

АКУСТИЧЕСКИЙ АНАЛОГ РЕЗОНАНСА ФЕРМИ**М.И.Кацнельсон*, А.П.Платонов, А.В.Трефилов***** Институт физики металлов Уральского отделения РАН
620219 Екатеринбург, Россия****Российский научный центр "Курчатовский институт"
123182 Москва, Россия**

Поступила в редакцию 21 декабря 1998 г.

После переработки 1 февраля 1999 г.

Показано, что для акустических волн в кристаллах могут иметь место нелинейные явления нового типа, аналогичные до некоторой степени резонансу Ферми в молекулах. На основе анализа результатов численного решения соответствующих уравнений движения продемонстрировано, что при распространении волн разной поляризации с кратным соотношением скоростей звука перекачка энергии из одной волны в другую носит характер биений при достаточно малых амплитудах и может становиться хаотической при их возрастании.

PACS: 43.25.+y, 63.10.+a

Общеизвестно, что ангармонические эффекты (АЭ) в динамике кристаллических решеток приводят к сдвигу частоты и затуханию фононов [1, 2]. Появления каких-то качественно новых черт естественно ожидать прежде всего в тех случаях, когда для некоторых мод колебаний потенциал является сильно ангармоническим, например, двухъямным [3–5]. При этом могут возникать новые ветви элементарных возбуждений, например, солитоны [3], появляться дополнительные "нефононные" пики в спектре неупругого рассеяния нейтронов [5], и т. д. Однако традиционная картина может оказаться неадекватной также в случае слабых АЭ при условии "резонансных" соотношений между частотами фононов в определенных точках зоны Бриллюэна [6–8]. Такая ситуация, по-видимому, реализуется для точек высокой симметрии в фононных спектрах ряда металлов, например, для ОЦК фаз щелочных и щелочноземельных металлов – в точке $(2/3, 2/3, 2/3)$ [6]. Она до некоторой степени аналогична известному в физике молекул случаю "резонанса Ферми" [9, 10]. Однако для металлов интерес представляет прежде всего классический предел $T \gg \hbar\omega$ (где ω – характерная частота фононов, T – температура), который оказывается гораздо более богатым, чем ультраквантовый предел, реализующийся для молекул, состоящих из легких атомов, и рассмотренный Ферми. В частности, в классическом пределе возникает нетривиальная низкочастотная динамика (квазистатические смещения), связанная с перекачкой энергии между модами, участвующими в резонансе. Настоящая работа посвящена рассмотрению АЭ при взаимодействии звуковых волн с кратным (резонансным) соотношением скоростей звука (до сих пор рассматривалось лишь взаимодействие такого рода между осцилляторами, а не волнами, распространяющимися в пространстве). Переход к этому случаю открывает новые возможности для экспериментального исследования соответствующих нелинейных резонансных явлений, так как гораздо проще изменять амплитуду, фазу и другие существенные характеристики для акустических волн, чем для фононов с конечными волновыми векторами.

С формальной точки зрения, задача о взаимодействии волн существенно отличается от задачи о взаимодействии отдельных осцилляторов тем, что в первом случае необходимо решать систему дифференциальных уравнений в частных производных, а во втором – обыкновенных дифференциальных уравнений. Разумеется, при численном решении уравнения в частных производных сводятся к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, однако число их существенно увеличивается.

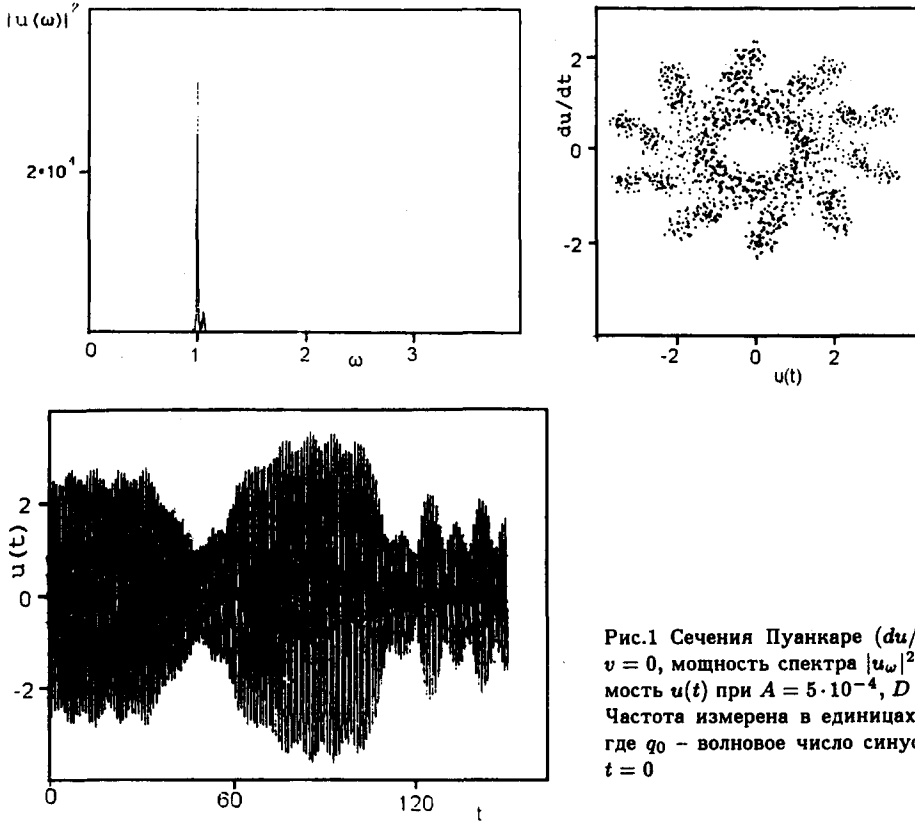


Рис.1 Сечения Пуанкаре ($du/dt, u$) при $v = 0$, мощность спектра $|u_\omega|^2$ и зависимость $u(t)$ при $A = 5 \cdot 10^{-4}$, $D = 2 \cdot 10^{-4}$. Частота измерена в единицах $\omega_0 = q_0$, где q_0 – волновое число синусоиды при $t = 0$

Прежде всего укажем реальные объекты, в которых может быть реализована ситуация "акустического резонанса Ферми", то есть кратного соотношения скоростей звука. Достаточно просто указать кристаллы с соотношением скоростей звука 1:1 и 1:3. В обоих случаях речь идет о поперечных акустических волнах, распространяющихся в направлении $\langle 110 \rangle$ в кубических кристаллах, когда $c_1 : c_2 = \sqrt{C'/C_{44}}$, где C' , C_{44} – два независимых модуля сдвига. К таким кристаллам относятся, например, щелочные металлы вблизи температуры плавления, для которых $C'/C_{44} \approx 1/9$ и $c_1 : c_2 = 1/3$, и сплавы $W_{1-x}Re_x$, $Mo_{1-x}Re_x$, в которых $C' \approx C_{44}$ при малых x . Мы исследовали наиболее детально модель 1:1. Соответствующая плотность лагранжиана может быть записана в виде

$$L = 1/2(\dot{u}^2 + \dot{v}^2) - 1/2(u'^2 + v'^2) - Au'^2v'^2 + 1/2D(u'^4 + v'^4), \quad (1)$$

где $u(t, x)$, $v(t, x)$ – смещения волн, точка означает производную по времени t , а штрих – по пространственной координате x , и мы учли ангармонические члены,

описывающие простейшие АЭ "межмодового" (А) и "внутримодового" (D) типов. При проведении расчетов использовались периодические граничные условия, $u(x+L) = u(x)$, $v(x+L) = v(x)$, где L - размер моделируемого "кристалла", производные по x заменялись конечными разностями. Начальные условия выбирались в виде простых синусоидальных волн с различными случайными сдвигами фаз между u -волной и v -волной, при этом максимальные значения $|u'|$ и $|v'|$ в начальный момент времени равнялись единице.

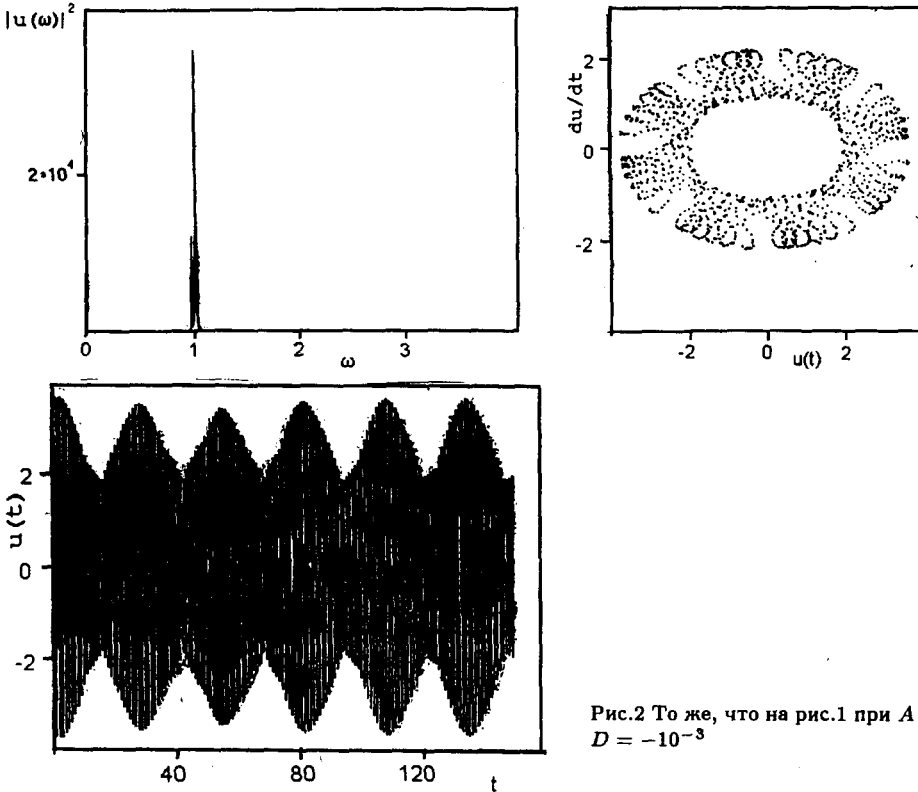


Рис.2 То же, что на рис.1 при $A = 5 \cdot 10^{-4}$, $D = -10^{-3}$

Поведение системы при различных значениях констант взаимодействия иллюстрируется результатами, приведенными на рис.1-4 (показано поведение $u(t)$ при фиксированном x ; из расчетов следует, что поведение $u(x)$ при фиксированном t подобно). При $A < 10^{-3}$ возникают биения между u - и v -волнами, которые являются квазипериодическими, как это наглядно видно из сечений Пуанкаре. Подчеркнем, что эти биения являются чисто нелинейным эффектом, так как мы рассматриваем случай строго равных скоростей волн. При этом в спектре скоростей звука (частот) возникает расщепление основного пика при скорости, равной 1, которое является аналогом расщепления частот осцилляторов при резонансе Ферми [10]. С увеличением константы межмодовой ангармонической связи A основной максимум спектра Фурье уширяется, и появляются обертоны вблизи целочисленных значений скорости. При больших значениях A "перекачка" энергии между u - и v -волнами становится хаотической, при этом точки на сечении Пуанкаре более или менее равномерно заполняют часть фазовой плоскости, а спектр Фурье, в соответствии с этим, становится

широкополосным. Это поведение слабо чувствительно к значению внутримодовой константы связи D , как это и следует из общего качественного анализа роли различных ангармонических членов, проведенного в [7]. Отметим также, что при не слишком большой расстройке скоростей картина качественно сохраняется.

Аналогичные расчеты были выполнены также для модели 1:3 с плотностью лагранжиана

$$L = 1/2(\dot{u}^2 + \dot{v}^2) - 1/2(u'^2 + 9v'^2) - Au'v'^3, \quad (2)$$

в которой оставлены лишь "резонансные" ангармонические члены, ответственные за перекачку энергии между модами при слабом ангармонизме. Поведение оказалось качественно подобно исследованному для модели 1:1. Отметим, что неустойчивость синусоидальной волны почти при всех начальных условиях в модели (2) может быть доказана аналитически [7].

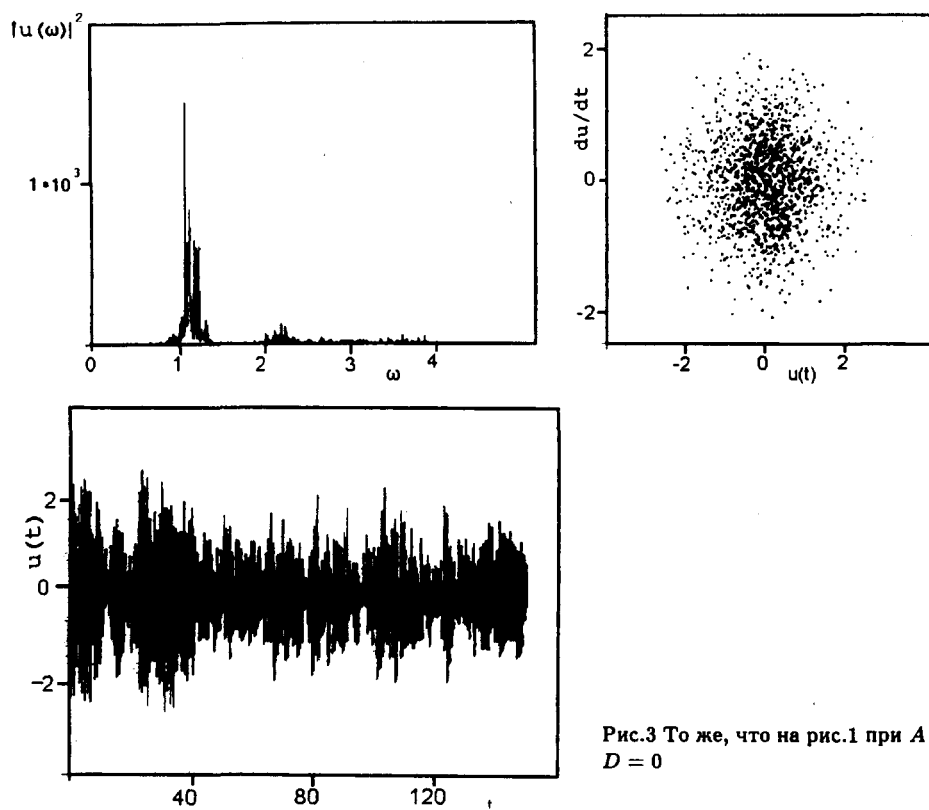


Рис.3 То же, что на рис.1 при $A = 5 \cdot 10^{-3}$, $D = 0$

Экспериментально резонансное взаимодействие акустических волн можно было бы наблюдать, возбуждая их в соответствующих кристаллах (примеры которых приведены выше). При существенном отклонении скоростей звука от кратных соотношений при изменении температуры или концентрации примесей картина должна упрощаться, сводясь к обычным "линейным" биениям. По-видимому, расщепление скоростей звука можно наблюдать и в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов, где оно будет проявляться как аномально сильное уширение соответствующих ветвей фононного спектра в акустической области. При этом, однако, мы

имеем дело с тепловыми колебаниями и возникает вопрос о влиянии взаимодействия с термостатом на описанные здесь явления. Для случая резонансного взаимодействия осцилляторов, согласно [8], тепловой шум не разрушает резонанс Ферми, хотя картина становится более сложной. Сам факт сложной картины перекачки энергии между различными модами и неустойчивости синусоидальных волн заведомо сохраняется и при учете взаимодействия с термостатом. Качественные соображения о возможной роли "резонансной" неустойчивости звуковых волн в сценарии плавления обсуждались в [7]. Было бы интересно проверить их путем включения теплового шума в исследованные здесь модели; при этом возникает нетривиальная в методическом отношении проблема решения стохастических уравнений в частных производных. Предварительные результаты проведенных нами расчетов свидетельствуют о качественной справедливости полученных здесь результатов и при учете взаимодействия с термостатом.

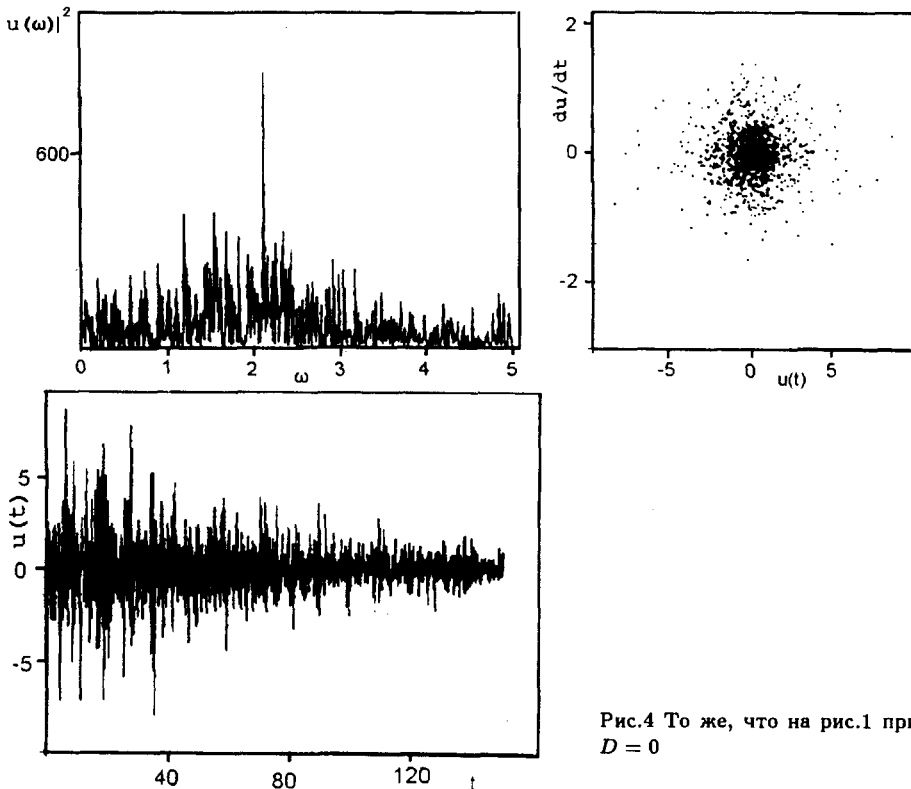


Рис.4 То же, что на рис.1 при $A = 0.5$, $D = 0$

В заключение остановимся коротко на вопросе о возможности экспериментального наблюдения предсказанных в работе эффектов. Конкретный режим колебаний для обсуждаемых кристаллов, то есть характер перекачки энергии, зависит от амплитуды колебаний и величины расстройки соответствующих скоростей звука. Для определенности рассмотрим более подробно случай резонансного соотношения скоростей звука 1:1, который реализуется, например, для поперечных акустических волн, распространяющихся в направлении $\langle 110 \rangle$ в кристаллах сплавов W-Re, Mo-Re. В зависимости от концентрации рения соотношение скоростей звука может быть как

несколько больше, так и несколько меньше единицы; масштаб отношения C'/C_{44} , а следовательно, и отношение квадратов соответствующих скоростей звука составляет величину порядка 15% при изменении концентрации рения x в этих сплавах в интервале $0 \leq x \leq 0.2$ [11]. При этом масштаб изменения C'/C_{44} с ростом температуры от комнатной до плавления при фиксированной концентрации имеет тот же порядок ($\approx 10\%$) [11]. Таким образом, "тонкая доводка" этого соотношения может осуществляться с помощью изменения температуры. При этом в некотором интервале расстройки будут наблюдаться рассматриваемые здесь резонансные явления, а при большей расстройке будет происходить переход к режиму обычных линейных биений. Можно ожидать, по аналогии с моделью для осцилляторов с отношением частот 1:2 [6, 8], что критическое значение расстройки скоростей должно быть порядка нескольких процентов. При этом эксперимент состоял бы в одновременном возбуждении двух поперечных волн с различной поляризацией и в исследовании перекачки энергии между ними, например, с помощью измерения соответствующих спектральных характеристик для каждой из этих волн в зависимости от их амплитуды, определяемой внешним воздействием, и от расстройки скоростей. Аналогично, соотношение скоростей 1:3 может быть реализовано, то есть отношения модулей сдвига $C'/C_{44} \approx 1/9$ для этих звуковых волн в монокристаллах щелочных металлов вблизи температуры плавления (см. [7]); расстройка может быть в этом случае достигнута понижением температуры.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант # 98-02-16219).

-
1. R.A.Cowley, Adv. Phys. **12**, 421 (1963).
 2. В.Г.Вакс, С.П.Кравчук, А.В.Трефилов, УФН **155**, 159 (1988).
 3. J.A.Krumhansl and J.R.Schrieffer, Phys. Rev. **B11**, 3535 (1975).
 4. К.-М.Но, С.Л. Фу, and B.N.Harmon, Phys. Rev. **B29**, 1575 (1984); Y.-Y.Ye et al, Phys. Rev. Lett. **58**, 1769 (1987).
 5. Ю.Н.Горностырев, М.И.Кацнельсон, А.В.Трефилов, Письма в ЖЭТФ **56**, 512 (1992); Yu.N.Gornostyrev, M.I.Katsnelson, A.V.Trefilov, and S.V.Tret'jakov, Phys. Rev. **B54**, 3286 (1996).
 6. М.И.Кацнельсон, А.В.Трефилов, Письма в ЖЭТФ **45**, 496 (1987); ЖЭТФ **97**, 1892 (1990).
 7. М.И.Кацнельсон, А.В.Трефилов, ФММ **64**, 629 (1987).
 8. Ю.Н.Горностырев, М.И.Кацнельсон, А.П.Платонов, А.В.Трефилов, ЖЭТФ **107**, 925 (1995); Phys. Rev. **B51**, 12817 (1995).
 9. E.Fermi, Z. Phys. **71**, 250 (1931).
 10. М.П.Лисица, А.М.Яремко, Резонанс Ферми, Киев: Наук. думка, 1984.
 11. Yu.N.Gornostyrev, M.I.Katsnelson, A.V.Trefilov, and R.F.Sabiryanov, The Physics of Metals and Metallography **74**, 421 (1992).