

Физика

УДК 548.0.53+539.145

О. П. АНИСИМОВА, Г. А. ВАРДАНЯН, Д. М. СЕДРАКЯН

НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ВАКАНСИЙ
 В ТВЕРДОМ РАСТВОРЕ $\text{He}^3\text{—He}^4$

Исследованы некоторые свойства вакансий в твердом растворе $\text{He}^3\text{—He}^4$. Обсуждена возможность возникновения вакансионных кластеров и показано, что при $T \sim \Delta$ вакансии всегда локализована.

Рассмотрены также вращающийся вакансионный газ и влияние равновесной деформации решетки на вакансию.

В твердом растворе $\text{He}^3\text{—He}^4$ в области температур T ; $J \ll T \ll \Delta$ (J —энергия обменного взаимодействия, ϵ —характерная энергия взаимодействия атомов He^4 , Δ —ширина энергетической зоны вакансии) возникают вакансии [1, 2], представляющие собой макроскопические квазичастицы, структура и свойства которых рассматривались в работе [2]. Было показано, что если n_3, n_4 —концентрации $\text{He}^3\text{—He}^4$ соответственно, то, когда $n_4 \gg n_3$ образуются макроскопические области со строго периодической структурой решетки, откуда полностью вытеснены атомы He^3 . При концентрациях $n_3 \gg n_4$, происходит обратное условие: из сферы вытесняются атомы He^4 , причем спины атомов He^3 внутри сферы—вакансиона строго упорядочены. Одновременно с упорядочением происходит делокализация вакансии, которая обеспечивает энергетическую выгодность всего процесса. В работе [2] были вычислены радиусы сфер в случаях $n_3 \gg n_4$ и $n_4 \gg n_3$, которые соответственно равны:

$$R_1 = \left(\frac{\pi \Delta}{4T(\ln 2 + x)} \right)^{1/\epsilon} a,$$

$$R_2 = \left(\frac{\pi \Delta}{4Tx} \right)^{1/5} a,$$

где $x = \frac{n_3}{n_4}$, a —межатомное расстояние.

Настоящая работа посвящена дальнейшему изучению свойств вакансий.

1. Влияние рассеяния на поведение квазичастиц. Пусть длина λ вакансиона является самой большей характерной величиной, превышающей радиус действия потенциала $V = v_0 \left(\frac{a}{r} \right)^3$; $R_0 = \left(\frac{V_0}{\Delta} \right)^{1/3} a$. В этом

случае условие возникновения макроскопически упорядоченной области может быть выражено через амплитуду рассеяния вакансиона на атоме. Оказывается, что вследствие рассеяния вакансии связываются с атомами внутри некоторой макроскопической области. Такая возможность, очевидно, обусловлена конкуренцией потенциала «непроницаемости» и дальнедействующего притяжения. В противном случае вакансии могут равномерно распределиться по всему кристаллу. Отметим, что такое явление может служить способом получения локальных областей в кристалле, обладающих большой концентрацией вакансий.

Аналогичный эффект имеется в случае ионов в кристалле. Действительно, конкуренция потенциала «непроницаемости» иона и атомов в один и тот же узел решетки с поляризационным потенциалом взаимодействия приводит к следующему явлению: ион делокализуется в макроскопической области радиуса R . Может оказаться так, что из этой области отрицательный ион вытеснит атомы кристалла и делокализуется в упорядоченной области, содержащей только вакансии.

Как в случае ионов, так и в случае вакансий наше утверждение легко доказывается. Рассмотрим случай ионов. Изменение свободной энергии имеет вид

$$\Delta F = K + U + T\Delta S, \quad (1.1)$$

где K —кинетическая энергия, U —потенциальная энергия, ΔS —изменение энтропии, обусловленное упорядочением

$$\Delta S = -\ln \bar{W} = -\frac{U^2}{2\bar{U}^2} \quad (1.2)$$

(здесь W —плотность вероятности величины U , пропорциональной $\exp(-U^2/2\bar{U}^2)$, \bar{U}^2 —дисперсия случайного поля).

Минимизируя ΔF относительно U , получим

$$\Delta F = K - \frac{\beta}{2}\bar{U}^2; \quad \beta = \frac{1}{T}. \quad (1.3)$$

Отсюда можно определить размер R^0 сферы, в которой существует упорядочение при фиксированной температуре:

$$R^0 = \frac{4\sqrt{\pi\alpha}}{aR_0}, \quad (1.4)$$

где α —поляризуемость, a —постоянная решетки.

Отметим, что область применимости данного приближения определяется условиями:

$$R^0 \gg R_0, \quad NR^{03} \gg 1.$$

В самом простом случае отрицательный ион, например, может представлять собой заряженную вакансию.

2. *Равновесные вакансии.* Рассмотрим твердый раствор He^3 — He^4 при концентрациях $\left(\frac{T}{\Delta}\right)^{1/5} < x \ll 1$. Энергия вакансии в этой области концентраций равна

$$E_0 = \epsilon_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mR^2} + x \frac{4\pi}{3} R^3 n_4 T, \quad (2.1)$$

где ε_0 —энергия дна энергетической зоны вакансии, а второе и третье слагаемые—ее кинетическая энергия и энергия вытеснения атомов He³ из области радиуса R . Третье слагаемое в выражении для энергии объясняется энергетической выгодностью делокализации вакансии в данном процессе.

Запишем свободную энергию как функцию от числа вакансий $F(N_v)$ в приближении «идеального» газа [3]:

$$F_0 = N_v E_0(R) - N_v T \ln \left[\frac{eN}{N_v} v \left(\frac{MT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right]. \quad (2.2)$$

Здесь N —число узлов решетки, v —объем элементарной ячейки, M —масса вакансии $M \sim \frac{\hbar^2}{\Delta a^2}$.

Равновесное число вакансий определяется из условия минимизации свободной энергии. После дифференцирования (2.2) по N_v имеем

$$\frac{\partial F}{\partial N_v} = E_0 - T \ln \frac{eN}{N_v} v \left(\frac{MT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} + T. \quad (2.3)$$

Отсюда для N_v получаем

$$N_v^0 \sim N \left(\frac{T}{\Delta} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{E_0}{T} \right). \quad (2.4)$$

В области концентраций $10^{-1} \ll x < 1$, что соответствует слабому раствору He⁴ в He³, энергия вакансии равна [2]

$$F_1 = \varepsilon_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mR^2} + \frac{4\pi}{3} R^3 n_s T \ln 2 + x \frac{4\pi}{3} R^3 n_s T. \quad (2.5)$$

Второе слагаемое представляет собой энергию упорядочения спинов атомов He³ внутри вакансионной сферы. С учетом энергии нулевых вакансий [4] свободная энергия этой системы в больцмановском приближении есть

$$F_1 = N_v E_1 - N_v T \ln \left[\frac{eN}{N_v} v \left(\frac{MT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] - \frac{\pi^{3/2} N_v^2 \hbar^3}{N_v T^{1/2} M^{3/2}}. \quad (2.6)$$

Из (2.2), (2.6) следует, что равновесное число вакансий N_v^1 в системе (2.6) отличается от N_v^0 на малый экспоненциальный множитель

$$N_v^1 \sim N_v^0 \exp \left[-\left(\frac{\pi\Delta}{T} \right)^{3/2} \frac{1}{N} \right]. \quad (2.7)$$

Энергия локализованной вакансии определяется формулой

$$F = N_v E(R) - N_v T \ln \left(e \frac{N}{N_v} \right). \quad (2.8)$$

Из (2.4), (2.7) и (2.8) следует, что при $T \sim \Delta$ равновесные числа вакансий одного порядка $N_v^1 \sim N_v$. Это означает, что при $T \sim \Delta$ вакансия всегда локализована.

3. Вращающийся вакансионный газ. Если поместить систему с идеальным газом вакансий во вращающийся цилиндрический сосуд радиу-

са R и длины l , это приведет к изменению свободной энергии [5] на величину

$$\Delta F = -N_v T \ln \frac{1}{V} \int_0^R \exp\left(-\frac{M\omega^2 r^2}{2T}\right) dV. \quad (3.1)$$

Здесь r —расстояние вакансии от оси вращения, ω —угловая скорость вращения сосуда.

После интегрирования (3.1) получаем

$$\Delta F = -N_v T \ln \left\{ \frac{2T}{M\omega^2 R^2} \left[\exp\left(\frac{M\omega^2 R^2}{2T}\right) - 1 \right] \right\}. \quad (3.2)$$

Если считать, что $M\omega^2 R^2 \sim \Delta$, то при $T \ll \Delta$

$$\Delta F = -N_v \Delta - N_v T \ln \frac{T}{\Delta}. \quad (3.3)$$

Учитывая, что $M \sim \frac{\pi^2}{\Delta a^2}$, условие $M\omega^2 R^2 \sim \Delta$ перепишем в виде

$$(\pi\omega)^2 \left(\frac{R}{a}\right)^2 \sim \Delta^2. \quad (3.4)$$

Соотношение (3.4) позволяет подобрать подходящие значения ω для различных значений $\frac{R}{a}$. Например, для $\frac{R}{a} \sim 10^9$ имеем $\omega \sim 10^3 \text{ сек}^{-1}$.

Когда $\omega \ll \frac{\Delta}{\pi} \frac{a}{R}$, разлагая экспоненту (3.2) в ряд, имеем

$$\Delta F = -N_v \frac{M\omega^2 R^2}{2}. \quad (3.5)$$

Изменение энергии в этом случае—малая величина. Если $J \sim 10^{-2} \text{ К}$ и $\frac{R}{a} \sim 10^9$, то формула (3.5) верна в большом интервале частот ω (до $\omega \sim 1 \text{ сек}^{-1}$).

Из этого анализа следует, что добавка в энергию вакансии, находящегося вблизи оси вращения, мала по сравнению с далекими вакансиями. Поэтому при сравнительно больших угловых скоростях далекие от оси вращения вакансии разрушаются, так как их энергия не может быть больше Δ . Следовательно, вакансии концентрируются у оси вращения.

4. *Равновесная деформация.* Возникновение упорядоченной области вокруг вакансии сопровождается деформацией решетки, что может привести к ряду эффектов. В частности:

а) анизотропия кристалла должна привести к анизотропии вакансии,

б) между вакансиями должны действовать упругие силы, пропорциональные $\left(\frac{1}{r}\right)^2$, аналогичные силам, действующим между точечными дефектами.

Деформация кристалла порождает упругие напряжения

$$\sigma(r) = \frac{\partial E_0}{\partial U(r)}, \quad (4.1)$$

где $U(r)$ -- деформация решетки, а энергия E_0 равна

$$E_0 = E + \frac{1}{2} \lambda U^2(r) - \Lambda n(r) U(r). \quad (4.2)$$

В этом выражении $U \Delta \sim \Delta$, $\lambda = \frac{1}{3}(c_{11} + 2c_{12})$,

c_{11} и c_{12} -- модули упругости, $n(r)$ -- зависящая от координат плотности атомов:

$$n_0(r) = a^3 |\psi|^2,$$

$$\psi = R^{-1/2} r^{-1} \sin\left(\frac{\pi r}{R}\right), \quad r < R - \delta R. \quad (4.3)$$

Равновесная деформация U_0 , при которой $\sigma = 0$, равна

$$U_0 = \frac{\Lambda n_0}{\lambda}. \quad (4.4)$$

Равновесная энергия вакансии определяется при этом из (4.2):

$$E_0^{\text{равн}} = E + \frac{1}{2} \lambda \left(\frac{\Lambda n_0}{\lambda} \right)^2 - \Lambda n_0 \frac{\Lambda n_0}{\lambda} = E - \frac{1}{2} \frac{(\Lambda n_0)^2}{\lambda}, \quad (4.5)$$

т. е. анизотропно понижается вследствие анизотропности λ . Фактически возникает состояние упорядочения скореллированных распределением равновесных деформаций.

Отметим, что в кристалле, в зависимости от значений c_{11} и c_{12} существуют направления, для которых $\lambda \rightarrow 0$.

В этом случае

$$E_0 = E - \Lambda n(r) U(r) \quad (4.6)$$

и, следовательно, из условия $\frac{\partial E_0}{\partial U} = 0$ получим

$$\Lambda n(r) = 0,$$

$$n(r) = 0, \quad \sin \frac{\pi r}{R} = 0. \quad (4.7)$$

Таким образом, радиус сферы вакансии

$$\bar{r} = Rk. \quad (4.8)$$

Подставив это значение \bar{r} в выражение для свободной энергии, получим окончательно

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m \bar{r}^2} + x \frac{4\pi \bar{r}^3}{3k^3} n_4 T + E_0, \quad (4.9)$$

$$\tilde{r} = \left(\frac{\pi \Delta}{4 T_X} \right)^{1.5} a_k. \quad (4.10)$$

Таким образом, при наличии равновесной деформации в кристалле вблизи некоторых определенных точек ($\lambda \rightarrow 0$) возможно появление макроскопических упорядоченных областей, радиусы которых пропорциональны числу k . При конечных отличных от нуля λ это утверждение претерпевает лишь малые поправки.

Кафедра общей физики

Поступила 29.01.1981

1. Андреев А. Ф., Письма в ЖЭТФ, 24, 608, 1976.
2. Анисимова О. П., Варданян Г. А., ФТТ, 21, 2, 573, 1979.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика, ч. I, М., 1976.
4. Андреев А. Ф., Марченко В. И., Мейерович А. Э., Письма в ЖЭТФ, 26, 1, 40, 1977.
5. Анисимова О. П., Варданян Г. А., Изв. АН Арм. ССР, Физика, 13, 489, 1978.

Օ. Պ. ԱՆԻՍԻՄՈՎԱ, Գ. Ա. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Դ. Մ. ՍԵՂՈՎՅԱՆ

**He³—He⁴ ՊԻՆԴ ԼՈՒՄՈՒՅԹՈՒՄ ՎԱԿԱՆՍԻՄԱՆԵՐԻ
ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ՄԱՍԻՆ**

Ա մ փ ն փ ու մ

Հետազոտված է պինդ He³—He⁴ լուծույթում վականսիանների վարքը և հատկությունները: Ցույց է տրված, որ ատոմների հետ փոխազդեցությունների շնորհիվ հնարավոր է վականսիանների խմբերի գոյացում, որոնք կարող են փոխել նյութի որոշակի հատկությունները:

Դիտարկված է պտտվող վականսիոնային զազ և հավասարակշիռ դեֆորմացիաների ազդեցությունը վականսիոնի վրա: