$$\max |b^*z'_s| \approx \frac{b^*}{\lambda_s} = \frac{b^*}{b} \left(\frac{\kappa}{\omega}\right)^{1/2}.$$

Данное соотношение вместе с соотношениями (10) и (12) позволяет записать основное условие существования краудионов $b^*|z'| \ll 1$ в терминах решеточных параметров:

$$\begin{aligned} (b^*)^2 \kappa &= - (b^*)^2 \sum_{\alpha, \mathbf{R}^{(\alpha)}} A_{ik}^{(1\alpha)}(\mathbf{R}^{(\alpha)}) b_i b_k \ll b^2 \omega = \\ &= - \frac{b^2}{2} \sum_{\rho} A_{ik}^{(11)}(\rho) \rho_i \rho_k. \end{aligned} \quad (20)$$

Дополнительная энергия атомного ряда, обусловленная появлением в нем краудионной волны $z_s[\mathbf{v}(x - x_s)] = z_s(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_s)$, где $\boldsymbol{\rho}_s = \mathbf{v}x_s = \mathbf{v}v_s t$, равна

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\rho} \left\{ m_1 b^2 [\dot{z}_s(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_s)]^2 + \omega b^2 [z'_s(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_s)]^2 + 2\Phi[z_s(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_s)] \right\}. \quad (21)$$

В дальнейшем, выполняя суммирование по вектору $\boldsymbol{\rho}$, мы будем ограничиваться континуальным приближением

$$\sum_{\rho} (\dots) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{b^*} (\dots).$$

В этом приближении энергия E_0 приобретает вид*

$$E_0 = \frac{1}{2} m_{s0} v_s^2 + \epsilon_{s0}; \quad (22)$$

$$\epsilon_{s0} = \frac{b}{b^*} \int_0^1 [2\omega\Phi(z)]^{1/2} dz, \quad m_{s0} = m_1 \frac{\epsilon_{s0}}{\omega}.$$

Параметры ϵ_{s0} и m_{s0} имеют смысл соответственно собственной энергии и эффективной массы краудиона, а центр краудиона можно рассматривать как псевдочастицу, несущую на себе указанные характеристики. При выполнении неравенства (20) $\lambda_s \gg b^*$, $\epsilon_{s0} \ll \omega$ и $m_{s0} \ll m_1$.

4. Краудион как источник упругих полей

В предыдущем разделе мы видели, что на плотноупакованном ряду атомов, помещенном в абсолютно жесткую (недеформируемую) кристаллическую матрицу, возможно существование краудиона, центр которого движется с произвольной постоянной скоростью v_s . Будем предполагать, что взаимодействие такого краудиона с деформируемой кристаллической матрицей и системой достаточно слабых внешних сил сохраняет солитонные свойства краудионного возбуждения, но может приводить к изменениям формы краудиона и нарушениям режима стационарного движения его центра, т.е. к изменению скорости v_s в процессе движения. Такое предположение позволяет считать координату центра краудиона некоторой, в общем случае нелинейной, функцией времени $x_s(t)$ и наряду с упругими смещениями $\mathbf{u}(\mathbf{R}, t)$, скоростями $\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{R}, t)$ и дисторсиями $u_{ik}(\mathbf{R}, t)$ рассматривать $x_s(t)$ и $v_s(t) = \dot{x}_s(t)$ в качестве динами-

* Учет дискретности приводит к появлению периодичной по координате $x_s = v_s t$ добавки к энергии краудиона, аналогичной энергии Пайерлса для дислокации [8,13].

ческих переменных кристалла. Формальная подстановка описанного в предыдущем разделе солитона $z = z_s[\mathbf{p} - \mathbf{p}_s(t)]$ в функцию (9) превращает ее в функцию указанного выше набора динамических переменных:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{cs}\{\mathbf{u}(\mathbf{R}, t), \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{R}, t), u_{ik}(\mathbf{R}, t), x_s(t), v_s(t)\}.$$

Полученное таким способом выражение будем рассматривать как функцию Лагранжа кристалла с краудионом, которая определяет совместную пространственно-временную эволюцию упругих смещений атомов кристалла $\mathbf{u}(\mathbf{R}, t)$ и центра краудиона $x_s(t)$.

Считая движение центра краудиона заданным и используя \mathcal{L}_{cs} , можно получить уравнение движения кристалла в форме Лагранжа [20]:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{cs}}{\partial \dot{u}_i} \right) + \frac{\partial}{\partial R_k} \left(\frac{\partial \mathcal{L}_{cs}}{\partial u_{ik}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}_{cs}}{\partial u_i} = 0. \quad (23)$$

Переход от этого уравнения к уравнению движения для смещений $\mathbf{u}(\mathbf{R}, t)$ в форме Ньютона в случае рассматриваемых нами медленных краудионов можно выполнить в линейном по скорости v_s приближении, пренебрегая членами порядка $v_s^2/c^2 \ll 1$ и эффектами запаздывания упругих волн. В этом приближении справедливы соотношения

$$\dot{z}_s = -v_s z'_s, \quad \ddot{z}_s \approx -\dot{v}_s z'_s. \quad (24)$$

Подставляя $z = z_s[\mathbf{p} - \mathbf{p}_s(t)]$ в (9) и используя (23) и (24), получаем

$$m_\alpha \ddot{u}_i(\mathbf{R}, t) + \sum_{\alpha', \mathbf{R}'} A_{ik}^{(\alpha\alpha')}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') u_k(\mathbf{R}', t) = F_i^{(e\alpha)}[\mathbf{R} + \mathbf{u}(\mathbf{R}, t), t] + F_i^{(s)}(\mathbf{R}, t), \quad (25)$$

$$F_i^{(s)} = \delta_{\mathbf{R}\mathbf{p}} \{m_1 b_i \dot{v}_s z'_s(\mathbf{p} - \mathbf{p}_s) + \frac{\partial}{\partial \rho_k} \Phi_{ik} [z_s(\mathbf{p} - \mathbf{p}_s)] + b\omega_{ik} \frac{\partial}{\partial \rho_k} z'_s(\mathbf{p} - \mathbf{p}_s)\}. \quad (26)$$

В правой части уравнения (25) наряду с внешними силами $\mathbf{F}^{(e\alpha)}$ стоит также сила $\mathbf{F}^{(s)}$, определяющая дополнительную упругую деформацию кристалла под действием краудиона. При записи этой силы мы пренебрегли слагаемым $zb_k \partial F_k^{(e1)}/\partial R_j$,

учитывая оговоренный выше длинноволновый характер внешних сил.

Длинноволновый характер сил $\mathbf{F}^{(e\alpha)}$ и относительно малая величина фононных и краудионных смещений позволяют считать $\mathbf{F}^{(e\alpha)} \approx \mathbf{F}^{(e\alpha)}(\mathbf{R} + \mathbf{u}^{(e)}(\mathbf{R}, t), t)$. В этом приближении общее решение уравнения (25) можно представить в виде суперпозиции трех типов смещений:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(ph)} + \mathbf{u}^{(e)} + \mathbf{u}^{(s)}. \quad (27)$$

Здесь $\mathbf{u}^{(ph)}$ — свободные колебания кристалла (акустические и оптические фононы); $\mathbf{u}^{(e)}$ — смещения под действием внешних сил $\mathbf{F}^{(e\alpha)}$; $\mathbf{u}^{(s)}$ — смещения, возникающие вследствие наличия в кристалле краудиона.

В данном разделе основной интерес представляет для нас поле смещений $\mathbf{u}^{(s)}(\mathbf{R}, t)$. В квазистатическом приближении (т.е. без учета запаздывания упругих волн) эти смещения являются убывающим вдали от центра краудиона решением уравнения

$$\sum_{\alpha', \mathbf{R}'} A_{ik}^{(\alpha\alpha')}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') u_k^{(s)}(\mathbf{R}', t) = F_i^{(s)}(\mathbf{R}, t).$$

Считая известной функцию (тензор) Грина $G_{ik}^{(\alpha\alpha')}(\mathbf{R})$ для уравнения равновесия кристалла, поле смещений $\mathbf{u}^{(s)}(\mathbf{R}, t)$ можно представить в виде*

$$u_i^{(s)}(\mathbf{R}, t) = \sum_{\alpha', \mathbf{R}'} G_{ik}^{(\alpha\alpha')}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') F_k^{(s)}(\mathbf{R}', t).$$

Подстановка в эту формулу выражения (26) и несложные преобразования дают возможность записать смещения $\mathbf{u}^{(s)}$ в виде

$$u_i^{(s)}(\mathbf{R}, t) = \sum_{\mathbf{p}'} \left\{ m_1 \dot{v}_s z'_s(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_s) b_k G_{ik}^{(\alpha 1)}(\mathbf{R} - \mathbf{p}') + \left[b\omega_{kn} z'_s(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_s) + \Phi_{kn} [z_s(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_s)] \right] \frac{\partial}{\partial R_n} G_{ik}^{(\alpha 1)}(\mathbf{R} - \mathbf{p}') \right\}. \quad (28)$$

Явную связь этих смещений с координатой и скоростью центра краудиона можно получить на расстояниях $|\mathbf{R} - \mathbf{p}_s| \gg \lambda_s$, принимая во внимание экспоненциальную локализацию функций $z'_s(\mathbf{p} - \mathbf{p}_s)$ и $\Phi_{ik} [z_s(\mathbf{p} - \mathbf{p}_s)]$ на оси $0x$ вблизи центра краудиона \mathbf{p}_s (см. асимптотики (126) и (19)),

* Статическая функция Грина кристалла в решеточном приближении определяется уравнением $\sum_{\alpha', \mathbf{R}'} A_{in}^{(\alpha\alpha')}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') G_{nk}^{(\alpha\alpha')}(\mathbf{R}'' - \mathbf{R}') = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}''} \delta_{ik}$ и естественным условием обращения в нуль ее компонент при $|\mathbf{R} - \mathbf{R}'| \rightarrow \infty$.

а также плавный (степенной) характер координатной зависимости функции Грина и ее производной:

$$u_i^{(s)}(\mathbf{R}, t) = q_s m_1 v_k G_{ik}^{(\alpha 1)}(\mathbf{R} - \mathbf{p}_s) \dot{v}_s + (q_s \omega_{kn} + \varphi_{kn}) \frac{\partial}{\partial R_n} G_{ik}^{(\alpha 1)}(\mathbf{R} - \mathbf{p}_s), \quad (29)$$

$$|\mathbf{R} - \mathbf{p}_s| \gg \lambda_s;$$

$$q_s = \frac{sb}{b^*} = b \sum_{\rho} z'_s(\rho), \quad \varphi_{ik} = \frac{b\omega^{1/2}}{b^*} \int_0^1 \frac{\Phi_{ik}(z)}{\sqrt{2\Phi(z)}} dz.$$

Полные смещения атомов выделенного ряда, в котором находится краудион, в отсутствие фононов и внешних сил описывается, согласно (1), формулой

$$\eta_i^{(s)}(\rho, t) = u_i^{(s)}(\rho, t) + [b_i + b_k u_{ik}^{(s)}(\rho, t)] z_s(\rho - \mathbf{p}_s). \quad (30)$$

Из формул (28)–(30) следует качественно новая особенность полей деформаций, создаваемых краудионом в трехмерном кристалле, по сравнению с краудионной (солитонной) деформацией в кристалле Френкеля–Конторовой. Соответствующие смещения (29) компоненты тензора дисторсий $u_{ik}^{(s)}(\mathbf{R}, t)$ как в объеме кристалла ($\mathbf{R} = \mathbf{R}^{(0)}$), так и внутри выделенного атомного ряда ($\mathbf{R} = \rho$) убывают по мере удаления от центра краудиона \mathbf{p}_s как пространственные производные от компонент функции Грина, т.е. по степенному закону, тогда как в одномерном кристалле краудион создает только экспоненциально локализованные деформации $z'_s(\rho - \mathbf{p}_s)$. Отметим, что вывод о степенном убывании создаваемых краудионом упругих полей вдали от его центра впервые был сформулирован в работах [14–17].

5. Уравнение движения краудиона

Выражение (27) однозначно определяет деформации кристалла, если считать закон движения центра краудиона $\mathbf{p}_s(t)$ известным. Но для того чтобы описание динамики кристалла с краудионом было полностью самосогласованным и замкнутым, необходимо указать также уравнение, определяющее функцию $\mathbf{p}_s(t)$ при заданных упругих деформациях кристалла, т.е. уравнение движения для центра краудиона.

Краудион в трехмерном кристалле, как и в модельном кристалле Френкеля–Конторовой,

является коллективным автолокализованным возбуждением поля атомных смещений, поэтому его уравнение движения будет иметь полевое происхождение. Метод получения полевых уравнений движения был разработан Лоренцем при выводе уравнения движения электрона, а в физике кристаллов эффективно использован Косевичем [19] при выводе уравнения движения дислокации. Для решения интересующей нас задачи будет также использован один из вариантов этого метода.

Рассмотрим краудион как частицу, движение которой в объеме кристалла можно описать динамическими переменными $\mathbf{p}_s = \mathbf{v} x_s(t)$ и $\dot{\mathbf{p}}_s = \mathbf{v} v_s$. Предположим наличие в кристалле свободных колебаний (акустических и оптических фононов) $\mathbf{u}^{(ph)}(\mathbf{R}, t)$ и возбуждаемых внешними силами вынужденных смещений $\mathbf{u}^{(e)}(\mathbf{R}, t)$, считая эти поля заданными функциями координат и времени. Подстановка $z = z_s(\rho - \mathbf{p}_s)$, общего выражения для полей смещений (27) и выражения для поля обусловленных краудионом смещений (28) в функцию Лагранжа (9) позволяет выделить из нее два последних слагаемых как отдельный блок \mathcal{L}_s , который будет зависеть от динамических переменных краудиона и включать в себя в виде параметров внешние поля и силы. Часть слагаемых этого блока можно трактовать как энергию взаимодействия краудиона с внешними полями, тогда как слагаемые, обусловленные смещениями $\mathbf{u}^{(s)}$, описывают его самодействие. Величина \mathcal{L}_s приобретет обычный для классической механики вид функции Лагранжа частицы $\mathcal{L}_s = \mathcal{L}_s\{x_s, v_s; \mathbf{u}^{(ph)} + \mathbf{u}^{(e)}, \mathbf{F}^{(e)}\}$, если при ее построении ограничиться квадратичным приближением по скоростям v_s и при описании самодействия пренебречь в (28) слагаемым, пропорциональным ускорению \dot{v}_s :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_s = & \frac{1}{2} m_s v_s^2 - \epsilon_s - \\ & - \sum_{\rho} \{m_1 v_s b_i [u_i^{(ph)}(\rho, t) + u_i^{(e)}(\rho, t)] z'_s(\rho - \mathbf{p}_s) + \\ & + [u_{ik}^{(ph)}(\rho, t) + u_{ik}^{(e)}(\rho, t)] [b\omega_{ik} z'_s(\rho - \mathbf{p}_s) + \Phi_{ik}(z_s)] + \\ & + b_i F_i^{(e)}[\rho + \mathbf{u}^{(e)}(\rho, t), t] z_s(\rho, t)\}. \quad (31) \end{aligned}$$

Учет самодействия краудиона через кристалл, обладающий конечной упругой податливостью, приводит к перенормировке затравочных значений эффективной массы m_{s0} и энергии покоя ϵ_{s0} :

$$m_s = m_{s0} + 2m_1 b \sum_{\rho, \rho'} \frac{\partial^2 G_{ik}^{(11)}(\rho - \rho')}{\partial \rho_n \partial \rho_m} v_i v_m \times$$

$$\times z'_s(\rho) \{b\omega_{kn} z'_s(\rho') + \Phi_{kn} [z_s(\rho')]\}; \quad (32)$$

$$\varepsilon_s = \varepsilon_{s0} + \sum_{\rho, \rho'} \frac{\partial^2 G_{ik}^{(11)}(\rho - \rho')}{\partial \rho_n \partial \rho_m} \times$$

$$\times \{b\omega_{im} z'_s(\rho) + \Phi_{im} [z_s(\rho)]\} \{b\omega_{kn} z'_s(\rho') + \Phi_{kn} [z_s(\rho')]\}. \quad (33)$$

Анализ этих выражений показывает, что обусловленные самодействием перенормировки не являются слабыми: дополнительные слагаемые в (32) и (33) имеют, вообще говоря, величины такого же порядка, как m_{s0} и ε_{s0} . Для того чтобы эффекты перенормировки оказались слабыми, необходимо выполнение специальных предположений о свойствах кристалла, приводящих к аномально малым величинам компонент тензора Грина $G_{ik}^{(11)}$ (в терминах работ [14,15] — сильная анизотропия).

Выражение (31) является функцией Лагранжа краудиона, совершающего медленное движение в заданных внешних полях. Имея \mathcal{L}_s , можно в соответствии с общими правилами формализма Лагранжа записать уравнение движения краудиона в виде

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}_s}{\partial v_s} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}_s}{\partial x_s} = 0. \quad (34)$$

При переходе от (34) к уравнению движения в форме Ньютона целесообразно учесть экспоненциально «острый» характер функций $z'_s(\rho - \rho_s)$ и $\Phi_{ik} [z'_s(\rho - \rho_s)]$ на фоне плавных координатных зависимостей внешних полей, как это было сделано при получении формулы (29). Это позволяет значения внешних полей в точке $\rho = \rho_s$ вынести за знак суммирования по ρ . В результате уравнение движения краудиона приобретает окончательный вид:

$$m_s \dot{v}_s = q_s v_i F_i^{(e1)}[\rho_s + \mathbf{u}^{(e)}(\rho_s, t), t] +$$

$$+ q_s m_1 v_i \frac{\partial^2}{\partial t^2} [u_i^{(ph)}(\rho_s, t) + u_i^{(e)}(\rho_s, t)] -$$

$$- (q_s \omega_{ik} + \varphi_{ik}) \frac{\partial}{\partial x_s} [u_{ik}^{(ph)}(\rho_s, t) + u_{ik}^{(e)}(\rho_s, t)]. \quad (35)$$

Выражения для констант решеточно-краудионного взаимодействия ω_{ik} и φ_{ik} приведены в формулах (10) и (29).

Переходя к обсуждению полученного уравнения, отметим несколько существенных особенностей действия на краудион внешних по отношению к нему полей и сил.

1. Основная часть слагаемых в правой части уравнения движения (35) пропорциональна параметру $q_s = bs/b^*$, который играет роль эффективного «заряда» краудиона по отношению к внешним полям. Таким образом, направления соответствующих сил различны для положительных ($s = 1$) и отрицательных ($s = -1$) краудионов. Вместе с тем существует также компонента силы, обусловленная упругими дилатациями кристалла, не зависящая от знака краудиона. Однако следует отметить, что эта сила сравнительно мала, так как в рамках рассматриваемой модели константы краудионно-деформационного взаимодействия удовлетворяют неравенству $|\varphi_{ik}| \ll |\omega_{ik}|$.

2. При квазистатических деформациях кристалла краудион испытывает действие деформационных сил только при наличии градиентов упругих дилатаций. При этом если межатомное взаимодействие не является центральносимметричным ($\omega_{ik} \neq \omega_{ki}$, $\varphi_{ik} \neq \varphi_{ki}$), то силы возникают под действием как неоднородных деформаций $u_{ik}^{(e)} + u_{ki}^{(e)}$, так и неоднородных вращений $u_{ik}^{(e)} - u_{ki}^{(e)}$.

3. Деформация кристалла в существенно динамическом режиме приводит к появлению специфических сил инерциального происхождения, пропорциональных $\partial^2 \mathbf{u}^{(e)} / \partial t^2$. Появление таких сил вполне естественно, так как краудионное возбуждение перемещается внутри атомного ряда, который, в свою очередь, движется под действием внешних полей.

4. Следует обратить также внимание на важную особенность координатно-временной зависимости силы $\mathbf{F}^{(e1)}$. Даже при малых деформациях кристалла $|u_{ik}^{(e)}| \ll 1$ соответствующие смещения отдельных его частей $\mathbf{u}^{(e)}$ могут быть достаточно большими. Поэтому при описании действия на краудион внешних полей необходимо учитывать возможные большие перемещения его центра в пространстве вместе с соответствующими частями кристалла.

В заключение следует обсудить еще один важный вопрос, имеющий непосредственное отношение к динамическим свойствам краудиона. Полученное выше уравнение движения (35) учитывает только силы упругого происхождения (так называемые консервативные силы). В реальных ситуациях присутствуют и могут играть существенную

роль также различные неконсервативные силы (силы трения): фононное и электронное трение, радиационные потери и т.п. Учет сил трения приведет к появлению дополнительных членов в уравнении движения (35), которые мы проанализируем в отдельных публикациях.

Кроме того, в некоторых случаях значительную роль в динамике краудиона может играть отсутствующая в (35) консервативная сила, возникающая при более детальном учете дискретности и трансляционной симметрии кристалла, — сила Пайерлса (см. примечание в разд. 3).

Выводы

Построена микроскопическая теория динамических свойств краудионов — специфических нелинейных возбуждений кристаллической структуры, возникающих на плотноупакованных атомных рядах, которые относительно слабо взаимодействуют с кристаллической матрицей.

Задача о движении краудиона сформулирована и проанализирована как динамическая проблема трехмерной кристаллической решетки, образованной атомами нескольких сортов с парным короткодействующим межатомным взаимодействием. Выяснен микроскопический смысл параметров, используемых в феноменологических моделях краудионов.

Сформулированы требования к силовым и геометрическим параметрам кристалла, позволяющие выделить краудионные возбуждения на фоне упругих динамических деформаций кристалла в целом.

В рамках формализма Лагранжа выведено уравнение движения краудиона в неоднородно деформированном кристалле и обсуждена физическая природа действующих на краудион сил.

Получены соотношения, связывающие собственную энергию и эффективную массу краудиона с микроскопическими параметрами кристалла.

Авторы благодарны А. М. Косевичу и А. С. Ковалеву за полезные обсуждения и критические замечания, способствовавшие более глубокому пониманию затронутых в работе вопросов.

1. H. R. Paneth, *Phys. Rev.* **80**, 708 (1950).
2. L. Tewordt, *Phys. Rev.* **109**, 61 (1958).
3. Ж. Фридель, *Дислокации*, Мир, Москва (1967).

4. Дж. Маннинг, *Кинетика диффузии атомов в кристаллах*, Мир, Москва (1971).
5. A. Seeger, *Phys. Status Solidi* **38**, 235 (1970).
6. L. M. Brown, *Scr. Metall.* **8**, 1045 (1974).
7. C. H. Wao and W. Frank, *J. Nucl. Mater.* **137**, 7 (1985).
8. А. М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов*, Наукова думка, Киев (1981).
9. А. М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Вища школа, Харьков (1988).
10. Дж. Л. Лем, *Введение в теорию солитонов*, Мир, Москва (1983).
11. А. С. Давыдов, *Солитоны в молекулярных системах*, Наукова думка, Киев (1988).
12. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов*, Наука, Ленинград (1972).
13. O. M. Braun and Yu. S. Kivshar, *Phys. Rep.* **306**, № 1–2 (1998).
14. А. М. Косевич, А. С. Ковалев, *Теория динамических краудионов*, В сб.: *Материалы школы по радиационным и другим дефектам в твердых телах*, Т. 1, Изд-во Инта физики АН ГССР, Тбилиси (1974).
15. А. М. Косевич, А. С. Ковалев, *Теория динамического краудиона в трехмерной сильно анизотропной среде*, В сб.: *Динамика дислокаций*, Наукова думка, Киев (1975).
16. A. S. Kovalev, A. D. Kondratyuk, A. M. Kosevich, and A. I. Landau, *Phys. Rev.* **B48**, 4122 (1993); *Phys. Status Solidi* **B177**, 117 (1993).
17. A. L. Landau, A. S. Kovalev, and A. D. Kondratyuk, *Phys. Status Solidi* **B179**, 373 (1993).
18. В. А. Слюсарев, И. А. Бурахович, М. А. Стржемечный, *Теория динамики краудионов в классических и квантовых кристаллах*, Препринт ФТИНТ АН УССР (1973).
19. А. М. Косевич, *Дислокации в теории упругости*, Наукова думка, Киев (1978); *УФН* **84**, 579 (1964).
20. Г. Голдстейн, *Классическая механика*, ГИИТЛ, Москва (1957).

The crowdion dynamics in three-dimensional nonuniformly deformed crystals

V. D. Natsik and E. I. Nazarenko

The problem of crowdion motion is formulated and analyzed as a dynamic problem of the three-dimensional lattice formed by atoms of different kinds interacting through two-body short-range potentials. Requirements on the microscopic crystal parameters are stated that allow one to distinguish the crowdion excitations of close-packed atomic rows against the background of small dynamic crystal deformation. Equations of the crowdion motion in an arbitrary elastic crystal deformation field are derived in terms of the Lagrange formalism. Relations that relate the effective mass and the crowdion energy at rest with the geometric and force crystal parameters are obtained.