Письма в ЖЭТФ, том 62, вып.2, стр.123 - 128

ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ И ДАЛЬНИЙ ПОРЯДОК

А.Ф.Андреев

Институт физических проблем им. П.Л.Капицы, РАН

117334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 8 июня 1995 г.

Точечные дефекты в трехмерных системах обладают своеобразной топологической характеристикой, связанной с медленностью убывания возмущения параметра порядка, наличие которой меняет характер упорядочения. Пластичность кристаллов, обусловленная точечными дефектами, должна существовать как термодинамически равновесное явление. Равновесная огранка кристаллов разрушается флуктуациями концентрации точечных дефектов.

Точечные дефекты при малой концентрации не разрушают дальний порядок в трехмерных системах (см. [1], §14), что обусловлено достаточно быстрым убыванием возмущения параметра порядка с увеличением расстояния от дефекта. В качестве простейших характерных примеров мы рассмотрим влияние 1) вихревых колец и других квазичастиц на дальний порядок сверхтекучего ^{4}He и 2) точечных дефектов решетки, в частности, дислокационных петель на дальний порядок в кристаллах. В обоих случаях возмущение параметра порядка (фазы волновой функции конденсата в ^{4}He и вектора смещения в кристалле) на больших расстояниях имеет дипольный характер, то есть убывает обратно пропорционально квадрату расстояния от точечного дефекта. Ключевым пунктом данной работы является заключение о том, что хотя такое убывание и является достаточно быстрым, чтобы не разрушать дальний порядок, оно все же столь медленно, что приводит к существенному изменению характера упорядочения. Медленность убывания возмущения обусловливает существование своеобразной топологической характеристики, общей для всех точечных дефектов дипольного типа, определяемой асимптотикой возмущения на больших расстояниях. В случае ^{4}He изменение характера упорядочения заключается в появлении вихревой (нормальной) части усредненной скорости жидкости. Интересно отметить, что электрические и магнитные диполи в макроскопической электродинамике также обладают подобной топологической характеристикой, причем в развиваемом подходе вихревой характер скорости нормальной компоненты сверхтекучей жидкости имеет то же топологическое происхождение, что и вихревой характер электрической и магнитной индукции, обусловленный неоднородным распределением дипольных моментов.

Случай сверхтекучей жидкости является иллюстрацией развиваемого общего подхода, хотя в данном случае он не приводит к новым наблюдаемым результатам. Напротив, для кристаллов результатом данной работы является общее утверждение о пластичности, обусловленной точечными дефектами, Старая дискуссия о том, могут ли точечные дефекты быть причиной пластичности, понимаемой как возможность изменения макроскопической формы кристалла без изменения формы элементарной ячейки, первоначально закончилась [2] общим отрицательным ответом. В работе Базалия, Савищева и автора [3] отмечалось, что поскольку дислокационные петли макроскопического радиуса во всяком случае являются источником пластичности, в любом кристалле должны существовать "элементарные носители" пластичности, то есть точечные дефекты минимальной энергии, обладающие ненулевым дислокационным моментом. Результатом данной работы является утверждение, что всякий точечный дефект, в частности вакансия, обладает дислокационным моментом, он фактически вычислен ниже. Можно поэтому утверждать, что наблюдаемая экспериментально [4] пластичность некубических кристаллов, в противоположность высказывавшемуся мнению [5], должна существовать как термодинамически равновесное явление. Пластичность сосуществует с кристаллическим дальним порядком по существу таким же образом, как вихревое движение нормальной компоненты сосуществует в сверхтекучей жидкости с дальним порядком по фазе конденсата. Важно подчеркнуть, что термически активированные точечные дефекты существуют в любом кристалле при конечной температуре. Точечные дефекты при этом являются скорее элементарными возбуждениями, чем дефектами. Изменение характера дальнего порядка, обусловленное такими элементарными возбуждениями, как мы покажем ниже и как отмечалось ранее [6], существенно при решении вопроса о возможности равновесной огранки кристаллов. Этот вопрос стал в последнее время актуальным в связи с появлением публикаций, с одной стороны, группы Балибара [7], претендующей на экспериментальное подтверждение модельной теории Нозьера [8], несовместимой с пластичностью, и, с другой стороны, Бабкина и др. [9], свидетельствующих об отсутствии огранки в общепринятом смысле.

1. Рассмотрим сверхтекучий ^{4}He с вихревыми кольцами или другими точечными дефектами. Единственным существенным для нас свойством точечного дефекта является малость скорости дефекта по сравнению со скоростью звука, которое позволяет считать жидкость несжимаемой. Фаза φ волновой функции конденсата удовлетворяет при этом уравнению Лапласа $\Delta\varphi = 0$, асимптотика решения которого на расстояниях $|\mathbf{r}|$, значительно превышающих размер дефекта, имеет вид

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\mathbf{s}\nabla\left(\frac{1}{r}\right) = -\frac{(\mathbf{s}\mathbf{r})}{2r^3}, \tag{1}$$

где $\mathbf{s}$ – постоянный вектор, характеризующий дефект. Для вихревого кольца макроскопического радиуса имеем $\mathbf{s} = \pi R^2\mathbf{n}$, где R – радиус кольца, $\mathbf{n}$ – единичный вектор ориентации.

Пусть дефекты в среднем однородно распределены в жидкости со средней плотностью n. Будем для простоты формул считать, что все они имеют одно и то же значение параметра $\mathbf{s}$ (в общем случае в формулах следует произвести суммирование по типу дефектов). Рассмотрим изменение $\delta\varphi$ фазы вдоль прямолинейного контура макроскопической длины δl, параллельного для определенности оси z, и произведем усреднение по координатам дефектов. Будем использовать известный из классической теории рассеяния частиц метод, основанный на введении понятия эффективного сечения процесса. Метод позволяет свести усреднение по координатам рассеивающих центров в задаче об одной рассеиваемой частице к задаче об усреднении по прицельным расстояниям рассеиваемых частиц относительно одного рассеивающего центра. Следуя этому методу, рассмотрим изменение параметра порядка (1) вдоль параллельных оси z контуров, распределение которых по значениям "прицельных параметров" $\vec{\rho}$ однородно, то есть вероятность dw иметь контур в элементе площади $d^2\rho$ равна $Nd^2\rho$. Здесь $\vec{\rho}$ – двумерный радиус-вектор, $\mathbf{r} = (\vec{\rho}, z)$,

$\vec{\rho} = (x, y)$, дефект находится в начале координат, двумерная плотность N контуров связана с пространственной плотностью дефектов в исходной задаче соотношением $n\delta l = N$. Рассмотрим среднее значение фазы (1) при заданном z:

$$< \varphi(z) > \equiv \int \varphi(\vec{\rho}, z) dw = N \int \varphi(\vec{\rho}, z) d^2\rho = -\pi \frac{z}{|z|} s_z N. \tag{2}$$

Последняя формула справедлива при любых z, удовлетворяющих двум условиям: 1) $|z|$ – велико по сравнению с размером дефекта, что необходимо для использования асимптотики (1); 2) $|z| \ll n^{-1/3}$, что позволяет не учитывать возмущение фазы другими дефектами.

Средняя фаза как функция z вблизи дефекта имеет, таким образом, весьма характерную особенность типа $z/|z|$. Это и есть топологическое свойство дипольных точечных дефектов, о котором говорилось в начале статьи. На расстояниях $|z| \ll n^{-1/3}$ фаза испытывает "топологический" скачок

$$< \delta\varphi > = -2\pi s_z N = -2\pi s_z n \delta l, \tag{3}$$

не сопровождающийся особенностями градиента $\nabla\varphi$.

Введем эффективное сечение σ_z процесса, заключающегося в изменении фазы $\varphi \to \varphi + 1$ вдоль прямолинейного контура, параллельного оси z, определив его формулой $< \delta\varphi > = N\sigma_z$. Имеем $\sigma_z = -2\pi s_z$. Обратим внимание, что для вихревого кольца такое эффективное сечение в точности соответствует топологическому скачку фазы $\varphi \to \varphi - 2\pi$ на "разрезе" по поверхности кольца с площадью s_z, который необходим для обеспечения однозначности фазы во внешнем по отношению к кольцу пространстве. Формула (3) имеет более общий характер. Она связывает топологический скачок для любого точечного дефекта с его универсальной асимптотической характеристикой $\mathbf{s}$ без какой-либо информации о свойствах решения в области порядка размеров дефекта.

Формула (3) определяет "топологическую" часть $< \delta\varphi > /\delta l$ среднего градиента фазы, наличие которой означает некоммутативность операций усреднения и дифференцирования по z. Имеем $(\partial/\partial z) < \varphi > = < \partial\varphi/\partial z > -2\pi s_z n$, или, в силу произвольности выбора направления оси z, $\nabla < \varphi > = < \nabla\varphi > -2\pi \mathbf{s} n$. Последняя формула приобретает хорошо известную форму, если ввести потенциальную скорость $\mathbf{v}_s = (\hbar/m)\nabla < \varphi >$ сверхтекучей компоненты и среднюю скорость $\mathbf{v} = (\hbar/m) < \nabla\varphi >$, которая в нашем случае отличается от среднего потока массы $\mathbf{j}$ постоянным множителем $1/\rho$, где ρ – плотность жидкости. Получаем:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_s + (1/\rho)\mathbf{p}n, \tag{4}$$

где $\mathbf{p} = (2\pi\hbar/m)\rho\mathbf{s}$ – известное [10] значение импульса квазичастицы. Дальний порядок по фазе $< \varphi >$ при наличии дефектов характеризуется вихревым характером макроскопической скорости $\mathbf{v}$ и наличием нормальной компоненты.

Отметим, что аналогом формулы (4) в макроскопической электродинамике являются формулы

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{d}n, \quad \mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{m}n,$$

где $\mathbf{d}$, $\mathbf{m}$ – значения электрического и магнитного моментов диполей, n – их плотность. Эти формулы легко получить на основе развиваемого подхода, рассматривая топологические скачки скалярного потенциала электрического или магнитного полей (потенциальными полями после усреднения являются $\mathbf{E}$ и

H) или рассматривая (для магнитного поля) топологические скачки векторного потенциала.

2. Аналогом формулы (4) для кристалла, содержащего дислокационные петли макроскопического радиуса, является соотношение (см. [11], §29)

$$w_{ik} = W_{ik} - d_{ik}n, \tag{5}$$

где w_{ik} и W_{ik} – тензоры, соответственно, упругой и полной дисторсии, $d_{ik} = s_i b_k$ – дислокационный момент петли, s – вектор ее геометрической площади, b – вектор Бюргерса, n – число петель в единице объема. Тензор W_{ik} является аналогом $\mathbf{v}_s$, поскольку он является градиентом вектора u геометрического смещения среды: $W_{ik} = \nabla_i u_k$. Тензор w_{ik} определяет точные периоды $\mathbf{a}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha^{(0)} + \delta\mathbf{a}_\alpha$, $\alpha = 1, 2, 3$, решетки кристалла в состоянии термодинамического равновесия, которому соответствует однородное распределение дефектов по объему: $\delta a_{\alpha i} = w_{ki} a_{\alpha k}^{(0)}$. Здесь $\mathbf{a}_\alpha^{(0)}$ – периоды в недеформированном состоянии в отсутствие дефектов. Для кристалла с малой концентрацией точечных дефектов периоды $\mathbf{A}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha^{(0)} + \delta\mathbf{A}_\alpha$, где $\delta A_{\alpha i} = W_{ki} a_{\alpha k}^{(0)}$, также имеют непосредственный физический смысл [3]. Это есть периоды решетки в пространстве между дефектами вдали от каждого из них. Методы рентгеноструктурного анализа, в принципе, позволяют определить (см. [1], §26) оба набора периодов. Пластическая дисторсия равна изменению $\delta(d_{ik}n)$ плотности дислокационного момента в процессе деформирования. Так как поворот кристалла как целого не сопровождается перераспределением дефектов и пластической деформацией, фактически необходимо знать симметричную часть $p_{ik} = 1/2(d_{ik} + d_{ki})$ дислокационного момента. Ниже мы выведем уравнение (5), симметризованное по индексам i и k, и тем самым вычислим p_{ik} для любых точечных дефектов.

Аналогом формулы (1) для кристалла является асимптотика упругого смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ на больших расстояниях от дефекта (см. [2]):

$$\mathbf{u}_i(\mathbf{r}) = E_{kl}\nabla_k G_{il}(\mathbf{r}), \tag{6}$$

где $G_{ik}(\mathbf{r})$ – тензор Грина уравнений равновесия кристалла, $E_{ik} = \partial E/\partial u_{ik}$ – симметричный тензор, $E = E(u_{ik})$ – зависящая от деформации энергия дефекта. Аналогом формулы (2) является соотношение

$$< u_i(z) >= N\int u_i(\vec{\rho}, z)d^2\rho = iNE_{zk}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dk_z}{2\pi}k_z e^{ik_z z}G_{ik}(0,0,k_z),$$

где $G_{ik}(\mathbf{k})$ – компоненты Фурье тензора Грина, удовлетворяющие уравнению $\lambda_{imnl}k_m k_n G_{lk}(\mathbf{k}) = \delta_{ik}$, λ_{iklm} – тензор упругих модулей. Простое интегрирование дает

$$< u_i(z) >= -\frac{1}{2}\frac{z}{|z|}Ng_{ik}E_{zk},$$

где g_{ik} – матрица, обратная матрице λ_{izzk}.

Топологический скачок смещения $< \delta u_i >$ определяется формулой

$$\lambda_{izzk} < \delta u_k >= -E_{iz}n\delta l,$$

откуда в силу произвольности выбора направления оси z получаем

$$\lambda_{ilmk}\{\nabla_m < u_k > - < \nabla_m u_k >\} = -E_{il}n.$$

Полагая

$$w_{ik} =< \nabla_i u_k >, \qquad W_{ik} = \nabla_i < u_k >,$$

находим

$$u_{ik} = U_{ik} - p_{ik}n, \tag{8}$$

где u_{ik} и U_{ik} есть симметричные части соответственно w_{ik} и W_{ik}. Симметризованный тензор дислокационного момента p_{ik} точечного дефекта определяется универсальной формулой $E_{ik} = -\lambda_{iklm}p_{lm}$. Тот факт, что зависимость энергии дислокационной петли макроскопического радиуса от деформации определяется этой формулой, хорошо известен (см. [11], §28). Наше утверждение заключается в том, что любой дефект, энергия которого, естественно, зависит от деформации, имеет определяемый этой формулой ненулевой p_{ik}.

Упорядочение кристалла с точечными дефектами, в частности, термоактивированными, концентрация которых пропорциональна $\exp(-E/T)$, характеризуется наличием двух наборов периодов $\mathbf{a}_\alpha$ и $\mathbf{A}_\alpha$ (аналогично двум скоростям $\mathbf{v}$ и $\mathbf{v}_s$ в сверхтекучей жидкости). Периоды $\mathbf{A}_\alpha$ не являются реальными периодами средней плотности частиц, однако в слабо неоднородных состояниях кристалла именно их изменение в пространстве определяется тензором дисторсии W_{ik}, являющимся градиентом $\nabla_i u_k$ вектора смещения $\mathbf{u}$. Корреляционная функция флуктуаций смещения $\Delta\mathbf{u}$

$$< [\Delta u_i(\mathbf{L}) - \Delta u_i(0)][\Delta u_k(\mathbf{L}) - \Delta u_k(0)] >= K_{ik}(\mathbf{L})$$

конечна при $|\mathbf{L}| \to \infty$, что является критерием кристаллического дальнего порядка.

Значения реальных периодов средней плотности $\mathbf{a}_\alpha$ в слабо неоднородных состояниях определяются тензором дисторсии w_{ik}, не являющегося градиентом какого-либо вектора смещения. Это порождает пластичность кристалла, которая аналогична вихревому характеру скорости $\mathbf{v} = \mathbf{j}/\rho$ несжимаемой сверхтекучей жидкости.

В модельных гамильтонианах, описывающих свойства поверхности кристалла [8], вводится периодический потенциал решетки, который в качестве своих периодов должен иметь реальные периоды решетки $\mathbf{a}_\alpha$. Физическая реальность такого потенциала может быть оправдана в случае, если корреляционная функция флуктуаций дисторсии Δw_{ik}

$$Q_{ik}(\mathbf{L}) =< (\int_0^{\mathbf{L}} \Delta w_{li} dx_l)(\int_0^{\mathbf{L}} \Delta w_{mk} dx_m) >,$$

где интегралы берутся вдоль прямых, соединяющих $\mathbf{r} = \mathbf{L}$ и $\mathbf{r} = 0$, конечна при $|\mathbf{L}| \to \infty$. Однако флуктуации концентрации Δn точечных дефектов разрушают такой периодический потенциал. Действительно, пренебрегая некритическими флуктуациями ΔW_{ik}, имеем

$$Q_{ik}(\mathbf{L}) =< \int_0^{\mathbf{L}} \Delta u_{il} dx_l \int_0^{\mathbf{L}} \Delta u_{km} dx_m >=$$

$$= p_{il}p_{km}\frac{L_l L_m}{L^2}\int\limits_0^L dz\int\limits_0^L dz' < \Delta n(0,z)\Delta n(0,z') >=$$

$$= p_{il}p_{km}\frac{L_l L_m}{L^2}L\frac{\bar{n}}{a^2},$$

где $\bar{n}$ – средняя концентрация критических дефектов, a – величина порядка межатомного расстояния. Для термоактивированных дефектов имеем $Q_{ik}(L) \propto Le^{-E/T}$. Такой механизм разрушения "периодического потенциала решетки" был предложен ранее [6], однако в качестве критических дефектов рассматривались сложные дефекты с неизвестным E. Теперь можно утверждать, что точечные дефекты с минимальной энергией (вакансии для кристаллов ^{4}He) являются критическими. Термодинамически равновесная огранка кристаллов не может существовать при конечных температурах, а фазовые переходы, сопровождающиеся появлением кинетической (неравновесной) огранки, связаны с обращением в нуль коэффициента роста кристалла на особых гранях.

Выражаю благодарность Дж.Фроссати за полезное обсуждение работы.

---

1. М.А.Кривоглаз, *Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами*, М.: Наука, 1967.
2. J.D.Eshelby, In: *Solid State Physics*, **3**, Academic Press, NY, 1956, p.113. Русский перевод: Дж.Эшелби, *Континуальная теория дислокаций*, М.: ИИЛ, 1963, стр.57.
3. A.F.Andreev, Ya.B.Bazaliy, and A.D.Savischev, JLTP **88**, 101 (1992).
4. R.Feder and A.S.Nowick, Phys. Rev. **B 5**, 1244 (1972).
5. R.Feder and A.S.Nowick, Phys. Rev. **B 5**, 1238 (1972).
6. А.Ф.Андреев, Письма в ЖЭТФ **52**, 1204 (1990).
7. E.Rolley, E.Chevalier, C.Guthmann, and S.Balibar, Phys. Rev. Lett. **72**, 872 (1994); JLTP **99**, 851 (1995).
8. P.Nozieses, In: *Solids Far from Equilibrium*, ed. C.Godreche, Cambridge University Press (1991).
9. A.V.Babkin, H.Alles, P.J.Hakonen, et al., JLTP (in press).
10. Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский, *Статистическая физика*, ч.2, М.: Наука, 1978, задача 1 к §29.
11. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Теория упругости*, М.: Наука, 1965.