

## ВЛИЯНИЕ ВАКАНСИОНОВ НА СТРУКТУРУ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

*Д.И. Пушкарёв*

Показано, что при определенных условиях делокализация вакансии в квантовом кристалле должна сопровождаться локальным фазовым расслоением и образованием области свободной от примесей.

Превращение точечного дефекта (вакансии, примеси и т. д.) в дефектон (вакансион, примесон и т. д.) в идеальном кристалле связано с уменьшением энергии кристалла [1, 2]. При этом дно дефектонной зоны располагается ниже энергии кристалла с локализованным дефектом на величину равную полуширине дефектонной зоны. Если полуширина зоны окажется больше энергии активации дефекта (нулевые дефектоны), то это должно привести к перестройке основного состояния кристалла [1]. Однако, как будет показано ниже, даже если ширина зоны  $\epsilon$  меньше энергии активации, наличие дефектонов может существенным образом повлиять на конфигурацию атомов решетки. В результате может измениться распределение примесей вокруг вакансии, а также возможно локальное фазовое расслоение.

Рассмотрим квантовый кристалл типа твердого гелия, содержащего вакансию и изотопические примеси с безразмерной концентрацией  $x$ . Вообще говоря энергия такой системы зависит от распределения примесей и окружения вакансии в решетке. В случае малых концентраций изотопических примесей и локализованной вакансии, очевидно, этой зависимостью можно пренебречь. Однако картина меняется существенно если учесть, что для образования вакансионна требуется хорошая периодичность решетки. Таким образом, следует ожидать, что вокруг вакансии возникнет область "очищенной" от примесей. Подобная ситуация возникает при образовании флуктуонов [3, 4] и магнитно упорядоченных областях вокруг вакансий в  $^3\text{He}$  [5]. Поскольку ширина вакансионной зоны много больше ширины примесонной зоны, то времена, за которые вакансион подстраивается к данной конфигурации примесей

много меньше времени изменения этой конфигурации. Если  $T \ll \epsilon$  закон дисперсии вакансиона квадратичен и его эффективная масса  $m^* = \hbar^2/2A$ , где  $A$  — амплитуда вероятности перехода вакансии в соседний узел (постоянная решетки  $a = 1$ ). Энергию вакансиона захваченного в области размера  $R$  можно оценить из соотношения неопределенности:

$$E = \epsilon_0 + \pi^2 \frac{A}{R^2},$$

где  $\epsilon_0$  — энергия дна вакансионной зоны. Тогда свободная энергия

$$F = E - TS = \epsilon_0 + \pi^2 \frac{A}{R^2} - Ts \frac{4}{3} \pi R^3,$$

где  $s$  — энтропия, отнесенная к одной ячейке. Если концентрация примесей настолько мала, что их можно рассматривать как идеальный газ,

то  $s = x \ln \frac{x}{e}$ , а в более общем случае "решеточного" газа

$$s = x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x).$$

Размер "очищенной" от примесей области можно определить из условия минимума свободной энергии. Таким образом находим

$$R = \left| \frac{\pi A}{2 Ts} \right|^{1/5}, \quad F_{min} = \epsilon_0 + \frac{10\pi}{3} \left( \frac{\pi A}{2} \right)^{3/5} T^{2/5} |s|^{2/5}.$$

Условием применимости полученного соотношения является неравенство  $R \gg 1$ , т. е.  $A \gg |Ts|$ , что обеспечивается условием использования эффективной массы. Таким образом наличие вакансионов должно стимулировать фазовое расслоение растворов  $\text{He}^3 - \text{He}^4$ . С другой стороны наличие примесей влияет на равновесную концентрацию вакансий  $|n_v|$ . В самом деле

$$n_v \sim e^{-\frac{F}{T}} = \exp \left\{ -\frac{\epsilon_0}{T} - \frac{10\pi}{3} \left( \frac{\pi A}{2T} \right)^{3/5} |s|^{2/5} \right\}.$$

Наличие вакансионов может вызвать также локальное фазовое расслоение, если ширины вакансионных зон в двух фазах сильно отличаются, а теплота перехода мала. Такая ситуация, по-видимому, возникает для двух фаз  $\text{He}^4$  (ГПУ и ОЦК). Как было показано в [6] ширина вакансионной зоны зависит экспоненциально от числа ближайших соседей, и, следовательно, должна сильно изменяться при переходе от одной фазы в другую. Если в области размера  $R$  вокруг вакансии возникнет новая фаза, то изменение свободной энергии будет

$$\Delta F = \Delta \epsilon_0 + \frac{\pi^2 A}{R^2} - T \Delta s \frac{4}{3} \pi R^3,$$

где  $\Delta\epsilon_0$  — смещение дна вакансионной зоны, а  $\Delta s$  — разность энтропии в двух фазах. Учитывая, что  $T\Delta s$  есть теплота перехода  $q$ , получаем

$$R = (\pi A/2q)^{1/5}.$$

Поскольку теплота перехода на частицу  $q \sim 10^{-2} \text{К}$ , а ширина зоны порядка  $10 \text{К}$ , то в объеме новой фазы окажется  $\sim 10^2$  атомов. Конечно, это может сильно повлиять на подвижность вакансий, которая теперь будет определяться кинетикой фазового перехода.

Институт физики твердого тела  
Болгария

Поступила в редакцию  
13 февраля 1978 г.

### Литература

- [1] А.Ф. Андреев, И.М. Лифшиц. ЖЭТФ, 56, 2057, 1969.
  - [4] Д.И. Пушкарлов. ЖЭТФ, 59, 1755, 1970; 68, 1471, 1975.
  - [3] И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул. ЖЭТФ, 57, 2209, 1969.
  - [4] М.А. Кривоглаз. ФТТ, 11, 2230, 1969.
  - [5] А.Ф. Андреев. Письма в ЖЭТФ, 24, 608, 1976.
  - [6] Д.И. Пушкарлов. ФНТ, 1, 581, 1975.
-