

Изменение D_f и C_∞ приводит к вариации степени локального порядка, характеризуемой относительной долей областей этого порядка (кластеров) ϕ_{kl} согласно уравнению:

$$D_f = 3 - 6 \left(\frac{j_{kl}}{SC_\infty} \right)^{1/2}, \quad (6)$$

где S - площадь поперечного сечения макромолекулы ($S = \text{const}$).

Из уравнения (6) следует рост ϕ_{kl} по мере снижения D_f , т.е., структура становится более плотноупакованной. Эти структурные изменения определяют различие объемной полимерной матрицы и межфазных слоев.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chen J.S., Poliks M.D., Ober C.K., Zhang Y., Wiesner U., Giannelis E. //Polymer. - 2002. - V. 43, № 19. - P. 4895.
2. Козлов Г.В., Маламатов А.Х., Антипов Е.М., Яновский Ю.Г. //Механика композиционных материалов и конструкций. - 2006. - Т. 12, № 1. - С. 114.
3. Yoon P.J., Hunter D.L., Paul D.R. //Polymer. - 2003. - V. 44, № 21. - P. 5323.
4. Vilgis T.A., Haronska P., Benhamou M. //J. Phys. II. France. - 1994. - V. 4, № 12. - P. 2187.

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД "ДИЭЛЕКТРИК - МЕТАЛЛ" В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ ПРИ ВСЕСТОРОННЕМ СЖАТИИ

Мамчуев М.О., Карпенко С.В.
НИИ прикладной математики
и автоматизации КБНЦ РАН,
Нальчик

Переход "диэлектрик-металл" под действием высокого давления в кристаллах имеет место в основном в результате усиливающегося взаимодействия между атомными валентными орбиталями, которое уширяет энергетические зоны и в конечном итоге предельно сужает энергетическую щель между валентной зоной и зоной проводимости.

Модель решетки диэлектрической фазы ионного кристалла. При описании термодинамики фазы ионного кристалла будем исходить из модели идеальной кристаллической решетки, имеющей структуру типа CsCl (B2-структура), состоящую из точечных зарядов разного знака [1]. Температуру будем считать равной абсолютному нулю. Термодинамический потенциал ионной решетки имеет вид

$$G_{B2}(R) = U_{B2}(R) - \frac{a_m}{R} + pV_1, \quad (1)$$

где $a_m = 1.76268$ - постоянная Маделунга B2-структуры; $U_{B2}(R)$ - потенциал парного взаимодействия ионов, рассчитанный самосогласованным образом в рамках теории неоднородного электронного газа [2]. В работах [1, 3] термодинамический потенциал ионного кристалла был построен с учетом взаимодействия ионов семи координационных сфер. В уравнение для термодинамического потенциала кристалла мало-

го размера необходимо добавить член, описывающий поверхностную энергию кристалла:

$$G_{B2} = G_{B2}^{(об)} + G_{B2}^{(пог)}. \quad (2)$$

Здесь $G_{B2}^{(об)}$ - объемная часть термодинамического потенциала, $G_{B2}^{(пог)} = 4pr^2ks$ - поверхностная часть термодинамического потенциала, S - поверхностная энергия; r - радиус «кристаллического зерна»; k - численный коэффициент, учитывающий отклонение формы кристалла от идеальной сферической (в случае идеального сферического кристалла $k = 1$). В данной работе мы использовали метод предложенный Темроковым и Задумкиным для расчета поверхностной энергии и поверхностного натяжения ионных кристаллов [2]. Суть метода заключается в том, что кристалл разбивается на плоские сетки и суммирование в выражении для поверхностной энергии производится по совокупности таких сеток.

Итак, термодинамический потенциал диэлектрической фазы ионного кристалла записывается следующим образом:

$$G_{Bi} = \sum_{k=1}^7 N_k^{(i)} U_k^{(i)} (a_k^{(i)} R^{(i)}) - V^{(i)} \frac{1}{V^{(i)}} \left[\sum_{k=1}^7 N_k^{(i)} U_k^{(i)} (a_k^{(i)} R^{(i)}) \right] - \frac{a_m^{(i)}}{R^{(i)}} + 2pr^2 kn_0 (hkl) \sum_i (b^{(i)} - 1) W_\infty^{(i)} \quad (3)$$

Модель металлизированной фазы ионного кристалла. При нулевом внешнем давлении структура типа NaCl (B1) является стабильной. Затем, при достижении точки полиморфного превращения, осуществляется фазовый переход к структуре типа CsCl (B2-структура). В малой окрестности давления металлизации $p_{мет}$ термодинамические потенциалы диэлектрической и металлизированной фаз равны. При дальнейшем увеличении давления более стабильной становится металлизированная фаза. Далее, упоминая первую фазу, будем иметь в виду диэлектрическую фазу со структурой типа CsCl, а под второй фазой - металлизированное состояние кристалла. В расчетах предполагалось, что для первой фазы поверхность имеет огранку (110) с минимальным значением поверхностной энергии. Расчет ее термодинамического потенциала проводился по формуле (3) для случая $T = 0$ К.

При вычислении термодинамического потенциала металлизированной фазы используется (для объемной части) модель Гомбоша [4], удовлетворительно описывающая свойства щелочных металлов, а также модель "желе" [4] для расчета поверхностного вклада в потенциал.

Объемная часть термодинамического потенциала второй фазы при $p \neq 0$ записывается как

$$G_{mv} = N(U_m - \frac{\partial U_m}{\partial V_m} V_m). \quad (4)$$

Для полного термодинамического потенциала кристалла кубической формы с учетом (3) и (4) получим следующее выражение:

$$G_2 = G_{mv} + AN + 6d_m^2 s_m N,$$

G_{mv} - объемная часть термодинамического потенциала второй фазы при $p \neq 0$, s_m - поверхност-

ная энергия металлизированной фазы, рассчитываемая по формуле, полученной в модели "желе" [4] без учета вклада ионной подрешетки и дискретности ионов, A - потенциал родства электрона хлору, d_m - сторона куба кристалла во второй фазе.

Давление металлизации можно определить из условия равенства термодинамических потенциалов диэлектрической и металлизированной фаз:

$$G_1 = G_2 \quad (5)$$

Минимизируя термодинамические потенциалы фаз и определяя межионные расстояния при данном внешнем давлении, в результате решения уравнения (5) на ЭВМ были определены давления «металлизации» для ряда щелочно-галогидных кристаллов. Результаты расчета для массивных образцов демонстрируют хорошее согласие наших результатов с экспериментальными данными. Для всех исследованных кристаллов наблюдается значительное возрастание давления металлизации с уменьшением размера кристалла.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия отечественной науке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Карпенко С.В., Винокурский Д.Л., Кяров А.Х., Темроков А.И. //Поверхность. 2003. № 7. С.96.
2. Ухов В.Ф., Кобелева Р.М., Дедков Г.В., Темроков А.И. Электронно-статистическая теория металлов и ионных кристаллов. М.: Наука. 1982, 104 С.
3. Карпенко С.В., Винокурский Д.Л., Кяров А.Х., Темроков А.И.//Доклады РАН. 2001. Т. 381. № 6. С. 756.
4. Мотт Н.Ф. Переходы металл - изолятор. М.: Наука, 1979. 342 с.

СИЛА РЕАКЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ В НОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ

Меньшов Е.Н.

Ульяновский государственный
технический университет,
Ульяновск

Сила реакции излучения это та сила, которая действует на заряженную частицу со стороны создаваемого ей поля электромагнитного излучения. В классической электродинамике с этой силой связано внутреннее противоречие, что указывает на неполноценность данной теории. В работе [1] приведена формула этой силы f_s , выведенная в рамках модернизированной электродинамики, но только для частного случая ускоренного движения заряда. В этом сообщении демонстрируется общий случай. В основу метода вывода положена типовая феноменологическая методика определения силы реакции излучения через мощность излучения P_0 .

При вычислении мощности излучения нас будет интересовать поле на больших расстояниях от заряда и в пределе при $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t)| \rightarrow \infty$, тогда положим $R \approx r(1 - \mathbf{e}_r \mathbf{r}_0/r) \rightarrow r$, $\mathbf{e}_R \rightarrow \mathbf{e}_r = \mathbf{r}/r$. Мощность через элемент сферической поверхности dS равна

$$dP_0 = (\Pi_0 dS) = (\Pi_0 \mathbf{e}_r) r^2 \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{q^2 \sin \theta d\theta d\varphi}{16\pi^4 \epsilon_0 c^3 (2t)^2} \int_0^t e^{\left(\frac{x-t}{t}\right)}.$$

$$\cdot \left(\frac{\mathbf{v}_1}{l_1} - \frac{\mathbf{v}_2}{l_2} \right) \left(\frac{\mathbf{v}_1(x)}{l_1(x)} - \frac{\mathbf{v}_2(x)}{l_2(x)} \right) dx$$

где $\Pi_0 = [\mathbf{E}_{из} \mathbf{H}_{из}]$ - вектор Пойтинга, при этом уравнения для $\mathbf{E}_{из}$, $\mathbf{H}_{из}$ приведены в [2]; θ - угол между векторами $\mathbf{e}_r$ и $\mathbf{v}$; ψ - азимутальный угол; $\lambda_1 = 1 - (\mathbf{e}_r \mathbf{v}_1)/c$; $\lambda_2 = 1 - (\mathbf{e}_r \mathbf{v}_2)/c$; $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}(t'_1)$; $\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}(t'_2)$; $\mathbf{e}_{R1} = \mathbf{R}_1/R_1$; $\mathbf{e}_{R2} = \mathbf{R}_2/R_2$; $R_1 = R(t'_1)$; $R_2 = R(t'_2)$.

Рассмотрим ускорение по прямой со скоростями ($v/c \ll 1$), при этом имеем: $(\mathbf{e}_r \mathbf{e}_v) = \cos \theta$; $\mathbf{v}_1 = v_1 \mathbf{e}_v$; $\mathbf{v}_2 = v_2 \mathbf{e}_v$, где $\mathbf{e}_v = \mathbf{v}/v$. Полная излучаемая мощность

$$P_0 = \frac{q^2}{6\pi^3 \epsilon_0 c^3} \left(\frac{\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2}{2t} \right) \int_0^t e^{\left(\frac{x-t}{t}\right)} \left[\frac{\mathbf{v}_1(x) - \mathbf{v}_2(x)}{2t} \right] dx \quad (1)$$

Формула (1) не зависит от R , поэтому она правоправна в любой точке, в том числе и на границе области генерации поля излучения ($R = R_m$), [2].

Из уравнения движения заряда $dR/dt = d|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t)|/dt = -(\mathbf{R}\mathbf{v})/R = -(\mathbf{e}_R \mathbf{v})$ устанавливаем связь между расстоянием $R(t)$ от заряда до наблюдателя и параметрами движения в разные опорные моменты времени:

$$R(t) = R(0) - \int_0^t (\mathbf{v} \mathbf{e}_R) dt,$$

$$R(t) = R(t') - \int_{t'}^t (\mathbf{v} \mathbf{e}_R) dt \quad (2)$$

В работе [2] изучен характер излучения поля на разных этапах времени от начала ускорения. Задавая $R(t) = R_m = \pi t c$ и $t_{rp} = R(0)/c + \pi t$ из [2], получаем выражение:

$$R_m \approx R(0) [1 - (\mathbf{v} \mathbf{e}_R)_{cp} / c] - \pi t (\mathbf{v} \mathbf{e}_R)_{cp},$$

из которого (при условии $v/c \ll 1$) следуют соотношения $R(t'_1) \approx R_m$, $R(0) \approx R_m$ в запаздывающие моменты времени. Подставляя их в формулы для t_{rp} и t'_1 из [2], имеем:

- для этапа $0 \leq t \leq R(0)/c + \pi t \approx 2\pi t$; $t'_1 = 0$; $t'_2 = t$;
- для этапа $t > R(0)/c + \pi t \approx 2\pi t$; $t'_1 = t - \pi t - R(t'_1)/c \approx t - 2\pi t$, $t'_2 \approx t$.

Подставляя теперь полученные моменты времени в (1), получаем законы излучения.

Определяем силу реакции излучения f_s . В классической электродинамике сила реакции излучения выводится из баланса между работой, произведенной этой силой над зарядом и энергией излучения на интервале времени T , за который заряд возвратился бы в исходное состояние движения. Так как выражение (1) содержит затухающую экспоненту по времени, тогда возврат в исходное состояние возможен на бесконечном пределе времени, начиная с момента времени $t_A \rightarrow \infty$ до $t_B = t_A + T$

$$\int_{t_A}^{t_A+T} \mathbf{v} f_s dt = - \int_{t_A}^{t_A+T} P_0 dt. \quad (3)$$