

УДК 621.215.592

ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНА ВЗАЄМОДІЯ В ШАРУВАТИХ КРИСТАЛАХ

В.М. Стахіра

Внаслідок розпорядкування в шаруватих кристалах спостерігається поява дипольного електричного моменту окремого шару, зумовленого електронною підсистемою в ньому. Обґрунтовано реалізацію нелінійних хвиль у результаті взаємодії диполів сусідніх шарів.

Вследствие разупорядочения в слоистых кристаллах наблюдается наличие дипольного электрического момента единичного слоя, обусловленного его электронной подсистемой. Обосновано реализацию нелинейных волн в результате взаимодействия диполей близлежащих слоев.

Визначальними факторами фізичних властивостей кристалів є їх склад і структура. Причиною деяких специфічних властивостей шаруватих кристалів може бути слабка взаємодія між атомами сусідніх шарів порівняно з їх взаємодією у середині шару, що проявляється в електронних і термодинамічних властивостях. Суттєво різні енергії міжатомних взаємодій у середині шарів і між ними дозволяють розглядати незалежно окремі шари як квазізамкнуту підсистему і структурну одиницю. Стан електронної підсистеми в кожному з шарів може описуватись власною хвильовою функцією ψ і відповідною енергією ϵ .

Тепловий рух в шаруватих кристалах відрізняється від руху атомів у звичайних кристалах через те, що відхилення окремого шару з положення рівноваги призводить до суттєвого порушення трансляційної симетрії відносно електронної підсистеми. Внаслідок слабого зв'язку між групами сильно взаємодіючих атомів різних шарів з'являється можливість зміщення шару як цілого з положення рівноваги на величину ρ_n . Це спричиняє зміну потенціалу вздовж напрямку осі Z , спрямованої по нормалі до площини шарів, і перехід кристала в квазірозпорядкований стан відносно електронної підсистеми.

Вплив внутрікристалічного поля на електронну підсистему проявляється в переорієнтації частини електронів уздовж осі Z , що викликає виникнення дипольного моменту шару. Поле диполя n -го шару, в свою чергу, спричиняє переорієнтацію електронів сусідніх шарів, створюючи в них свої дипольні моменти.

Внаслідок взаємодії між диполями сусідніх шарів може спостерігатись зміщення їх з положення рівноваги, а відтак виникнення диполь-дипольної взаємодії між шарами, яка передається впоперек шарів. Результатом такої взаємодії може бути переорієнтація упаковки шарів, тобто утворення їх асоціатів, що є аналогічним політипізму.

Таким чином, крім ван-дер-ваальсівської взаємодії, між шарами виникає диполь-дипольна взаємодія, яка величиною зрівнюється з нею, передається вздовж нормалі до шарів і може реалізовуватись як хвильовий процес зміни відстані між шарами.

Порушення трансляційної симетрії супроводжується збудженням електронної підсистеми шарів. У результаті сильного зв'язку цих збуджень з коливаннями шарів у кристалі реалізується хвильовий процес, період якого значно перевищує сталу основної ґратки, а характер залежить від сили електрон-фонного зв'язку ступеня взаємодії між шарами та величини диполь-дипольної взаємодії.

Зміна рівноважної відстані між шарами являє собою нелінійну хвилю, яка описується виразом через одну з еліптичних функцій Якобі. Характеристики цієї хвилі досить складним чином виражаються через коефіцієнти, що описують властивості кристала, зокрема через коефіцієнти, що описують взаємодію n -го шару з найближчими сусідами: L , D_0 . Суттєво впливає на амплітуду хвилі зміна коефіцієнта резонансної взаємодії L та коефіцієнта, який характеризує жорсткість кристала W . При їх зростанні амплітуда хвилі зменшується, що свідчить про затруднення в утворенні асоціатів шарів.

Аналіз нелінійних хвиль, які можуть реалізовуватись в кристалі, показав, що період хвилі може змінюватись від декількох до сотень сталих основної ґратки d_z , при зміні сталої Co від 5 до 1. Слід відзначити, що хвиля дуже чутлива до зміни параметрів кристала і в дуже багатьох випадках маємо нестійкі розв'язки. Оптимальні значення параметрів для одержання стійкої хвилі, коли A і C сумірні, $B \sim 0$, $5A$; пакети шарів, які при цьому утворюються, є стабільними.

При знаходженні розв'язків зміни рівноважної відстані між шарами ρ вводиться константа Co , яка, в основному, залежить від початкових умов і значно впливає на період хвилі, при $Co > 1$ період різко зменшується.

Приймаючи $Co \rightarrow 0$, одержимо

$$\frac{d^2 F}{d\xi^2} = AF - BF^3 + CF^5, \quad (1)$$

де $\xi = \frac{z}{d_z}$ — безрозмірна координата.

Розв'язок рівняння (1) при умові $0 < A < \frac{9D}{64\alpha L}$ має вигляд

$$\rho(\xi - \nu t) = \frac{4A}{B} \cdot \frac{1}{1 + \frac{\sqrt{A\chi}}{\operatorname{ch}(2B\sqrt{\chi}(\xi - \nu t))}}, \quad (2)$$

$$\text{де } \chi = \frac{1}{16A} - \frac{4\alpha L}{9D}; \quad B = \frac{D_0}{2WL}; \quad C = \frac{\alpha D_0^2}{12W^2 L}.$$

Формула (2) являє собою нелінійні локалізовані збудження в околі точки координат $\xi = \xi_0 \pm \nu t$. Цей вираз відтворює вигляд одиничної потенціальної ями, яка охоплює багато шарів. Відстань між окремими ямами досить велика. Наявність таких локалізованих збуджень приводить до появи в шаруватих кристалах додаткового потенціалу впоперек шарів з періодом, що значно перевищує сталу ґратки. Цей потенціал впливає на електронну підсистему окремого шару і суттєво змінює їх енергетичний спектр.