

PACS: 64.70.Kb, 75.50.Cc

Л.С. Метлов^{1,2}, А.Г. Петренко²

ДИНАМИЧЕСКИЕ И РЕЛАКСАЦИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МАГНИТНЫХ И СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

²Донецкий национальный университет

Статья поступила в редакцию 14 мая 2018 года

Систематизированы различные варианты динамических и релаксационных уравнений. Показано, в каких случаях можно прибегнуть к более простым уравнениям чисто релаксационного типа Ланжевена. На базе этих уравнений осуществлено моделирование влияния на структурный фазовый переход упругих колебаний и показано, что за счет подбора амплитуды и поляризации колебаний весь кристалл можно перевести в однодоменное структурное состояние, что может сопровождаться излучением мощного акустического импульса.

Ключевые слова: магнитные и структурные фазовые переходы, динамические и релаксационные уравнения, уравнение Ланжевена, акустический импульс

Введение

В теории структурных фазовых переходов большой интерес вызывает возможность проследить непрерывное изменение основных магнитных и структурных характеристик, таких как параметры порядка, восприимчивости и др., при переходе через критические точки в процессе охлаждения или нагрева [1,2]. С этой целью можно использовать уравнения типа Ланжевена [3]:

$$\left(\partial_t^2 - \nabla^2\right)\Phi(x) + \frac{\delta V}{\delta \Phi(x)} + \Phi(x) = \zeta(x, t), \quad (1)$$

где Φ – скалярное поле (параметр порядка), V – термодинамический потенциал, ζ – стохастическая функция типа «белого шума». Здесь первые два слагаемые описывают динамическую часть задачи, фактически – упругие волны. Третье и четвертое слагаемые описывают релаксационную часть задачи (уравнение Гинзбурга–Ландау [4]). Случайная функция моделирует либо тепловые флуктуации, либо случайные упругие шумы, связанные, например, с импульсными процессами и акустической эмиссией при формировании структурных доменов.

При прохождении через критические точки большую роль начинают играть флуктуации. Для строгого описания флуктуаций в критической области

необходимо использовать неоднородное уравнение Гинзбурга–Ландау, однако последнее зависит от времени и пространственных координат, и построение таких характеристик в четырехмерном пространстве на обычных серийных компьютерах весьма проблематично. Поэтому представляет интерес ограничиться однородными уравнениями типа Ландау–Халатникова, но ввести в них некоторые случайные источники и стоки параметров порядка.

Вторая часть проблемы связана с динамикой системы, которая может влиять на параметры порядка и изменять характер фазового перехода. В теории магнитных фазовых переходов таким уравнением, которое сочетает динамические и релаксионные аспекты проблемы, является уравнение Ландау–Лифшица. Это уравнение не выводится ни из каких общих экстремальных принципов, а является, скорее, эмпирическим.

В теории структурных фазовых переходов в феноменологическом описании в качестве параметра порядка (вторичного) фигурирует тензор деформации. Он является мерой отклонения, с одной стороны, от термодинамического равновесия и высшей симметрии кристалла (например, кубической), а с другой – от механического равновесия. При этом в последнем случае само равновесное механическое состояние зависит от того, в какой термодинамической фазе находится кристалл.

1. Динамические и релаксионные уравнения для магнитных фазовых переходов

Уравнение Ландау–Лифшица является примером уравнения, в котором объединены динамическая и релаксионная части движения вектора намагниченности \mathbf{M} в континуальном приближении [5,6]:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma \left[\mathbf{M} \times \mathbf{H}^{\text{eff}} \right] + \frac{\alpha}{M} \left[\mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \right]. \quad (2)$$

Здесь γ , α – соответственно гироскопическая и релаксионная постоянные; M – модуль намагниченности; \mathbf{H}^{eff} – эффективное магнитное поле:

$$\mathbf{H}^{\text{eff}} = -\frac{\delta F}{\delta \mathbf{M}} \quad (3)$$

(где F – свободная энергия магнетика); первое слагаемое описывает динамические процессы, второе – релаксионные. В уравнении (2) релаксионный член записан в форме Гильберта.

В сферической системе координат уравнению (2) можно придать форму Смита–Сула [7,8]:

$$\frac{\gamma}{M} \frac{\partial F}{\partial \theta} - \sin \theta \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \alpha \frac{\partial \theta}{\partial t} = \gamma h_{\theta}, \quad \frac{\gamma}{M \sin \theta} \frac{\partial F}{\partial \varphi} + \frac{\partial \theta}{\partial t} + \alpha \sin \theta \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \gamma h_{\varphi}, \quad (4)$$

где θ , φ – соответственно полярный и азимутальный углы вектора намагниченности; h_{θ} , h_{φ} – соответственно полярная и азимутальная компоненты внешнего магнитного поля.

В случае сверхтонких пленок железиттриевого граната справедливо соотношение $\theta \sim \pi/2$, и тогда уравнения (4) упрощаются:

$$\frac{\gamma}{M} \frac{\partial M}{\partial \theta} - \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \alpha \frac{\partial \theta}{\partial t} = \gamma h_{\theta}, \quad \frac{\gamma}{M} \frac{\partial M}{\partial \varphi} + \frac{\partial \theta}{\partial t} + \alpha \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \gamma h_{\varphi}. \quad (5)$$

В отсутствие внешнего магнитного поля магнитный момент будет прецессировать вокруг равновесного значения, релаксируя к нему. Разрешив уравнения относительно производных по времени, получим

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\gamma}{M} \left(\frac{\partial F}{\partial \varphi} - \alpha \frac{\partial F}{\partial \theta} \right), \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\gamma}{M} \left(\frac{\partial F}{\partial \theta} - \alpha \frac{\partial F}{\partial \varphi} \right). \quad (6)$$

Первые слагаемые в скобках описывают быстрые динамические (прецессионные) процессы, вторые слагаемые, пропорциональные α , – медленные эволюционные (релаксационные) процессы. Скорость установления динамического магнитного равновесия порядка скорости света, скорость установления термодинамического равновесия значительно ниже, поскольку требует согласованного формирования равновесия в объеме. По этой причине выполняется неравенство $\alpha \ll 1$. При таком соотношении вторыми слагаемыми в (6) в нулевом приближении можно пренебречь, и получим прецессионное вращение намагниченности вокруг равновесного состояния.

Если в правые части (6) добавить случайные источники магнитного поля, моделирующие тепловые флуктуации или механические шумы, то эти уравнения примут вид

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\gamma}{M} \left(\frac{\partial F}{\partial \varphi} - \alpha \frac{\partial F}{\partial \theta} \right) + T f_{\theta}(t), \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\gamma}{M} \left(\frac{\partial F}{\partial \theta} - \alpha \frac{\partial F}{\partial \varphi} \right) + T f_{\varphi}(t), \quad (7)$$

где T – температура; $f_{\theta}(t), f_{\varphi}(t)$ – случайные функции времени соответствующей компоненты параметра порядка, например, типа «белого шума». В целом согласно (6) магнитная система будет совершать прецессионные движения, медленно релаксируя к равновесному состоянию. На это движение будут накладываться случайные флуктуации, которые могут как удалять систему от равновесного состояния, так и приближать к нему. Поскольку случайный фактор не имеет выделенного направления, а релаксационные процессы действуют всегда в направлении положения равновесия, в конечном итоге система придет в среднем к равновесному состоянию.

Так как в уравнениях (6) одновременно присутствуют вклады от медленно и быстро протекающих процессов, а временной шаг в численных расчетах следует выбирать в соответствии с самым быстрым процессом, описание процессов релаксации оказывается излишне детальным. Если же нас интересуют не детали динамического движения, а только процессы релаксации, то мы можем опустить первые слагаемые в (6), оставив лишь релаксационные вклады. Физически это означает, что нас не интересует, с какой именно фа-

зы динамического движения флуктуация «срывает» систему из данного текущего (неравновесного) состояния, и в какое именно состояние она его переводит, поскольку каждая флуктуация, по крайней мере в приближении «белого шума», статистически не зависит от других флуктуаций. В этом случае, опуская в (7) динамические вклады, получаем

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\gamma_k \frac{\partial F}{\partial \theta} + T f_\theta(t), \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\gamma_k \frac{\partial F}{\partial \varphi} + T f_\varphi(t), \quad (8)$$

где $\gamma_k = \alpha\gamma / M$ – кинетический коэффициент для данной задачи.

Уравнения (8) без случайных источников флуктуаций $f_\theta(t)$ и $f_\varphi(t)$ фактически представляют собой уравнения Ландау–Халатникова по каждому из компонентов θ и φ параметра порядка. Строго говоря, эти уравнения справедливы только вдали от критических точек. Действительно, правые части (8) представляют собой баланс обобщенных термодинамических сил и флуктуаций. В критических точках обобщенные термодинамические силы обращаются в нуль, что приводит к росту амплитуды и плотности флуктуаций. Последние начинают взаимодействовать между собой, и тогда следует учитывать неоднородные вклады [4].

В то же время для качественного анализа кинетики фазовых переходов, включающих прохождение критических точек при повышении или понижении температуры, можно по-прежнему ограничиться однородными уравнениями (8), подобрав более высокие амплитуды тепловых флуктуаций. Основанием для этого могут служить те соображения, что динамический (временной) хаос, мерой которого является термодинамическая температура T , и статический (пространственный) хаос, мерой которого может служить плотность энергии структурных дефектов [9] (в их качестве можно рассматривать сами флуктуации), являются взаимодополняющими субстанциями. Поэтому влияние пространственной неоднородности задачи можно учесть, заменив в однородных уравнениях (7) и (8) термодинамическую температуру T некоторой эффективной температурой T_{eff} с более высоким значением. Такой прием очень часто применяется в теории аморфных сплавов [10].

Строго говоря, в рамках однородных уравнений (2)–(8) нельзя рассмотреть задачу для массивных магнетиков в полной постановке с описанием формирования доменной структуры. Однако в рамках этих уравнений вполне можно рассматривать вопросы формирования доменов в локальных областях, меньших по размеру радиуса корреляции. При наличии в термодинамическом потенциале нескольких (в общем случае неэквивалентных) минимумов в низкосимметричной фазе с помощью уравнений (2)–(8) можно оценить вероятность формирования доменов в соответствии с их глубиной на всех стадиях фазового перехода.

3. Динамические и релаксационные уравнения для структурных фазовых переходов

В качестве примера структурных фазовых переходов рассмотрим кристаллы кубической симметрии типа сплавов Гейслера, испытывающих фазовый переход из кубической фазы точечной симметрии O_h в тетрагональную D_{4h} [11]. Отклонение от кубической симметрии для них можно охарактеризовать вторичным параметром порядка в форме тензора деформации ϵ_{ij} [12,13]. В общем случае неоднородной задачи структурная часть свободной энергии F_s представляет собой функционал от кубических инвариантов многокомпонентного параметра порядка [12,13]:

$$F_s = F_0 + \frac{1}{2} \int \left[g \left((\nabla e_2)^2 + (\nabla e_3)^2 \right) + a(e_2^2 + e_3^2) + \frac{2}{3} b e_3 (e_3^2 - 3e_2^2) + \frac{1}{2} c (e_2^2 + e_3^2)^2 \right] dV, \quad (9)$$

где F_0 – константа, не зависящая от параметра порядка; g – константа, отвечающая за неоднородный характер структурного перехода; a, b, c – константы, отвечающие за структурный переход в однородных областях; e_2, e_3 – соответственно сдвиговая и дилатансионная компоненты тензора деформации. По остальным компонентам тензора деформации проведена процедура минимизации, и используются их равновесные значения. Однородная часть свободной энергии включает инварианты второй, третьей и четвертой степеней, для описания неоднородной части ограничились минимальной, второй, степенью.

Внешние однородные воздействия можно учесть, вводя в (9) дополнительные слагаемые, учитывающие взаимодействие внешних сил и параметров порядка:

$$F = F_s + \sigma_2(t) e_2 + \sigma_3(t) e_3, \quad (10)$$

где $\sigma_2(t)$ и $\sigma_3(t)$ – соответствующие компоненты тензора внешних напряжений, зависящих от времени. В частности, они могут быть гладкими синусоидальными функциями при моделировании упругих (ультразвуковых) колебаний либо случайными функциями при моделировании тепловых флуктуаций или механических шумов [1,2].

Эволюционные уравнения, следующие из (9) и (10), можно записать в виде

$$\frac{\partial e_2}{\partial t} = -\Gamma_{22} \frac{\partial F}{\partial e_2} - \Gamma_{23} \frac{\partial F}{\partial e_3}, \quad \frac{\partial e_3}{\partial t} = -\Gamma_{32} \frac{\partial F}{\partial e_2} - \Gamma_{33} \frac{\partial F}{\partial e_3}, \quad (11)$$

где Γ_{ik} – кинетические коэффициенты ($i, j = 2, 3$). Если пренебречь перекрестными эффектами между параметрами порядка e_2 и e_3 , то в явном виде будем иметь

$$\begin{aligned} \tau_2 \frac{\partial e_2}{\partial t} &= g \Delta e_2 - e_2 \left[a - 2b e_3 + c (e_2^2 + e_3^2) \right], \\ \tau_3 \frac{\partial e_3}{\partial t} &= g \Delta e_3 - a e_3 - b e_3^2 + b e_2^2 - c e_3 (e_2^2 + e_3^2), \end{aligned} \quad (12)$$

где $\tau_2 = 1/\Gamma_{22}$ и $\tau_3 = 1/\Gamma_{33}$ – соответствующие времена релаксации. Отметим, что при положительных значениях коэффициента g приведенные уравнения представляют собой уравнения диффузионного типа с источниками и стоками (алгебраическая часть уравнения) для соответствующих параметров порядка.

Если, как и в предыдущем разделе, интересоваться установлением термодинамического равновесия в локальных областях, то можно ограничиться однородной моделью $g = 0$:

$$\begin{aligned} \tau_2 \frac{\partial e_2}{\partial t} &= -e_2 \left[a - 2be_3 + c(e_2^2 + e_3^2) \right], \\ \tau_3 \frac{\partial e_3}{\partial t} &= -ae_3 - be_3^2 + be_2^2 - ce_3(e_2^2 + e_3^2). \end{aligned} \quad (13)$$

Деформация, входящая в качестве параметра порядка в (9)–(13), характеризует меру отклонения от кубической симметрии. Ее не следует путать с механической деформацией, характеризующей меру отклонения от механического равновесия. В равновесном состоянии деформация в (9) в низко-симметричной фазе (мартенсите) не равна нулю, однако она не сопровождается механическими напряжениями. Только дополнительная деформация, отличающаяся от равновесной для каждой фазы, может вызвать одновременно как термодинамическую силу, направленную на восстановление равновесного состояния, так и механические напряжения, в том числе сопровождающиеся волновыми процессами.

Представляет отдельный интерес исследовать влияние ультразвука на кинетику мартенситного фазового перехода. Согласно симметрии задачи при температурах ниже температуры абсолютной неустойчивости мартенсита T_A свободная энергия имеет три эквивалентных минимума (см. [1,2] и рис. 1,а). Если выбрать поляризацию колебаний в направлении одного из минимумов, то в процессе охлаждения при определенной температуре колебания перебросят систему через потенциальный барьер из аустенитного минимума в тот из мартенситных минимумов, в направлении которого поляризованы колебания. Соответствующие выражения амплитуд упругих колебаний будут иметь следующий вид для поляризации колебания в направлениях

– минимума 1:

$$\sigma_2 = 0, \quad \sigma_3 = A \sin(\omega_0 t); \quad (14)$$

– минимума 2:

$$\sigma_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} A \sin \omega_0, \quad \sigma_3 = \frac{1}{2} A \sin(\omega_0 t); \quad (15)$$

– минимума 3:

$$\sigma_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2} A \sin \omega_0, \quad \sigma_3 = \frac{1}{2} A \sin(\omega_0 t). \quad (16)$$

Соответствующие кинетические кривые приведены на рис. 1,б,в,г. Из рисунка видно, что при заданной амплитуде колебаний «срыв» системы из ау-

стенитного состояния в мартенситное происходит при одной и той же температуре, лежащей чуть ниже T_A на интервале лабильности. Колебания параметра порядка имеют низкочастотную модуляционную составляющую. Из приведенных графиков следует, что, подобрав соответствующую амплитуду и поляризацию акустической (ультразвуковой) волны, можно, в принципе, весь кристалл перевести в однодоменное мартенситное состояние. При этом такой синхронизированный переход будет сопровождаться излучением мощной звуковой волны по принципу лазера.

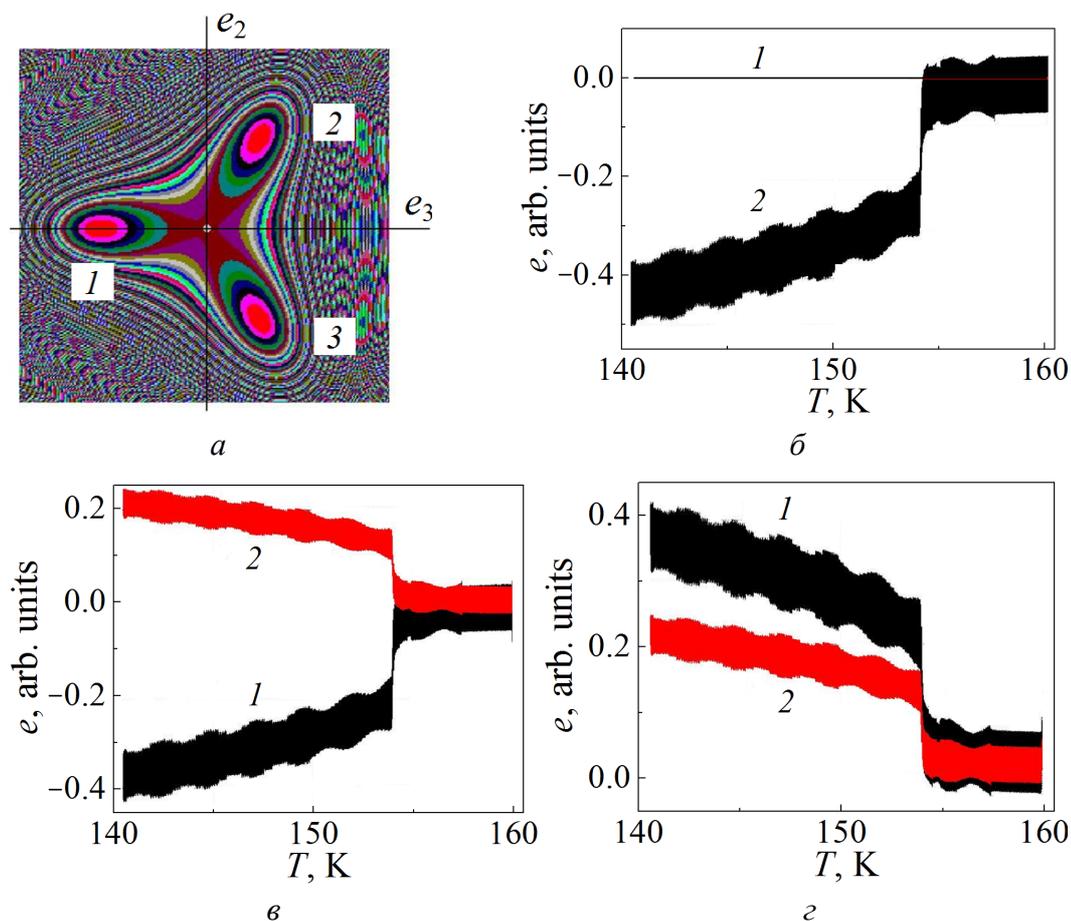


Рис. 1. Влияние ультразвука на инициацию фазовых переходов: *a* – рельеф свободной энергии; 1, 2, 3 – номера минимумов свободной энергии; *б*, *в*, *з* – кинетика фазового перехода при поляризации колебаний в направлениях минимумов 1, 2 и 3 соответственно

Заключение

1. На основании уравнений Ландау–Лифшица записаны различные модификации динамических и релаксационных уравнений для магнитных фазовых переходов. Для упрощенных быстрых расчетов удобным является чисто релаксационное уравнение типа Ланжевена, представляющее собой уравнение типа Ландау–Халатникова, дополненное источниками и стоками параметра порядка в форме случайной силы.

2. Для структурных фазовых переходов динамические эффекты учитываются посредством введения в свободную энергию дополнительных слагаемых, отвечающих за влияние внешних сил (напряжений). При моделировании влияния на структурный фазовый переход упругих колебаний показано, что при снижении температуры из области аустенитного состояния ниже температуры T_A в области лабильности можно за счет подбора амплитуды и поляризации колебаний весь кристалл одновременно перевести в однодоменное мартенситное состояние, что должно вызвать излучение мощного акустического импульса.

1. Л.С. Метлов, В.В. Коледов, В.Г. Шавров, ФТВД **28**, № 1, 46 (2018).
2. Л.С. Метлов, В.Д. Пойманов, ФТВД **28**, № 1, 62 (2018).
3. L.M.A. Bettencourt, Phys. Rev. **D63**, 045020 (2001).
4. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, Флуктуационная теория фазовых переходов, Наука, Москва (1982).
5. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, К теории дисперсии магнитной проницаемости ферромагнитных тел, Е.М. Лифшиц (ред.), Наука, Москва (1969), т. 1, с. 128.
6. В.Г. Шавров, В.И. Щеглов, Магнитостатические и электромагнитные волны в сложных структурах, Т. 1, Физматлит, Москва (2016).
7. J. Smith, H.G. Beljers, Philips Res. Rep. **10**, 113 (1955).
8. А.Г. Гуревич, Г.А. Мелков, Магнитные колебания и волны, Наука, Москва (1994).
9. Л.С. Метлов, Вестник Донецкого университета. Сер. А: Естественные науки № 2, 169 (2006).
10. B.B. Straumal, A.A. Mazilkin, S.G. Protasova, D.V. Gunderov, G.A. López, B. Baretzky, Materials Letters **161**, 735 (2015).
11. А.Д. Божко, А.Н. Васильев, В.В. Ховайло, Е. Дикштейн, В.В. Коледов, С.М. Селецкий, А.А. Тулайкова, А.А. Черечукин, В.Г. Шавров, ЖЭТФ **115**, 1740 (1999).
12. M.A. Fradkin, Phys. Rev. **B50**, 16326 (1994).
13. A.N. Vasil'ev, A.D. Bozhko, V.V. Khovailo, I.E. Dikshtein, V.G. Shavrov, V.D. Buchelnikov, M. Matsumoto, S. Suzuki, T. Takagi, J. Tani, Phys. Rev. **B59**, 1113 (1999).

L.S. Metlov, A.G. Petrenko

DYNAMICAL AND RELAXATION EQUATIONS FOR MAGNETIC AND STRUCTURAL PHASE TRANSITIONS

Different variants of dynamical and relaxation equations are systematized. It is shown when one can resort to simpler equations of purely relaxation Langeven type. On the basis of the equations, a simulation of elastic vibration influence on structural phase transition is executed. It is demonstrated that at the expense of selection of amplitude and polarization vibrations, the whole crystal can be transited to a single-domain structural state accompanied by power acoustic impulse.

Keywords: magnetic and structural phase transitions, dynamical and relaxation equations, Langeven equation, acoustic impulse

Fig. 1. Ultrasound effect on the initiation of the phase transitions: a – shape of the free energy; 1, 2, 3 – numbers of the free energy minima; δ , ϵ , ζ – kinetics of phase transition when the oscillations are polarized in the directions of minima 1, 2 and 3, respectively