

Природа стеклоподобной фазы в кристаллах ^4He

Т.Н. Анцыгина, М.И. Полтавская, К.А. Чишко

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: chishko@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 16 марта 2015 г., опубликована онлайн 23 июня 2015 г.

Модель плотноупакованного политипа со структурой хаотических дефектов упаковки применена к интерпретации аномальных термодинамических свойств предположительно неупорядоченной (стеклоподобной, glassy phase) фазы в твердом ГПУ ^4He в области так называемого суперсолид-состояния. Проведен теоретический расчет температурных зависимостей фононного давления и выполнено сравнение полученных зависимостей с экспериментом. Получено количественное согласие теории с экспериментальными данными.

Модель щільноупакованого політипу зі структурою хаотичних дефектів пакування застосовано до інтерпретації аномальних термодинамічних властивостей неупорядкованої (склоподібної, glassy phase) фази у твердому ГЦУ ^4He в області так званого суперсолід-стану. Проведено теоретичні розрахунки температурних залежностей фононного тиску та виконано порівняння одержаних залежностей з експериментом. Доведено кількісну згоду теорії з експериментальними даними.

PACS: 67.80.B– Твердый ^4He ;
61.72.Nn Дефекты упаковки и другие плоские или протяженные дефекты;
61.44.–n Полупериодические твердые тела.

Ключевые слова: твердый гелий, хаотические дефекты упаковки, фононное давление.

1. Введение

Интенсивная дискуссия о существовании структурно неупорядоченного (стеклоподобного, glassy phase) состояния в кристаллах твердого гелия имеет место на протяжении как минимум последнего десятилетия [1–7]. В качестве элементов структурного беспорядка обсуждаются преимущественно дислокации [1–4,8,9] и вакансии [5–7]. Основанием для такой интерпретации служат экспериментально наблюдаемые «аномалии» в температурных зависимостях давления [1–5] и теплоемкости [1–3], которые заключаются в отклонении наблюдаемых температурных зависимостей давления и теплоемкости кристаллов от ожидаемых зависимостей, характерных для идеальной пространственной кристаллической решетки. Эти эффекты принято связывать с разного рода нарушениями порядка кристаллической структуры, обусловленного преимущественно вкладами решеточных дефектов таких, как дислокации или вакансии. Собственно же аномалии состоят в том, что, безусловно, трехмерные кристаллы гелия демонстрируют поведение, характерное для неупорядоченных систем пониженной размер-

ности. Еще одной проблемой является интерпретация аномальных механических свойств кристаллов ^4He в торсионных экспериментах [10], где проявляются высокая текучесть твердого ^4He при знакопеременном нагружении образца во вращающейся ячейке, что традиционно принято называть эффектом «суперсолид». Характерной особенностью описанных явлений оказывается то, что такого рода поведение наблюдается исключительно в кристаллах ^4He и не обнаруживается в ^3He [1]. Указанное обстоятельство заставляет искать причины эффекта в различиях физических свойств изотопов гелия, наиболее фундаментальным из которых является наличие ненулевого ядерного спина у ^3He . Конечно, статистика атомов, скорее всего, не влияет непосредственно на механические и тепловые свойства кристалла, однако важным различием между твердыми изотопами являются их кристаллические структуры в области умеренных давлений (ГПУ для ^4He и ОЦК для ^3He), и именно это обстоятельство, скорее всего, должно быть в конечном счете положено в основу интерпретации наблюдаемых свойств изотопов твердого гелия.

Таким образом, аномальное поведение ГПУ ${}^4\text{He}$ принято интерпретировать в рамках по существу гипотетической концепции неупорядоченной среды, точная формулировка которой пока еще не может считаться общепринятой. С другой стороны, детально разработанная теория неупорядоченных кристаллических систем, изложенная в классических монографиях [11,12], относится прежде всего к твердым растворам замещения или внедрения, т.е. к микроскопически неоднородным системам, содержащим случайно распределенные центры дилатации, которые приносят в спектр матрицы собственные квазилокальные состояния, а также создают дальнедействующие поля деформаций, искажающие материнскую решетку и приводящие к рассеянию фононов. Понятно, что непосредственное применение такого рода моделей беспорядка для интерпретации экспериментально наблюдаемых свойств чистого ГПУ ${}^4\text{He}$ не представляется возможным.

В настоящей работе предложена модель неупорядоченного состояния твердого ${}^4\text{He}$, основанная на структуре многослойного кристаллического политипа [13,14], который представляет собой стопку плотноупакованных кристаллических плоскостей на треугольной решетке, сложенную с произвольным периодом (вплоть до бесконечного) вдоль оси симметрии шестого порядка (c -оси), перпендикулярной плоскостям. Такая структура была впервые предложена более ста лет назад для интерпретации экспериментально наблюдаемых оптических свойств карбида кремния, и с тех пор была обнаружена в большом числе металлов, металлических сплавов, полупроводников и диэлектриков [13]. Фактически политип можно рассматривать как ГПУ решетку с малой энергией дефекта упаковки в базисной плоскости [15], в результате чего «перетасовка» плоскостей может приводить к термодинамически выгодному образованию фазы так называемых хаотических дефектов упаковки (ХДУ) [13]. Такая фаза представляет собой кристалл, полностью разупорядоченный в направлении c -оси (трансляционная симметрия в этом направлении отсутствует), но сохраняющий дальний порядок в перпендикулярном направлении, а кроме того, что очень важно, сохраняется принцип плотнейшей упаковки в первой и второй координационных сферах, благодаря чему у системы в целом c -ось остается осью симметрии третьего порядка [13]. Такой структуре присуща легкость базисного скольжения, что определяет специфические механические свойства политипа. Что касается кристаллов, то на сегодняшний день не известны какие-либо структурные данные, определенно указывающие на политипизм в таких системах, однако модель полидоменной структуры позволяет адекватно интерпретировать необычные низкотемпературные механические свойства твердого водорода и твердого аргона [16,17]. Твердый ${}^4\text{He}$ полностью удовлетворяет

всем критериям, необходимым для существования многослойного политипа, и потому здесь мы применим соответствующую модель одномерно-разупорядоченного кристалла из ХДУ для расчетов колебательной свободной энергии и температурных зависимостей фононного давления в такой системе. Как будет видно ниже, приведенный теоретический расчет дает прекрасное согласие с известными экспериментальными результатами [2].

2. Модель

Модель политипа, претерпевающего фазовый переход в условиях всестороннего сжатия, наилучшим образом подходит для интерпретации поведения твердого гелия, выращенного в блокированной ячейке и деформируемого затем путем изменения температуры и давления в замкнутом объеме. Многослойный политип [13,14] представляет собой пакет плоскостей с гексагональной плотноупакованной структурой (или, что то же самое, 2D кристаллов на треугольной решетке). Структурные свойства таких систем обычно обсуждают на примере плотнейших упаковок, составленных из твердых сфер [14]. Рассмотрим треугольную решетку с межузельным расстоянием a , в каждом узле которой находится сфера диаметра a . Обозначим эту плоскость символом A . В ближайшем соседстве у каждой сферы такой структуры имеется шесть пустот, в которые можно уложить только три сферы из соседней плоскости, т.е. мы имеем две структурно эквивалентные возможности поместить вторую плоскость поверх первой [18], и плоскости, размещаемые в этих позициях, мы обозначим соответственно как B и C .

Периодическая двухслойная структура $ABABAB\dots$ представляет собой просто ГПУ решетку, а правильная трехслойная упаковка $ABCABCABC\dots$ есть ГЦК кристалл [13,14,18]. Далее в ряду кристаллографически совершенных плотноупакованных политипов следуют четырех-, шести-, восьми-, девяти- и восемнадцатислойные структуры [13,14]. Этим далеко не исчерпывается перечень возможных политипных модификаций, однако здесь мы ссылаемся только на равновесные политипы, которые могут быть экспериментально идентифицированы в большом количестве чистых металлов, металлических сплавов и полупроводников [13].

Пусть теперь в совершенной ГПУ структуре $ABABAB\dots$ одна из плоскостей испытает сдвиг параллельно слою на вектор $a[11\bar{2}]/\sqrt{6}$, так что возникает, например, упаковка $ABABCBA\dots$. Таким образом в исходной ГПУ решетке образовался так называемый дефект упаковки [15] (ДУ, stacking fault). Дефекты упаковки возникают как в процессе неравновесной кристаллизации (ростовые ДУ), так и в процессе деформации изначально совершенного кристалла (деформационные ДУ) по механизму Шокли [15,37,39].

Наконец, возможно существование плотноупакованной структуры, где позиции A, B, C образуют бесконечную случайную последовательность, называемую системой хаотических дефектов упаковки (ХДУ, random (or chaotic) stacking faults) [13].

Даже в формально периодической, но достаточно длиннопериодной структуре каждая из соседствующих плоскостей может находиться в различном кубическом или гексагональном окружении. Если же имеется периодическая стопка, составленная из n -слойных политипов одинаковой толщины (например, n -слойный политип оказывается термодинамически равновесной структурой при заданных P и T), все равно можно с уверенностью утверждать, что последовательности упаковки в соседних политипах не обязательно совпадают точно, и в целом упаковка будет лишь условно периодической, т.е. в конечном счете случайной. Отметим, что задача о такой системе впервые рассматривалась Л.Д. Ландау [19] в связи

с рентгенографическими исследованиями кристаллов с «переменной структурой».

Итак, мы предположим, что у нас имеется стопка хаотических дефектов упаковки, т.е. последовательность треугольных решеток A, B, C , расположенных в случайной последовательности, однако так, что две однотипные плоскости нигде не сходятся как ближайшие соседи (и это есть условие сохранения плотнейшей упаковки в стопке). Таким образом, основным элементом структуры является двумерная плотноупакованная плоскость на «случайно соизмеримой» подложке, образованной стопками таких же плоскостей, между которыми «зажата» данная треугольная решетка. Гамильтониан плотноупакованной стопки из N хаотически расположенных плотноупакованных плоскостей в гармоническом приближении может быть представлен в виде

$$H = \sum_{j=1}^N H_j, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \text{где} \quad H_j = & \frac{1}{2m} \sum_{\mathbf{f}_j} \mathbf{p}_{\mathbf{f}_j}^2 + \frac{\kappa(a)}{2} \sum_{\mathbf{f}_j, \mathbf{n}^{(\sigma)}} [(\mathbf{u}_{\mathbf{f}_j} - \mathbf{u}_{\mathbf{f}_j + a\mathbf{n}^{(\sigma)}}) \mathbf{n}^{(\sigma)}]^2 + \frac{\lambda(a)}{2} \sum_{\mathbf{f}_j, a\mathbf{n}^{(\sigma)}} (\mathbf{u}_{\mathbf{f}_j} - \mathbf{u}_{\mathbf{f}_j + a\mathbf{n}^{(\sigma)}})^2 + \\ & + \frac{\kappa(b)}{2} \sum_{\mathbf{f}_j, \delta_{j+1}^{(\sigma)}} [(\mathbf{u}_{\mathbf{f}_j} - \mathbf{u}_{\mathbf{f}_j + a\delta_{j+1}^{(\sigma)}}) \delta_{j+1}^{(\sigma)}]^2 + \frac{\lambda(b)}{2} \sum_{\mathbf{f}_j, \delta_{j+1}^{(\sigma)}} (\mathbf{u}_{\mathbf{f}_j} - \mathbf{u}_{\mathbf{f}_j + a\delta_{j+1}^{(\sigma)}})^2 + \\ & + \frac{\kappa(b)}{2} \sum_{\mathbf{f}_j, \delta_{j-1}^{(\sigma)}} [(\mathbf{u}_{\mathbf{f}_j} - \mathbf{u}_{\mathbf{f}_j + a\delta_{j-1}^{(\sigma)}}) \delta_{j-1}^{(\sigma)}]^2 + \frac{\lambda(b)}{2} \sum_{\mathbf{f}_j, \delta_{j-1}^{(\sigma)}} (\mathbf{u}_{\mathbf{f}_j} - \mathbf{u}_{\mathbf{f}_j + a\delta_{j-1}^{(\sigma)}})^2, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\mathbf{p}_{\mathbf{f}_j}$ и $\mathbf{u}_{\mathbf{f}_j}$ — импульс и смещение атома с массой m в узле \mathbf{f}_j двумерной треугольной решетки плоскости с номером j . Единичные векторы $\mathbf{n}^{(\sigma)}$ задают направления на ближайших соседей в плоскости слоя A , а единичные векторы $\delta_{j\pm 1}^{(\sigma)}$ направлены соответственно на соседей в верхней ($j+1$) и нижней ($j-1$) смежных плоскостях B, C (мы пользуемся декартовой системой координат, в которой ось z направлена поперек стопки, а плоскость (x, y) совпадает с 2D треугольной решеткой номера j). Таким образом, координаты соседей в плоскости j есть $a\mathbf{n}^{(\sigma)}$, причем

$$\mathbf{n}^{(1,4)} = (\pm 1, 0, 0), \quad \mathbf{n}^{(2,3,5,6)} = \frac{1}{2}(\pm 1, \pm \sqrt{3}, 0), \quad (3)$$

а координаты соседей в смежных плоскостях равны $a\delta_{j\pm 1}^{(\sigma)}$, где единичные векторы $\delta_{j\pm 1}^{(\sigma)}$ имеют вид

$$\begin{aligned} \delta_{j\pm 1}^{(1)} = \frac{1}{2} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}, \pm \gamma \right), \quad \delta_{j\pm 1}^{(2)} = \frac{1}{2} \left(-1, \frac{1}{\sqrt{3}}, \pm \gamma \right), \\ \delta_{j\pm 1}^{(3)} = \left(0, -\frac{1}{\sqrt{3}}, \pm \frac{\gamma}{2} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

(конфигурация B) и

$$\begin{aligned} \delta_{j\pm 1}^{(3)} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, \pm \frac{\gamma}{2} \right), \quad \delta_{j\pm 1}^{(2)} = -\frac{1}{2} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}, \mp \gamma \right), \\ \delta_{j\pm 1}^{(3)} = \frac{1}{2} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}, \pm \gamma \right) \end{aligned} \quad (5)$$

(конфигурация C). Здесь мы ограничиваемся случаем, когда плоскость с номером j находится в конфигурации A , в то время как верхний и нижний соседи могут иметь любую из конфигураций B, C . Расстояние между плоскостями $j+1$ и $j-1$ равно c . Для простоты мы полагаем здесь, что межплоскостные расстояния между слоями j и $j+1$, а также j и $j-1$ одинаковы и равны $c/2$ (причем, как обычно, $\gamma = c/a$, и для идеальной упаковки шаров $\gamma^2 = 8/3$), хотя, вообще говоря, межплоскостные расстояния могут быть различны для различных конфигураций окружения j -плоскости, т.е. $\gamma_{CA} \neq \gamma_{BA} \neq \sqrt{8/3}$ в упаковках $\dots CAC \dots$ и $\dots BAC \dots$. Далее, $\kappa(r)$ и $\lambda(r)$ есть силовые константы соответственно центральной (направленной вдоль связи \mathbf{n} или δ) и «нецентральной» частей межатомного взаимодействия, определяемого потенциалом $U(r)$,

$$\kappa(r) = \frac{1}{2} \left[U''(r) - \frac{U'(r)}{r} \right] = \frac{U''(r)}{2} - \lambda(r),$$

$$\lambda(r) = \frac{U'(r)}{2r}, \quad (6)$$

причем $r = a$ соответствует взаимодействию в слое, а $r = b$ — взаимодействию с соседними слоями,

$$b^2 = \frac{a^2}{3} \left(1 + \frac{3}{4} \gamma^2 \right). \quad (7)$$

Если $\gamma^2 = 8/3$, то $b = a$. Подчеркнем, что слагаемые в гамильтониане, пропорциональные $U'(r)$, оказываются существенными для кристаллов под давлением, когда межатомные расстояния не совпадают с минимумом потенциала парного взаимодействия $U(r)$. Такая ситуация характерна именно для кристаллов гелия, который твердеет только при наличии избыточного внешнего давления, в то время как при давлении насыщенных паров (когда атомы находятся друг от друга на расстояниях, отвечающих минимуму межатомного потенциала) возможно только жидкое состояние. Вполне вероятно, что именно вклад от слагаемых, зависящих от $U'(r)$, в основном определяет величину модулей сдвига твердого гелия. При этом естественно предполагать, что межатомное расстояние в сжатой решетке твердого гелия сдвинуто в сторону отталкивательной ветви потенциала $U(r)$ и, следовательно, $\lambda < 0$, так что величина модуля всестороннего сжатия растет с увеличением внешнего давления на кристалл.

Гамильтониан (1) описывает фононные возбуждения кристалла в гармоническом приближении. Для дальнейшего нам потребуется только свободная энергия системы $F(T, V) = F_0(V) + F_{ph}(T)$, где F_0 есть свободная энергия кристалла в отсутствие возбуждений при $T = 0$, т.е. по существу энергии прямого межатомного взаимодействия [20], а F_{ph} -энергия фононных возбуждений решетки. Соответственно, давление в кристалле есть $P(T, V) = P_0(V) + P_{ph}(T)$, где статическое давление $P_0 = -\partial F_0 / \partial V$ задается в момент блокировки капилляра и остается неизменным в процессе эксперимента, поскольку исследования твердого гелия выполняются в условиях постоянного объема, а P_{ph} — давление в газе фононов. Таким образом, температурная зависимость давления в данном случае определяется исключительно свойствами фононного газа, заключенного в сосуде постоянного объема. Поскольку химический потенциал системы фононов равен нулю, свободная энергия газа бозонных возбуждений кристаллической решетки $F_{ph}(T)$ совпадает с термодинамическим потенциалом $P_{ph}V$ большого канонического ансамбля [21–23] фононной подсистемы, таким образом, искомое давление равно:

$$P_{ph}(T) = - \frac{F_{ph}(T)}{V}. \quad (8)$$

Общие выражения для функции $F_{ph}(T)$ общеизвестно [20,21,24],

$$F_{ph}(T) = \sum_{\mathbf{k}, \nu} \left\{ \frac{1}{2} \omega_{\nu}(\mathbf{k}) + T \ln [1 - \exp(-\beta \omega_{\nu}(\mathbf{k}))] \right\},$$

$$\beta = \frac{1}{T}, \quad (9)$$

а суммирование производится по всем состояниям в зоне Бриллюэна и всем ветвям спектра. При записи (9) мы воспользовались системой единиц, где постоянная Планка и постоянная Больцмана равны единице. В этом случае частота имеет размерность энергии, которая измеряется в градусах Кельвина. Разумеется, исходная размерность при необходимости может быть легко восстановлена.

Последние четыре суммы в гамильтониане (2) представляют собой энергию случайного взаимодействия j -плоскости с остальным кристаллом. Очевидно, что для каждой реализации системы ХДУ компоненты $\delta_{j\pm 1, x}^{(\alpha)}$ и $\delta_{j\pm 1, y}^{(\alpha)}$ соответствующих векторов будут случайным образом взяты как один из наборов (4) или (5). Естественно, что спектр задачи $\omega_{\nu}(\mathbf{k})$ будет существенно зависеть от способа учета случайности в укладке плоскостей кристалла ХДУ. Во всяком случае, ясно, что у такой системы отсутствует периодичность вдоль оси z , а потому в этом направлении невозможно непосредственно построить регулярную моду, связанную с трансляционной симметрией решетки. С другой стороны, в случайной последовательности плоскостей A, B, C нигде не нарушен принцип плотнейшей упаковки, так что каждый атом имеет двенадцать соседей в первой и шесть — во второй координационной сфере, и случайной оказывается только локальная симметрия окружения. Для каждой j -плоскости случайными являются поперечные компоненты $\delta_{j\pm 1, x}^{(\sigma)}$ и $\delta_{j\pm 1, y}^{(\sigma)}$ векторов $\delta_{j+1}^{(\sigma)}$, задающих направления на соседей в сопредельных плоскостях, а все компоненты $\delta_{j\pm 1, z}^{(\sigma)}$ не случайны (если пренебречь возможным различием γ в сочетаниях BAB и BAC), последние имеют определенные значения $c/\sqrt{12}$. Естественно считать, что в плотноупакованной решетке в приближении ближайших соседей все атомы системы имеют одинаковое распределение среднеквадратичных смещений, а кристалл является поперечно-изотропным в j -плоскости. Это означает, что в приближении ближайших соседей две возможные конфигурации, AB и AC , полностью эквивалентны, и суммирование по реализациям поперечных компонент $\delta_{j+1}^{(\sigma)}$ можно заменить средним арифметическим от шести возможных позиций соседа в плоскости $j \pm 1$.

После усреднения по соседям в сопредельных плоскостях кристалл ХДУ может рассматриваться в длинноволновом приближении как упругий континуум с единственной осью симметрии шестого порядка, сов-

падающей с осью z , т.е. как поперечно-изотропная сплошная среда. Ниже мы рассмотрим два предельных случая. Во-первых, это случай «жесткого» кристалла, когда плоскости, собранные в направлении z -оси, могут рассматриваться как совокупность независимых «плоских» эйнштейновских осцилляторов. Во-вторых, это случай «мягкого» кристалла, когда смещения в плоскости j могут быть определенным образом «сшиты» по непрерывности со смещениями в соседних плоскостях $j \pm 1$. После этого будет рассмотрена еще одна модель дисперсии, которая приводит к результатам, количественно совпадающему с экспериментом.

2.1. «Жесткий» кристалл

Рассмотрение политипа ХДУ мы начнем со случая «жесткого» кристалла, когда корреляция между движениями атомов в соседних плоскостях полностью отсутствует, и в этом смысле такое приближение является эйнштейновским, но не для системы атомов, составляющих упорядоченную кристаллическую решетку, а для системы плоскостей с тождественным атомным порядком. Как будет видно ниже, такое приближение позволяет лишь грубо качественно описать реальную ситуацию, однако оно представляет собой важный предельный случай, результаты которого будут полезны для построения более адекватных моделей.

Таким образом, заменим случайные смещения $\mathbf{u}_{\mathbf{f}_j + \delta_{j \pm 1}^{(\sigma)}}$ на их средние значения

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{u}}_{\mathbf{f}_j + a\delta_{j \pm 1}^{(\sigma)}} &= 0; \quad \bar{u}_{\mathbf{f}_j + a\delta_{j \pm 1}^{(\sigma),x}}^2 = \bar{u}_{\mathbf{f}_j + a\delta_{j \pm 1}^{(\sigma),y}}^2 = \\ &= \bar{u}_{\mathbf{f}_j + a\delta_{j \pm 1}^{(\sigma),z}}^2 = u_0^2 = \text{const}, \end{aligned} \quad (10)$$

и учтем, что $\delta_x^2 = \delta_y^2 = 1/6$. После этого слагаемые в (2),

содержащие $\bar{\mathbf{u}}_{\mathbf{f}_j + \delta_{j \pm 1}^{(\sigma)}}$, обращаются в тривиальные (не

зависящие от j) константы, которые должны быть опущены в гамильтониане. После усреднения по наборам (4), (5) гамильтониан каждой j -й плоскости приобретает один и тот же, не зависящий от номера j , вид:

$$\begin{aligned} H_j &= \frac{1}{2m} \sum_{\mathbf{f}_j} \mathbf{p}_{\mathbf{f}_j}^2 + \frac{\kappa(a)}{2} \sum_{\mathbf{f}_j, \mathbf{n}^{(\sigma)}} [(\mathbf{u}_{\mathbf{f}_j} - \mathbf{u}_{\mathbf{f}_j + a\mathbf{n}^{(\sigma)}}) \mathbf{n}^{(\sigma)}]^2 + \\ &+ \frac{\lambda(a)}{2} \sum_{\mathbf{f}_j, \mathbf{n}^{(\sigma)}} (\mathbf{u}_{\mathbf{f}_j} - \mathbf{u}_{\mathbf{f}_j + a\mathbf{n}^{(\sigma)}})^2 + \kappa(b) \frac{Z_B + Z_C}{6} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{f}_j} \left[u_{\mathbf{f}_j, x}^2 + u_{\mathbf{f}_j, y}^2 + \frac{3}{2} \gamma^2 u_{\mathbf{f}_j, z}^2 \right] + \lambda(b) (Z_B + Z_C) \sum_{\mathbf{f}_j} u_{\mathbf{f}_j}^2, \end{aligned} \quad (11)$$

где m — масса атома, $Z_B = Z_C = 3$ — координационное число соседей в подложке (для конфигураций B и C , по три сверху и снизу), окружающих атом в узле \mathbf{f} базовой

плотнупакованной треугольной решетки конфигурации A . Таким образом, описание нашей системы сводится к задаче о динамике плотнупакованного 2D монослоя на соизмеримой подложке, рассмотренной ранее в [25]. В результате политип, составленный как стопка ХДУ, представляет собой совокупность независимых 2D кристаллов на треугольной решетке, строго соизмеримых с соседними плоскостями в стопке. Обратим внимание на то, что в гамильтониане (11) как силовые константы взаимодействия в монослое, $\kappa(a)$, $\lambda(a)$, так и силовые константы взаимодействия с подложкой, $\kappa(b)$, $\lambda(b)$, выражаются через один и тот же потенциал межатомного взаимодействия $U(r)$ (см. выражение (6)) в отличие от традиционной постановки [25], где эти параметры могут существенно отличаться ввиду различной природы монослоя и подложки. Еще одним важным отличием рассматриваемой здесь задачи от простого монослоя на подложке [25] является то, что в случае соизмеримой подложки как межатомные расстояния в решетке, так и равновесное расстояние между слоем и подложкой определяются практически исключительно рельефом и амплитудой подложечного потенциала, в то время как в плотнупакованной политипной структуре присутствует только потенциал взаимодействия однотипных атомов, находящихся друг от друга на практически одинаковом расстоянии a , которое в случае твердого гелия зависит фактически только от внешнего давления. В действительности от давления зависит параметр γ [26–28], однако в настоящей работе мы не будем обсуждать этот эффект, который оказывается существенным только при высоких давлениях.

Уравнения движения, вытекающие из гамильтониана (11), после преобразования Фурье по времени и координатам в j -плоскости имеют вид ($\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0)$ -двумерный волновой вектор, а индекс j за ненадобностью опущен):

$$\begin{aligned} -\omega^2 u_i^\omega(\mathbf{k}) + Z_0 \Omega^2 \sum_{\mathbf{n}_k} n_k^\alpha n_k^\beta u_\beta^\omega(\mathbf{k}) (1 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}_k}) + \\ + Z_0 D \sum_{\mathbf{n}_k} u_i^\omega(\mathbf{k}) (1 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}_k}) + \\ + (Z_B + Z_C) [\Delta^2 u_\alpha^\omega(\mathbf{k}) + \Delta_z^2 \delta_{iz} u_z^\omega(\mathbf{k})] = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь латинские тензорные индексы пробегают три значения $i = x, y, z$, греческие два — $\alpha = x, y$, а δ_{ik} — символ Кронекера и $\mathbf{n}_k = \mathbf{k}/k$. Далее, $Z_0 = 6$ — координационное число в плоскости, $Z_B = Z_C = 3$ — координационные числа для соседей в сопредельных плоскостях ($Z_B + Z_C = Z_0$),

$$\Omega_a^2 = \frac{\kappa(a)}{m}; \quad D_a = \frac{\lambda(a)}{m}; \quad \Delta^2 = \frac{1}{6} \Omega_b^2 + D_b;$$

$$\Delta_z^2 = \frac{\gamma^2}{4} \Omega_b^2 + D_b; \quad \Omega_b^2 = \frac{\kappa(b)}{m}; \quad D_b = \frac{\lambda(b)}{m}.$$

Условие нетривиальной разрешимости системы трех линейных уравнений (27) дает спектр возбуждений отдельной 2D подсистемы, который в нашем случае может быть получен точно, однако соответствующие выражения оказываются чрезвычайно громоздкими. С целью упрощения расчетов мы заменяем суммирование в (27) по ближайшим соседям узла плотноупакованной плоскости с большим координационным числом $Z_0 = 6$ интегрированием по окружности единичного радиуса в плоскости $z = 0$, которое для произвольной функции $F(\mathbf{n}^{(\sigma)})$ выполняется согласно соотношению [25]:

$$\frac{1}{Z_0} \sum_{\mathbf{n}_k} F(\mathbf{n}_k) \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi F(\mathbf{n}(\varphi)), \quad (13)$$

где

$$\mathbf{n}(\varphi) = \{\cos \varphi, \sin \varphi, 0\}, \quad qn_\alpha \equiv ak_\alpha \quad (\alpha = x, y).$$

Процедура (13) означает усреднение поля смещений по узлам решетки в плоскости j . Без ограничения общности можно положить $\Omega_a = \Omega_b = \Omega$ и $D_a = D_b = D$. В результате система уравнений (27) переходит в

$$\begin{aligned} & -\omega^2 u_\alpha^\omega(\mathbf{q}) + Z_0 \Omega^2 \times \\ & \times \left[\frac{1}{2} (1 - J_0(q) - J_2(q)) u_\alpha^\omega(\mathbf{q}) + J_2(q) n_\alpha n_\beta u_\beta^\omega(\mathbf{q}) \right] + \\ & + Z_0 D (1 - J_0(q)) u_\alpha^\omega(\mathbf{q}) + (Z_B + Z_C) \Delta^2 u_\alpha^\omega(\mathbf{q}) = 0; \\ & -\omega^2 u_z^\omega(\mathbf{q}) + Z_0 D (1 - J_0(q)) u_z^\omega(\mathbf{q}) + (Z_B + Z_C) \Delta_z^2 u_z^\omega(\mathbf{q}) = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

и дает частоты продольной (l) и двух поперечных (t, z) фононных мод,

$$\begin{aligned} \omega_{l,t}^2(q) &= (Z_B + Z_C) \Delta^2 + Z_0 \left(\frac{\Omega^2}{2} + D \right) (1 - J_0(q)) \pm \\ & \pm Z_0 \frac{\Omega^2}{2} J_2(q); \\ \omega_z^2(q) &= (Z_B + Z_C) \Delta_z^2 + D Z_0 (1 - J_0(q)), \end{aligned} \quad (15)$$

где $J_p(ka)$ — функции Бесселя целого порядка $p = 0, 2$. Отметим, что благодаря процедуре (13) все ветви спектра зависят только от модуля q двумерного волнового вектора $\mathbf{q} = a\mathbf{k}$. В работе [25] показано, что ошибка от замены точных квадратов частот изотропным спектром (15) исчезающе мала практически во всей зоне Бриллюэна, за исключением границы зоны, где эта ошибка не превышает 5% от Ω_{\max} для продольной и 2% для поперечных мод. При этом в \mathbf{k} -пространстве гексагональная зона Бриллюэна переходит в окружность с радиусом, равным дебаевскому вектору

$$k_D = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{8\pi}{\sqrt{3}}}.$$

Как показано в (15), все три ветви спектра являются щелевыми (оптическими). Возбуждения с частотами $\omega_{l,t}$, поляризованные в плоскости $z = 0$, могут рассматриваться как акустические при условии $\Delta^2 \ll \Omega^2$, что как раз имеет место для исследованного в [25] монослоя гелия на несоизмеримой графитовой подложке. В нашем же случае подложка является принципиально соизмеримой, и неравенство $\Delta^2 < \Omega^2$ выполняется только в меру условия $Z_0 \gg 1$ с учетом малости модулей $\lambda(a)$ и $\lambda(b)$.

Таким образом, оказывается, что в рамках «жесткой» модели стопка ХДУ составлена из набора независимых плоскостей, а потому в рассматриваемом здесь случае результат сводится к сумме одномерных интегралов по плоской зоне Бриллюэна, ограниченной окружностью радиуса k_D (см. также [25]):

$$F_{\text{ph}}(T) = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} NN_0 T \sum_{v=l,t,z} \int_0^{ak_D} q dq \ln \{1 - \exp[-\beta \omega_v(q)]\}, \quad q = ka. \quad (16)$$

Здесь N_0 — число атомов в одной плотноупакованной плоскости, а N — число плоскостей в стопке ХДУ. Поскольку полный объем системы равен

$$V = NN_0 \frac{\sqrt{3}}{4} \gamma a^3, \quad (17)$$

то окончательно,

$$P_{\text{ph}}(T) = -\frac{T}{\pi \gamma a^3} \sum_{v=l,t,z} \int_0^{ak_D} q dq \ln \{1 - \exp[-\beta \omega_v(q)]\}. \quad (18)$$

Разумеется, точное значение интегралов (9) может быть получено только численными методами. Здесь, однако, нас интересуют прежде всего качественные аспекты поведения зависимостей $P(T)$, поэтому воспользуемся приближениями, которые позволяют получить некоторые полезные аналитические результаты. Прежде всего, напомним, что нас интересует предел низких температур, когда T есть самый малый энергетический параметр задачи. При этом основной вклад в термодинамику системы дают длинноволновые возбуждения $q = ka \ll 1$. Кроме того, очевидно, что в силу неравенств $\Omega^2 \gg D$ в выражениях для частот $\omega_{l,t}$ можно без ограничения общности пренебречь малой величиной D . Фактически, величиной D как правило можно пренебречь и в ω_z , что означает пренебрежение слабой дисперсией z -ветви (такая ситуация буквально имеет место для несоизмеримых монослоев гелия на графите [25]). Разлагая (15) с точностью до $\sim q^2$, получаем:

$$\begin{aligned}\omega_l(q) &= \sqrt{(Z_B + Z_C)\Delta^2 + Z_0\left(\frac{3\Omega^2}{4} + D\right)\left(\frac{q}{2}\right)^2} \approx \sqrt{Z_0}\sqrt{\Delta^2 + \frac{3\Omega^2}{4}\left(\frac{q}{2}\right)^2}; \\ \omega_t(q) &= \sqrt{(Z_B + Z_C)\Delta^2 + Z_0\left(\frac{\Omega^2}{4} + D\right)\left(\frac{q}{2}\right)^2} \approx \sqrt{Z_0}\sqrt{\Delta^2 + \frac{\Omega^2}{4}\left(\frac{q}{2}\right)^2}; \\ \omega_z(q) &= \sqrt{(Z_B + Z_C)\Delta_z^2 + Z_0D\left(\frac{q}{2}\right)^2} \approx \sqrt{Z_0}\Delta_z\left[1 + \frac{D}{\Delta_z^2}\left(\frac{q}{2}\right)^2\right].\end{aligned}\quad (19)$$

Таким образом, давление может быть представлено в виде

$$P_{\text{ph}}(T) = -\frac{T}{\pi\gamma a^3}\Phi(T), \quad (20)$$

где функция температуры $\Phi(T)$ выражается через сумму трех однотипных интегралов,

$$\Phi(T) = \sum_{v=l,t,z} \int_0^{ak_D} q dq \ln \left\{ 1 - \exp \left[-\frac{\sqrt{Z_0}}{T} \sqrt{\Delta_v^2 + \theta_v \left(\frac{q}{2}\right)^2} \right] \right\}, \quad (21)$$

содержащую шесть параметров:

$$\begin{aligned}\Delta_l = \Delta_t = \Delta; \quad \theta_l = \frac{3\Omega^2}{4} + D; \\ \theta_t = \frac{\Omega^2}{4} + D; \quad \theta_z = D.\end{aligned}\quad (22)$$

и, конечно, Δ_z . Эти параметры, в свою очередь, выражаются через четыре модуля $\kappa(a)$, $\kappa(b)$, $\lambda(a)$ и $\lambda(b)$. В отличие от монослоя на графите [25], где модули взаимодействия слой–подложка и модули межатомного взаимодействия в слое в силу различных причин могут быть существенно различны, в нашем случае эти модули определяются только межатомными потенциалами плотноупакованной кристаллической решетки гелия, где, помимо очевидного равенства $Z_B + Z_C = Z_0 = 6$, с высокой точностью можно считать $\gamma^2 = 8/3$ и, следовательно, $\kappa(a) = \kappa(b) = \kappa$, $\lambda(a) = \lambda(b) = \lambda$. В результате мы имеем в задаче по существу лишь два независимых параметра, Ω и D , $\Omega \gg \sqrt{|D|}$. В этих терминах спектр (19) приобретает вид

$$\omega_v^2(q) = Z_0\Omega^2\{A_v + B_v q^2\}; \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned}A_l = A_t = \frac{1}{6} + \eta; \quad A_z = \frac{2}{3} + \eta; \\ B_l = \frac{1}{4}\left(\frac{3}{4} + \eta\right); \quad B_t = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{4} + \eta\right); \quad B_z = \frac{1}{4}\eta,\end{aligned}$$

причем $\eta = D/\Omega^2 \ll 1$. Твердый гелий существует только при низких температурах, $T \ll \sqrt{Z_0}\Omega$. В этом

случае три интеграла, входящие в (21), могут быть оценены методом перевала (методом Лапласа [29]) с учетом того, что максимум показателя экспоненты приходится на граничную точку $q = 0$ интервала интегрирования, следовательно

$$\begin{aligned}\Phi(T) \sim -\left(\frac{T}{\sqrt{Z_0}\Omega}\right)^{1/2} \times \\ \times \sum_{v=l,t,z} \exp\left(-\frac{\sqrt{Z_0}\Omega}{T}\sqrt{A_v}\right) \sum_{j=0}^{\infty} c_j \left(\frac{T}{\sqrt{Z_0}\Omega}\right)^{j/2}.\end{aligned}\quad (24)$$

В нашем случае коэффициенты c_j , рассчитанные по известным формулам [29], имеют простой вид. Отличными от нуля оказываются только два коэффициента бесконечного температурного ряда в (24), $c_1 = c_3 = 1/B_v$, остальные же равны нулю. Итак,

$$\begin{aligned}P_{\text{ph}}(T) = \frac{T}{\pi\gamma a^3}\left(\frac{T}{\sqrt{Z_0}\Omega}\right)\left(1 + \frac{T}{\sqrt{Z_0}\Omega}\right) \times \\ \times \sum_{v=l,t,z} \frac{1}{B_v} \exp\left(-\frac{\sqrt{Z_0}\Omega}{T}\sqrt{A_v}\right).\end{aligned}\quad (25)$$

Замечательно, что в принципе бесконечный асимптотический ряд имеет в нашем случае в точности только два отличных от нуля члена разложения. Отметим, что асимптотики (25) имеют точный формальный предел $P_{\text{ph}} \sim T^3$ при $T \rightarrow \infty$, хотя, конечно, ссылка на этот предел находится в противоречии с исходным условием $\sqrt{Z_0}\Omega \gg T$, на основании которого построено асимптотическое разложение.

На рис. 1 представлены точные температурные зависимости давления $P_{\text{ph}}(T)$ для «жесткой» модели, построенные по формуле (18) в интервале $0 < T \leq 1,5$ К для трех значений $\sqrt{Z_0}\Omega = 2, 5$ и 10 К (при $\eta = 0,01$) на графиках a , b и c соответственно. Для большей наглядности графики построены в координатах $P_{\text{ph}}(T) - T^3$. Ось давлений отстроена непосредственно в миллибарах, что делает удобным прямое сравнение теории с результатами экспериментов [1–7]. На рисунках приведены экспериментальные точки [2] для отожженного (совершенного) и деформированного (де-

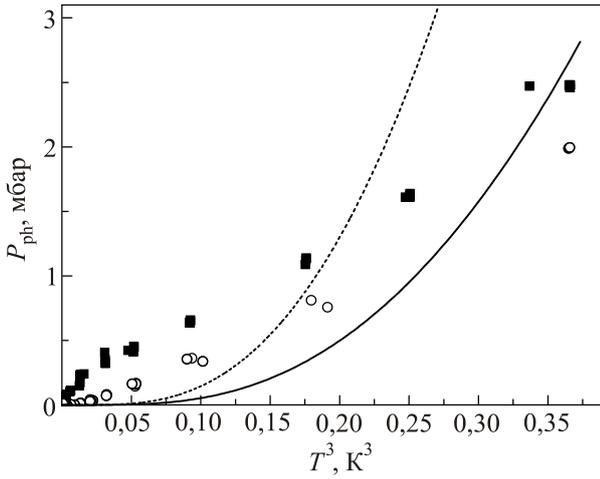


Рис. 1. Температурная зависимость фононного давления в кристалле гелия из хаотических дефектов упаковки в координатах $P_{ph}(T) - T^3$ в рамках «жесткой» модели. Приведены точные зависимости (сплошная кривая) в сравнении с низкотемпературной асимптотикой (штриховая кривая) для $\Omega = 3,69$ К. Точки — эксперимент работы [2]: \circ — отожженный образец, \blacksquare — деформированный образец.

фектного) образцов. Укажем также, что в размерных единицах коэффициент перед интегралом (20) и перед суммой (25) равен

$$\frac{k_B}{\pi\gamma a^3} = 0,997 \text{ бар/К}, \quad (26)$$

если принять, что $a = 3\text{Å}$ и $\gamma = \sqrt{8/3} = 1,633$. Как видно на графиках рис. 1, асимптотики (25) справедливы в узкой области вблизи нуля температур, и хотя температурный интервал, где достигается согласие с точным выражением (20), расширяется по мере увеличения параметра $\Omega \gg T$, асимптотическая формула (25) не дает удовлетворительного количественного описания экспериментальных результатов. Интересно отметить, что по структуре эта формула практически точно совпадает с выражением, предложенным в работе [6] для обсуждения вакансионной природы аномальных зависимостей давления в кристаллах ^3He .

2.2. «Мягкий» кристалл

В этом разделе рассмотрим модель, которая интерпретирует политип как упругий анизотропный континуум с дисперсией специального вида в направлении c -оси. При отсутствии дисперсии такая модель соответствовала бы стандартному дебаевскому приближению, однако беспорядок в кристалле существенно влияет на его низкочастотный колебательный спектр [30,31], так что простой переход к континуальному пределу оказывается недостаточным, и должен быть дополнен некоторыми соображениями о характере дисперсии в такой среде.

В кристалле ХДУ ближний порядок случайным образом реализуется по одному из двух типов: VAB (ГПУ) или VAC (ГЦК) для любого набора ближайших соседей $j-1, j, j+1$. Этот порядок случайным образом изменяется от плоскости к плоскости, а потому в такой системе нет определенного периода (и трансляционной симметрии) в направлении c -оси, перпендикулярном стопке плоскостей $ABC\dots$ и, следовательно, невозможно построить регулярную моду в этом направлении. Тем не менее, поскольку принцип плотнейшей упаковки не нарушен, и каждый атом имеет двенадцать ближайших соседей в первой координационной сфере и шесть во второй, в длинноволновом приближении такой кристалл можно интерпретировать как сплошную анизотропную упругую среду с дисперсией. Установление свойств такой среды требует детального описания характера беспорядка в системе, что далеко выходит за рамки настоящей работы, и потому мы ограничимся некоторыми простыми феноменологическими соображениями, чтобы построить уравнения движения и спектр политипа. Будем считать, что атомные смещения $\mathbf{u}^0(\mathbf{q}, z)$, в отличие от рассмотренных в предыдущем разделе, являются непрерывными функциями координаты z . Тогда функция $\mathbf{u}^0(\mathbf{q}, 0)$ означает смещения атомов, принадлежащих плоскости j , а $\mathbf{u}^0(\mathbf{q}, \pm a\gamma/2)$ — смещения в плоскостях $j \pm 1$ соответственно.

Уравнения движения атомов j -плоскости следуют непосредственно из гамильтониана (2):

$$\begin{aligned} & -\omega^2 u_i^0(\mathbf{q}, 0) + Z_0 \Omega_a^2 \left[\frac{1}{2} (1 - J_0(q) - J_2(q)) u_\alpha^0(\mathbf{q}, 0) + J_2(q) n_\alpha n_\beta u_\beta^0(\mathbf{q}, 0) \right] + Z_0 D_a (1 - J_0(q)) u_i^0(\mathbf{q}, 0) + \\ & + (Z_B + Z_C) \left[\Delta^2 u_\alpha^0(\mathbf{q}, 0) + \delta_{iz} \Delta_z^2 u_z^0(\mathbf{q}, 0) \right] + (Z_B + Z_C) \frac{\Omega_b^2}{6} \left\{ J_2 \left(\frac{q}{\sqrt{3}} \right) \left[n_\alpha n_\beta - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \right] \left(u_\beta^0 \left(\mathbf{q}, \frac{a\gamma}{2} \right) + u_\beta^0 \left(\mathbf{q}, -\frac{a\gamma}{2} \right) \right) - \right. \\ & \left. - i\gamma \frac{\sqrt{3}}{2} J_1 \left(\frac{q}{\sqrt{3}} \right) \left[\delta_{iz} n_\beta \left(u_\beta^0 \left(\mathbf{q}, \frac{a\gamma}{2} \right) - u_\beta^0 \left(\mathbf{q}, -\frac{a\gamma}{2} \right) \right) + n_\alpha \left(u_z^0 \left(\mathbf{q}, \frac{a\gamma}{2} \right) - u_z^0 \left(\mathbf{q}, -\frac{a\gamma}{2} \right) \right) \right] \right\} - \\ & - \frac{(Z_B + Z_C)}{2} J_0 \left(\frac{q}{\sqrt{3}} \right) \left[\Delta^2 \left(u_\alpha^0 \left(\mathbf{q}, \frac{a\gamma}{2} \right) + u_\alpha^0 \left(\mathbf{q}, -\frac{a\gamma}{2} \right) \right) + \delta_{iz} \Delta_z^2 \left(u_z^0 \left(\mathbf{q}, \frac{a\gamma}{2} \right) + u_z^0 \left(\mathbf{q}, -\frac{a\gamma}{2} \right) \right) \right] = 0; \quad (27) \end{aligned}$$

где $q = ka$ — безразмерный двумерный волновой вектор в плотноупакованной плоскости.

Проведенное усреднение как в j -плоскости, так и в межплоскостном взаимодействии позволяет теперь интерпретировать рассматриваемую систему как бесструктурную сплошную упруго-анизотропную среду, для которой поле смещений $\mathbf{u}^{\omega}(\mathbf{k}, z)$ является непрерывной функцией координаты z . Заменяя конечные

разности, стоящие в круглых скобках выражения (27), первыми и вторыми производными по координате z , а также разлагая бесселевы функции до членов $\sim q^2$, находим уравнения движения «мягкого» кристалла в длинноволновом гармоническом приближении:

$$\begin{aligned}
 & -\omega^2 u_i^{\omega}(\mathbf{q}, z) + Z_0 \frac{\Omega_a^2}{8} \left(q_{\alpha} q_{\beta} + \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \right) u_{\beta}^{\omega}(\mathbf{q}, z) + Z_0 D_a \frac{q^2}{4} u_i^{\omega}(\mathbf{q}, z) + (Z_B + Z_C) \frac{\Omega_b^2}{72} \left(q_{\alpha} q_{\beta} - \frac{q^2}{2} \delta_{\alpha\beta} \right) u_{\beta}^{\omega}(\mathbf{q}, z) - \\
 & - \frac{Z_B + Z_C}{2} \left(\frac{a\gamma}{2} \right)^2 \left[\Delta^2 \frac{\partial^2 u_{\alpha}^{\omega}(\mathbf{q}, z)}{\partial z^2} + \delta_{iz} \Delta_z^2 \frac{\partial^2 u_z^{\omega}(\mathbf{q}, z)}{\partial z^2} \right] + (Z_B + Z_C) \frac{q^2}{12} \left[\Delta^2 u_{\alpha}^{\omega}(\mathbf{q}, z) + \delta_{iz} \Delta_z^2 u_z^{\omega}(\mathbf{q}, z) \right] - \\
 & - i\gamma (Z_B + Z_C) \frac{\Omega_b^2}{12} \left(\frac{a\gamma}{2} \right) \left[q_{\alpha} \frac{\partial u_z^{\omega}(\mathbf{q}, z)}{\partial z} + \delta_{iz} q_{\beta} \frac{\partial u_{\beta}^{\omega}(\mathbf{q}, z)}{\partial z} \right] = 0. \tag{28}
 \end{aligned}$$

Выполняя преобразование Фурье по z с учетом

$$\frac{\partial}{\partial z} \rightarrow -ik_z, \quad q_z = \frac{a\gamma}{2} k_z,$$

получаем систему линейных уравнений для фурье-компонент поля смещений

$$H_{ij}(\mathbf{q}, q_z) u_j^{\omega}(\mathbf{q}, q_z) = 0, \tag{29}$$

где элементы эрмитовой матрицы $H_{ij}(\mathbf{q}, q_z)$ равны

$$H_{xx}(\mathbf{q}, q_z) = \Omega_0^2 q^2 + \Omega_{\parallel}^2 q_x^2 + \Delta^2 r_0^2 - \varepsilon_{\omega}^2(q);$$

$$H_{yy}(\mathbf{q}, q_z) = \Omega_0^2 q^2 + \Omega_{\parallel}^2 q_y^2 + \Delta^2 r_0^2 - \varepsilon_{\omega}^2(q);$$

$$H_{zz}(\mathbf{q}, q_z) = \Delta_z^2 r_0^2 - \varepsilon_{\omega}^2(q);$$

$$H_{xy}(\mathbf{q}, q_z) = H_{yx}(\mathbf{q}, q_z) = \Omega_{\parallel}^2 q_x q_y;$$

$$H_{xz}(\mathbf{q}, q_z) = H_{zx}(\mathbf{q}, q_z) = -\frac{\Omega_b^2}{12} \gamma q_x q_z;$$

$$H_{yz}(\mathbf{q}, q_z) = H_{zy}(\mathbf{q}, q_z) = -\frac{\Omega_b^2}{12} \gamma q_y q_z. \tag{30}$$

Здесь

$$\Omega_{\parallel}^2 = \frac{1}{8} \left(\Omega_a^2 + \frac{\Omega_b^2}{9} \right), \quad \Omega_0^2 = \frac{1}{16} \left(\Omega_a^2 - \frac{\Omega_b^2}{9} \right),$$

$$r_0^2 = \frac{1}{2} \left(q_z^2 + \frac{q^2}{6} \right), \quad \varepsilon_{\omega}^2(q) = \frac{\omega^2}{Z_0} - D_a \frac{q^2}{4}.$$

Характеристическое уравнение для линейной системы (29) оказывается бикубическим уравнением относительно $\varepsilon_{\omega}(q)$:

$$c_3 \varepsilon_{\omega}^6 + c_2 \varepsilon_{\omega}^4 + c_1 \varepsilon_{\omega}^2 + c_0 = 0, \tag{31}$$

где

$$c_3 = -1; \quad c_2 = (\Omega_{\parallel}^2 + 2\Omega_0^2) q^2 + (\Delta_z^2 + 2\Delta^2) r_0^2;$$

$$c_1 = -\Omega_0^2 (\Omega_0^2 + \Omega_{\parallel}^2) q^4 - (2\Omega_0^2 + \Omega_{\parallel}^2) (\Delta^2 + \Delta_z^2) q^2 r_0^2 -$$

$$-\Delta^2 (\Delta^2 + 2\Delta_z^2) r_0^4 + \left(\frac{\Omega_b^2}{12} \gamma \right)^2 q^2 q_z^2;$$

$$c_0 = \Delta^4 \Delta_z^2 r_0^6 + \Delta^2 \Delta_z^2 (2\Omega_0^2 + \Omega_{\parallel}^2) q^2 r_0^4 +$$

$$+ \Delta_0^2 \Delta_z^2 (\Omega_0^2 + \Omega_{\parallel}^2) q^4 r_0^2 - \left(\frac{\Omega_b^2}{12} \gamma \right)^2 (\Omega_0^2 q^2 + \Delta^2 r_0^2) q^2 q_z^2. \tag{32}$$

В результате [32]

$$\varepsilon_{\omega_1}^2(q) = \rho \cos \frac{\mu}{3}; \quad \varepsilon_{\omega_{2,3}}^2(q) = \rho \left(-\cos \frac{\mu}{3} \pm \sqrt{3} \sin \frac{\mu}{3} \right).$$

Здесь

$$\rho = \sqrt[6]{Q^2 + |D|}, \quad \mu = \arctg \frac{\sqrt{|D|}}{Q},$$

где D — дискриминант приведенного уравнения (31),

$$D = Q^2 + P^3, \tag{33}$$

$$Q = \frac{c_2^3}{27c_3^3} - \frac{c_2c_1}{6c_3^2} + \frac{c_0}{2c_3}, \quad P = \frac{3c_3c_1 - c_2^2}{9c_3^2}. \tag{34}$$

Используя (32), легко проверить, что $D < 0$ во всей физически значимой области изменения компонент волновых векторов q и q_z , а следовательно, дисперсионное уравнение (31) имеет три различных вещественных корня. Прямой расчет показывает, что эти корни положительны, так что спектр задачи состоит из трех частот

$$\omega_{1,2,3} = \sqrt{Z_0 \left(\varepsilon_{\omega_{1,2,3}}^2(q) + D \frac{q^2}{4} \right)}. \quad (35)$$

Фононное давление в кристалле по-прежнему определяется формулой (18), где, однако, добавляется интегрирование по q_z . В идеальном ГПУ кристалле, где имеется трансляционная симметрия, область изменения этой переменной есть $|q_z| \leq \pi$. В системе ХДУ, как уже отмечалось выше, регулярная мода в строгом смысле этого слова не может быть построена, но из проведенного рассмотрения видно, что после усреднения в z -направлении, наша система приобретает в этом направлении свойства некой сплошной упругой среды, свойства которой, тем не менее, должны быть доопределены. Проблема состоит в том, что при переходе от конечных разностей к производным с последующим преобразованием Фурье в (27) и (28) мы формально переходим к континуальному пределу и распространяем функцию, заданную в точке, на всю бесконечную ось z . Ясно, что, по крайней мере, качественно мы должны восстановить поведение фурье-трансформанты этой функции в области физически существенных значений, т.е. при малых q_z . Для этого заметим, что существует некоторая существенно макроскопическая корреляционная длина l_c такая, что фононы с длинами волн $q^{-1} > l_c/a = m_c$ распространяются как упругие волны в сплошной среде, а при $q^{-1} < m_c$ стопка плоскостей превращается в квазиодномерную (вдоль оси z) «цепочку» слабо коррелированных квазиэйнштейновских осцилляторов. Эта ситуация вполне аналогична той, которая имеет место для распределения плотности фононных состояний в одномерной неупорядоченной системе [12]. Экспоненциально малым вкладом такой квазиэйнштейновской части с достаточной для наших целей точностью можно пренебречь, и, таким образом, величину $ak_{Dz} = \pi/m_c$ следует считать дебаевским вектором при интегрировании по q_z . С учетом необходимого обезразмеривания волнового вектора получаем

$$P_{ph}(T) = -\frac{2T}{\pi m_c \gamma a^3} \times \sum_{v=1,2,3} \int_0^{ak_D} q dq \int_0^{\pi/m_c} dq_z \ln\{1 - \exp[-\beta \omega_v(q, q_z)]\}. \quad (36)$$

На рис. 2 представлены температурные зависимости фононного давления P_{ph} от куба температуры для кристалла гелия ^4He из ХДУ в рамках «мягкой» модели, рассчитанные по формуле (36) при различных значениях силовых постоянных $\Omega_a = \Omega_b$ и различных значениях корреляционного параметра m_c . Величина фононного давления существенно снижается как с ростом m_c (рис. 2(а)), так и с увеличением жесткости кристалла, определяемой силовыми констан-

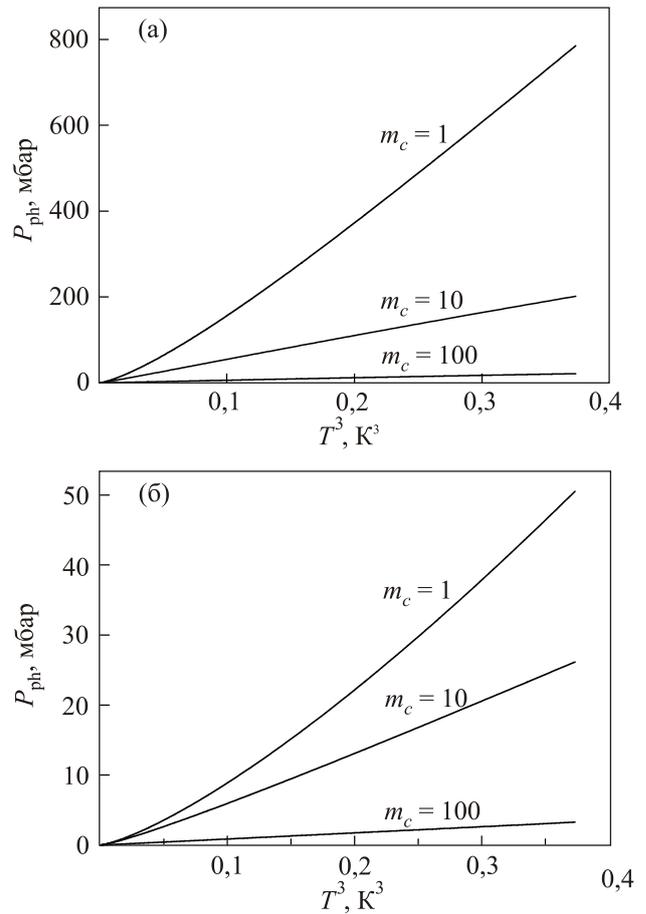


Рис. 2. Зависимости $P_{ph}(T^3)$, рассчитанные по формуле (36) при различных m_c для $\Omega_a = \Omega_b = 1,21$ (а) и $3,21$ К (б).

тами Ω_a и Ω_b (рис. 2(б)). На рис. 3 представлена температурная зависимость фононного давления P_{ph} в кристалле гелия ^4He из ХДУ в «мягкой» модели, рассчитанная по формуле (36) и подогнанная к экспери-

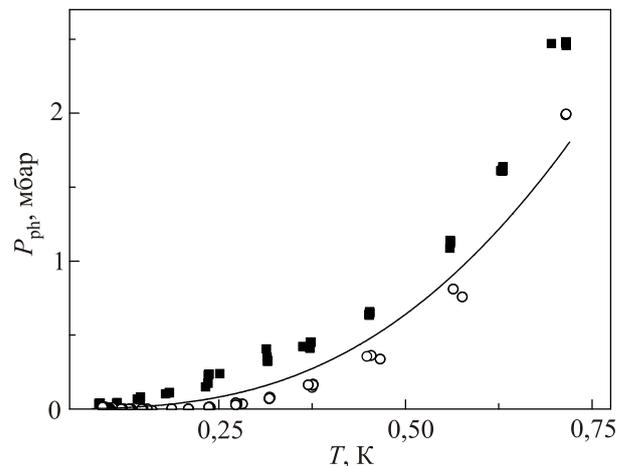


Рис. 3. Температурная зависимость фононного давления в кристалле гелия ^4He из хаотических дефектов упаковки в «мягкой» модели. Сплошная кривая — теоретический расчет по формуле (36) для $\Omega_a = \Omega_b = 1,21$ К при $m_c = 1190$. Экспериментальные точки [2] — те же, что и на рис. 1.

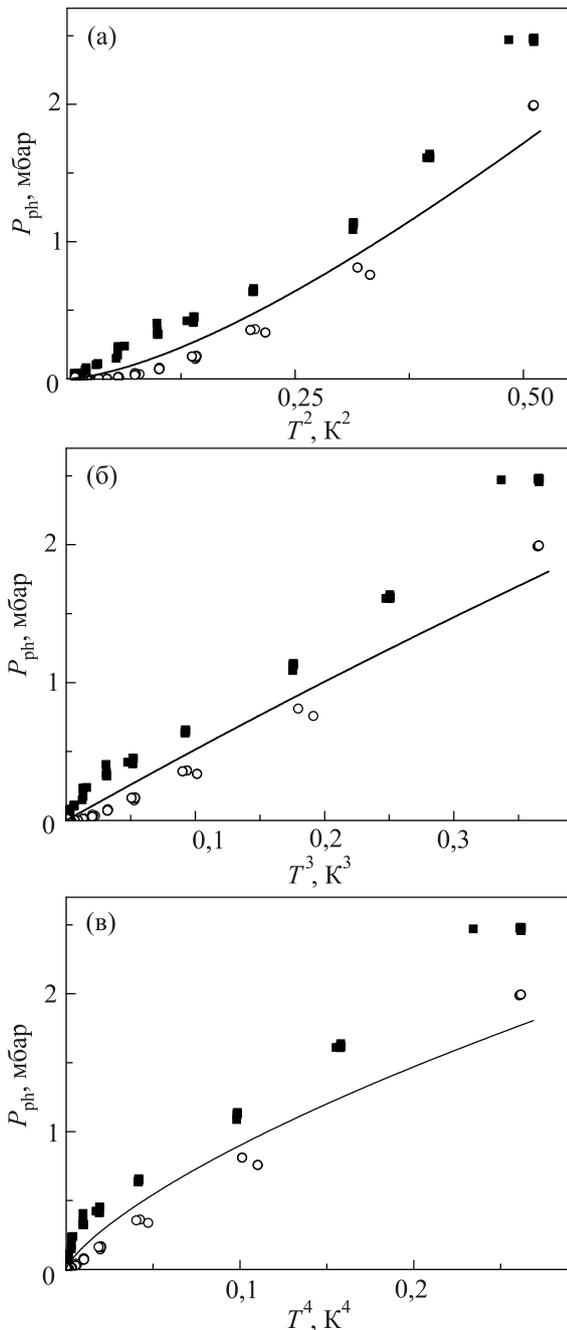


Рис. 4. Зависимости $P_{\text{ph}}(T)$ на рис. 3, перестроенные в различных координатах: $P-T^2$ (а), $P-T^3$ (б), $P-T^4$ (в).

менту [2] с $\Omega_a = \Omega_b = 1,21$ К при $m_c = 1190$. Подчеркнем, что подгонку здесь и в дальнейшем мы будем производить по отожженному образцу, т.е. для бездефектного кристалла, а все отклонения от этой зависимости будут обсуждаться как вклад возможных дефектов, возникающих в процессе деформации. На рис. 4 зависимости рис. 3 нанесены в координатах $P_{\text{ph}}(T^2)$, $P_{\text{ph}}(T^3)$ и $P_{\text{ph}}(T^4)$ (отметим, что теоретическая подгонка для «мягкой» модели лучше всего спрямляется в координатах $P_{\text{ph}}(T^3)$). Очевидно, что согласие с экс-

периментом здесь существенно лучше, чем в «жесткой» модели, хотя и в этом случае оно не может быть признано вполне удовлетворительным с количественной точки зрения как при низких, так и при высоких температурах. Тем не менее важным результатом «мягкой» модели является то, что она иллюстрирует решающую роль дисперсии решеточных возбуждений, распространяющихся вдоль c -оси, т.е. поперек стопки плотноупакованных плоскостей. Характер этой дисперсии, в свою очередь, принципиально определяется характером беспорядка в стопке ХДУ.

2.3. «Полужесткая» модель

Изученные в двух предыдущих разделах приближения являются предельными случаями «жесткой» и «мягкой» стопок, и обе эти модели дают лишь качественную интерпретацию аномального поведения кристаллов ${}^4\text{He}$, однако иллюстрируют важность учета дисперсии возбуждений в направлении, перпендикулярном плотноупакованным плоскостям. В данном разделе рассмотрим модель дисперсии, которая является промежуточной между двумя исследованными выше приближениями. А именно, будем предполагать, что z -компонента смещений атома в слое не коррелирована с z -смещениями ближайших к нему атомов в соседних слоях, в то время как атомные смещения в плоскости слоев являются непрерывными функциями координаты z . При этом вместо соотношения (10) следует оставить

$$\bar{u}_{\mathbf{f}_j+a\delta_{j\pm 1,z}}^{(\sigma)} = 0; \quad \bar{u}_{\mathbf{f}_j+a\delta_{j\pm 1,z}}^{(\sigma)} = u_0^2 = \text{const}, \quad (37)$$

В результате система уравнений для фурье-компонент поля смещений имеет тот же вид (29), где матричные элементы H_{xx} , H_{yy} , $H_{xy} = H_{yx}$, H_{zx} и H_{zy} сохраняют свой прежний вид (30), как и в «мягкой» модели, в то время как

$$H_{zz} = \Delta_z^2 - \varepsilon_{\omega}^2(q), \quad H_{xz} = H_{yz} = 0. \quad (38)$$

Отметим, что матрица «полужесткой» модели оказывается неэрмитовой, а z -компонента смещений — щелевой и слабодисперсионной (в меру малости D_a). Бесщелевые возбуждения формируются на смещениях, перпендикулярных c -оси, и в этом смысле их можно считать аналогом нормальных волн сдвига в упругой пластине [33,34].

Характеристическое уравнение «полужесткой» модели имеет три положительных корня, один из которых, соответствующий z -возбуждениям, отделяется тривиально,

$$\varepsilon_{\omega_3}^2(q) = \Delta_z^2, \quad (39)$$

а два других есть корни биквадратного уравнения, имеющие вид

$$\varepsilon_{\omega_{1,2}}^2(q) = \Delta^2 r_0^2 + \left(1 \pm \frac{5}{36}\right) \frac{\Omega^2}{8} q^2. \quad (40)$$

Частоты возбуждений по-прежнему определяются выражением (35), а давление — формулой (36), в которой следует положить $m_c = 1$. На рис. 5 экспериментальные данные сравниваются с теоретической кривой для $\Omega = 7,31$ К, а на рис. 6 те же данные спрямлены в координатах T^2 , T^3 и T^4 соответственно. Следует отметить прекрасное согласие теории и эксперимента, однако возникает вопрос, почему в данном случае параметр Ω оказывается в четыре раза больше, чем в случае «мягкой» модели, где теория (по крайней мере, полуколичественно) также соответствует эксперименту. Этот феномен объясняется тем, что указанный параметр имеет несколько различный смысл в двух рассмотренных моделях. Для «мягкой» модели Ω есть силовая константа, связывающая ближайших соседей в плотноупакованной решетке, где трансляционная симметрия восстанавливается в континуальном пределе, и регулярные возбуждения одинаково свободно распространяются во всех направлениях. В случае же «полужесткой» модели $\Omega \sim 7,3$ К определяет величину щели $\Delta_z \sim 6,1$ К, т.е., по существу, глубину ямы, в которой локализован в z -направлении атом, зажатый соседями из верхней и нижней сопредельных плоскостей. Для сравнения укажем, что статическая (нефононная) свободная энергия F_0 , приходящаяся на один атом в решетке твердого гелия, которая находится под всесторонним внешним давлением P_0 , может быть оценена как $F_0 \sim P_0 a^3 \sim 8$ К, при $P_0 = 41\text{--}45$ бар, что соответствует условиям, при которых выполнены рассматриваемые нами эксперименты работы [2].

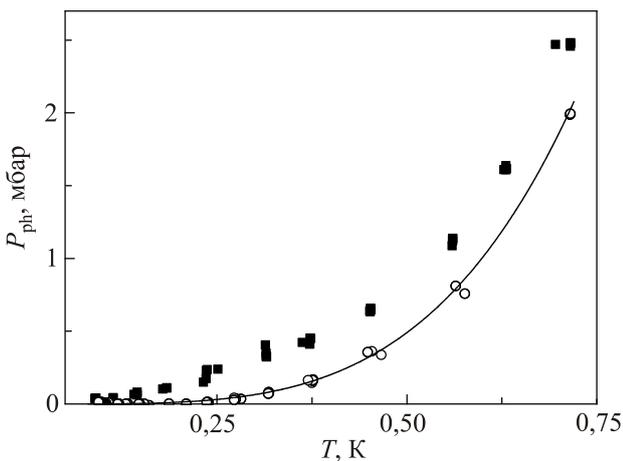


Рис. 5. Температурная зависимость фоновонного давления P_{ph} в кристалле гелия ${}^4\text{He}$ из хаотических дефектов упаковки в «полужесткой» модели. Сплошная кривая — теоретический расчет по формуле (36) для $\Omega_a = \Omega_b = 7,31$ К ($m_c = 1$). Экспериментальные точки [2] — те же, что и на рис. 1.

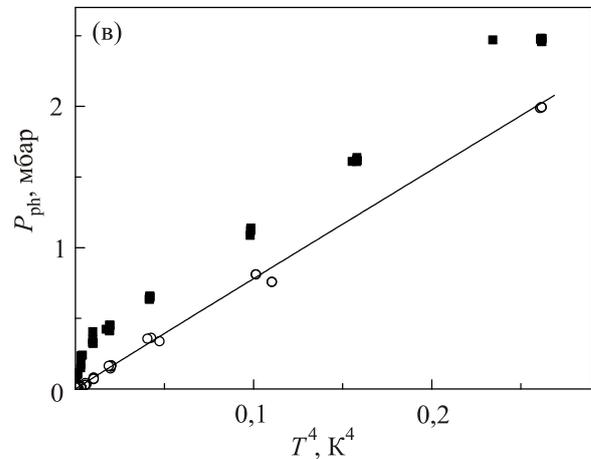
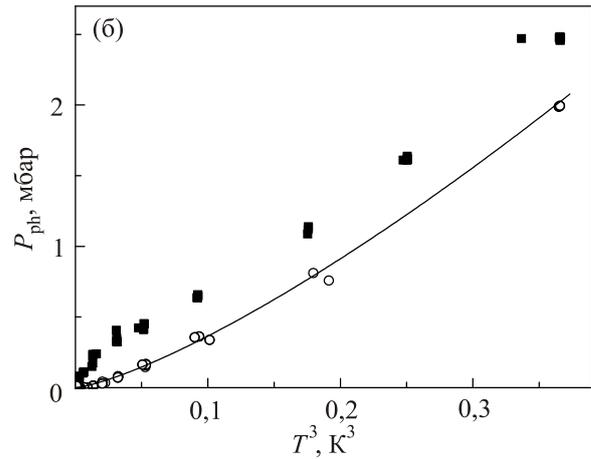
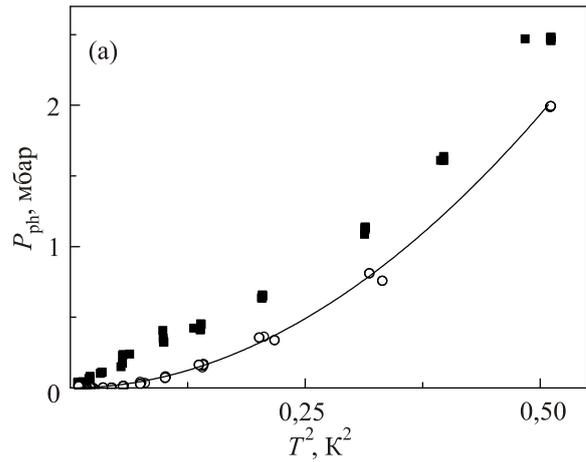


Рис. 6. Зависимости $P_{ph}(T)$ на рис. 3, перестроенные в различных координатах: $P - T^2$ (а), $P - T^3$ (б), $P - T^4$ (в).

2.4. Дисперсия в политипе

Исходная стопка ХДУ представляет собой анизотропную плотноупакованную структуру с осью симметрии третьего порядка, вдоль которой отсутствует микроскопическая трансляционная симметрия [13]. После усреднения система ведет себя как поперечно-изотропная сплошная среда, и в направлении оси z эта среда обладает специфической дисперсией. Вопрос о том, как формируется дисперсия и как возникает корреляционная длина m_c требует, конечно, специально-

го рассмотрения, что далеко выходит за рамки настоящей работы, поэтому здесь мы ограничимся только качественными соображениями. Сначала отметим, что приближение взаимодействия ближайших соседей должно быть уточнено. В самом деле, для плотной упаковки твердых сфер ($\gamma = \sqrt{8/3}$) в приближении ближайших (а также и вторых) соседей энергии конфигураций VAB и VAC одинаковы, и различие между этими упаковками состоит только в локальной симметрии окружения атома A -плоскости (ГПУ или ГЦК соответственно). Это означает, что различия в энергиях локальных ГПУ и ГЦК упаковок будут зависеть от распределения атомов в далеких координационных сферах. Чтобы построить термодинамику такой системы, мы должны рассматривать последовательность подсистем из трех, четырех, пяти, ... N ... плотноупакованных плоскостей, после чего может быть записана большая каноническая статсумма ($T - \mu$)-распределение, [22])

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_{N=3}^{\infty} \exp\left(\frac{N\mu}{T}\right) Z_N(T, V, g_N), \quad (41)$$

где Z_N — каноническая статсумма, а g_N — кратность структурного вырождения [13] N -слоеного политипа. Необходимо иметь в виду, что структурное вырождение, строго говоря, может не означать одновременного вырождения по энергиям, т.е. различные упаковки в стопке плоскостей с фиксированным N могут отличаться по энергиям, например, из-за вариации межплоскостных расстояний. Корреляционная длина естественным образом определяется как средняя толщина политипа,

$$m_c = \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi(T, V, \mu), \quad (42)$$

а фононная свободная энергия равна потенциалу большой статсуммы при $\mu = 0$ [21,23],

$$F_{\text{ph}} = -T \ln \Xi(T, V, 0) = -P_{\text{ph}} V. \quad (43)$$

Подчеркнем, что в такой процедуре мы нигде не используем специфики политипа как неупорядоченной системы, однако в реальности перебор политипов различной толщины с целью построения статистических сумм таких слоев представляет собой чрезвычайно громоздкую задачу, которую возможно решить только с использованием численных методов.

Возникновение дисперсии в политипе можно проиллюстрировать на простом примере. Система ХДУ представляет собой стопку плоскостей, где межплоскостное взаимодействие в приближении ближайших соседей отвечает локальной ГПУ или ГЦК структуре. Таким образом, поперечная мода в стопке плоскостей качественно эквивалентна одномерной цепочке с альтернированным взаимодействием. Рассмотрим одномерную цепочку одинаковых атомов массой m , в со-

стоянии равновесия расположенных на равных расстояниях a друг от друга вдоль оси z . Предположим, что атомы соединены упругими связями с двумя значениями силовых констант κ_1 и κ_2 . Простейшая периодическая структура с двумя чередующимися связями имеет вид $\dots\kappa_1\kappa_2\kappa_1\kappa_2\kappa_1\kappa_2\dots$, и период такой структуры равен $2a$, а ширина зоны, соответственно, в два раза меньше, чем у цепочки с одинаковыми связями. Наряду с акустической в спектре появляется оптическая ветвь, и ветви разделены щелью $\sqrt{2/m}|\sqrt{\kappa_1} - \sqrt{\kappa_2}|$ на краю зоны [35]. Спектральная плотность фононного спектра оказывается сосредоточенной в пределах акустической зоны, а отделенный щелью пик спектральной плотности оптических возбуждений по мере увеличения разности $|\kappa_1 - \kappa_2|$ приобретает δ -образный вид и сдвигается к краю расширенной зоны [36]. Если же связи расположены в последовательности $\dots\kappa_1\kappa_2\kappa_2\kappa_1\kappa_1\kappa_2\kappa_2\kappa_1\dots$, то период структуры становится равным $4a$, а зона становится еще в два раза уже по сравнению с предыдущим случаем, и, соответственно, суживается область существования акустических фононов. Можно видеть, что первая из цепочек качественно эквивалентна удвоенной ГПУ, а вторая — удвоенной ГЦК структуре. Вводя соответствующим образом дефекты упаковки в любую из этих структур, можно получить одномерный политип с любым структурным периодом p , вплоть до модели, эквивалентной ХДУ в формальном пределе $p \rightarrow \infty$. Несмотря на то, что вдоль c -оси формально отсутствует трансляционная симметрия, сплошность среды остается ненарушенной даже на микроскопическом уровне. При этом в решетке нет источников дальнедействующих упругих напряжений (центров дилатации), и длинноволновые фононы распространяются в ней как звуковые волны в однородной упруго-анизотропной сплошной среде (континуальный предел) со специфическим законом дисперсии вдоль направления, перпендикулярного базисным плоскостям. В этом состоит отличие исследованного нами случая от традиционных неупорядоченных систем [11,12,30,31], основанных преимущественно на моделях беспорядка типа твердых растворов замещения или внедрения, где наличие точечных или протяженных неоднородностей приводит к появлению квазилокальных частот в спектре кристалла и рассеянию решеточных фононов.

3. Обсуждение результатов

Обсуждаемая нами модель поддерживается тем обстоятельством, что аномалии механических свойств, теплоемкости и давления не наблюдаются в ${}^3\text{He}$, где решетка имеет ОЦК структуру, т.е. не содержит плотноупакованных базисных плоскостей. Проведенное рассмотрение показывает определяющую роль дисперсии в политипе для объяснения наблюдаемых свойств

твердого ${}^4\text{He}$. Правильный результат может быть получен, если учтено отсутствие трансляционной симметрии вдоль c -оси при сохранении дальнего кристаллического порядка в перпендикулярном направлении (c -ось остается осью симметрии третьего порядка при любой упаковке плоскостей в стопке). Таким образом, структура из хаотических дефектов упаковки является плотноупакованным квази-ГПУ кристаллом (с идеальным ближним порядком), полностью разупорядоченным (в смысле отсутствия дальнего порядка) в одном кристаллографическом направлении (в направлении c -оси). Физически такая структура реализуется благодаря малости энергии одиночного дефекта упаковки в стопке плоскостей, образованных атомами на треугольной решетке [13,15,37], вследствие чего вклад упаковочной энтропии в свободную энергию структурно разупорядоченной системы оказывается определяющим (при умеренных внешних давлениях) вплоть до самых низких температур. Возможность облегченного формирования дефектов упаковки означает малую базисную сдвиговую жесткость кристаллической решетки, и в этом смысле система ХДУ демонстрирует жидкоподобное поведение. В этой связи полезно отметить, что определенная (хотя и очень малая, но в принципе измеримая) сдвиговая жесткость, не связанная с вязкостью, в принципе, имеет место и в жидкой фазе [38].

Физическим механизмом текучести кристаллов является консервативное движение дислокаций в определенных кристаллографических системах скольжения [37,39]. Скольжение одной полной дислокации в базисной плоскости означает появление элементарного сдвига, равного вектору Бюргера величиной $a/\sqrt{2}$ (в кубических индексах вектор Бюргера равен $(a/2)[\bar{1}01]$), между частями кристалла, разделенными следом прошедшей дислокации. Для образования дефекта упаковки необходимо смещение двух соседних базисных плоскостей на расстояние $a/\sqrt{6}$ (в кубических индексах этот вектор равен $(a/6)[\bar{2}11]$) между двумя соседними потенциальными минимумами на треугольной решетке [37], и это смещение меньше, чем вектор Бюргера полной дислокации. По этой причине дефект упаковки образуется между берегами так называемых частичных дислокаций, возникающих при расщеплении полной дислокации [15,37]. Таким образом, возможно существование как «идеального» кристалла ХДУ, так и «дефектной» ХДУ структуры, в которой некоторые плотноупакованные плоскости содержат расщепленные дислокации, заключающие в себе ограниченные области, развернутые на угол $\pi/3$ по отношению к исходной ориентации. Расширение или захлопывание частичной дислокации под действием внешних напряжений означает, соответственно, распространение или устранение дефекта упаковки в плоскости, где он первоначально образовался. С другой стороны, сдвиг одной из плоскостей в стопке на вектор частичной

трансляции $a/\sqrt{6}$ означает локальное структурное ГПУ–ГЦК (или ГЦК–ГПУ) превращение, вследствие чего сдвиговые деформации в базисной системе полимера можно рассматривать как твердофазный структурный переход (мартенситное превращение) в многослойной системе [13].

Одной из проблем современной физики гелия является отсутствие адекватной интерпретации аномального поведения твердого ${}^4\text{He}$, наблюдаемого в торсионных экспериментах [10]. В течение ряда лет предпринимаются попытки приписать такое поведение гипотетическому состоянию «суперсолид», под которым понимается потеря сдвиговой жесткости кристаллов при приложении к образцу малых сдвиговых напряжений. При этом делаются попытки интерпретировать торсионные эффекты как некую условную «сверхтекучесть» твердого гелия, что, конечно, не соответствует истинному определению сверхтекучести как таковой. В действительности кристалл ${}^4\text{He}$ имеет конечную сдвиговую жесткость, которая возрастает с понижением температуры [40,41], и в этом смысле он ведет себя как нормальное твердое тело, механизм текучести которого состоит в легком скольжении решеточных дислокаций, приводящем к необратимым (пластическим) сдвиговым деформациям [39]. Политипная модель позволяет непротиворечивым образом интерпретировать легкость базисных деформаций в кристаллах ${}^4\text{He}$. В самом деле, базисное скольжение является единственным механизмом пластической деформации в структуре ХДУ, где пирамидальное скольжение невозможно по причине хаотической упаковки базисных плоскостей в направлении оси шестого порядка (дополнительные плоскости скольжения появляются только в идеальной ГПУ или ГЦК решетке). С другой стороны, структура ХДУ в твердом ${}^4\text{He}$ оказывается термодинамически выгодной вплоть до самых низких температур, поскольку в свободной энергии кристалла преобладает вклад упаковочной энтропии наряду с малой энергией дефекта упаковки. И, наконец, то обстоятельство, что вектор Бюргера частичной дислокации в $\sqrt{3}$ раз меньше вектора Бюргера полной дислокации, означает, что для продвижения частичной дислокации в базисной плоскости в соответствии с законом Пича–Келлера [37] необходимо, соответственно, меньшее сдвиговое напряжение. Кроме того, поскольку в политипе всегда действует только одна система скольжения, никакое деформационное упрочнение не препятствует легкому пластическому течению кристалла.

Возникает также вопрос о том, как описанные выше многослойные структуры твердого гелия могут деформироваться в условиях реального эксперимента, где образец находится под всесторонним сжатием (в торсионных экспериментах наличие сдвиговых напряжений, действующих на образец, очевидно). Здесь надо иметь в виду, что макроскопические политипы часто

реализуются в виде так называемых полидоменных структур [13], которые представляют собою поликристаллы, сформированные из анизотропных пластинчатых кристаллитов (политипных доменов) с различной пространственной ориентацией. В этом случае даже чистое всестороннее сжатие образца приводит к появлению сложноподобного состояния, при котором тензор напряжения для каждого домена содержит, в частности, сдвиговые компоненты. Кроме того, в реальном эксперименте давление на образец после блокировки капилляра передается через мембрану, жестко защемленную по ободу цилиндрической измерительной ячейки [1–3]. В этом случае твердый образец находится под воздействием прогиба мембраны, и аксиально симметричные дополнительные напряжения, связанные с этим прогибом, оказываются максимальными в центре и убывают в радиальном направлении по мере приближения к краю мембраны. Таким образом, образец как бы «выдавливается» из центра ячейки к ее краям. В результате такой деформации в образце, конечно, появляются сдвиговые компоненты напряжений.

В настоящее время принято считать, что политипные структуры реализуются в основном в металлах и металлических сплавах [13], однако есть все основания предполагать наличие таких структур и в криокристаллах, чем определяются необычные деформационные свойства, например, водорода и аргона [16,17]. Результаты настоящей работы показывают, что политипная модель оказывается эффективной также и при описании термодинамических свойств криокристаллов. Наша теория дает количественное объяснение температурных зависимостей фононного давления в отожженных (предположительно бездефектных, а значит, термодинамически равновесных) кристаллах. Что же касается давления в деформированных образцах, то деформированное состояние есть функция процесса, с помощью которого кристалл приведен в это состояние. В конечном счете, результат зависит от того, какого типа дефекты и в каком количестве были заведены в процессе деформации. Поскольку, как отмечено выше, деформация под мембраной является радиально-неоднородной, в итоге мы получаем образец с неоднородным распределением дефектов после деформации.

Как видно на рис. 4 и рис. 6, где экспериментальная зависимость $P_{\text{ph}}(T)$ для деформированного образца ${}^4\text{He}$ из работы [2] представлена как функция T^2 , T^3 и T^4 , указанная кривая демонстрирует очевидный излом в интервале температур 0,22–0,33 К. Если принять во внимание большой разброс экспериментальных данных при самых низких температурах, давление в деформированном гелии на низкотемпературном участке кривой $P_{\text{ph}}(T)$ с одинаковой степенью точности может быть аппроксимировано как квадратичной, так и линейной зависимостью от температуры. В то же время выше 0,3 К эта зависимость очевидно спрямля-

ется в координатах $\sim T^4$. Таким образом, вопрос о механизмах формирования зависимостей $P_{\text{ph}}(T)$ при низких температурах остается пока открытым, и одной из возможных интерпретаций здесь может быть концепция структурного превращения в политипе. Решение этой проблемы, однако, невозможно без существенного повышения точности низкотемпературных измерений.

Эффекты аномального поведения твердого ${}^4\text{He}$ в торсионных экспериментах, которые принято обозначать термином «суперсолид» [10], также могут быть непротиворечиво объяснены на основе политипной модели. В самом деле, текучесть кристаллов по определению есть легкое скольжение дислокаций [39]. Деформация политипа происходит фактически посредством расширения областей дефектов упаковки, ограниченных частичными дислокациями [15], и этот процесс имеет место в единственной системе базисного скольжения, так что деформационное упрочнение отсутствует. Стопорами, препятствующими скольжению частичных дислокаций, могут быть примеси ${}^3\text{He}$. В чистом ${}^3\text{He}$ эффекты «суперсолид» не наблюдаются, поскольку решетка ${}^3\text{He}$ вплоть до высоких давлений (порядка 100 атм) имеет неплотную упакованную ОЦК структуру, а для перехода в ГПУ фазу при низких давлениях плоскость (111) ОЦК кристалла должна претерпеть существенную дилатацию. Таким образом, деформационные процессы, аналогичные политипным превращениям, которые характерны для ${}^4\text{He}$, оказываются в ${}^3\text{He}$ энергетически невыгодными. Привлечение для объяснения поведения «суперсолид» моделей, основанных на механизмах скольжения нерасщепленных дислокационных сегментов [8,9], требует наличия в кристалле патологической плотности дислокаций ($\sim 10^{13} \text{ см}^{-2}$), что делает в принципе невозможным скольжение дислокаций вследствие взаимного пересечения сегментов и связанного с этим деформационного упрочнения, а для создания дислокационного наполнения такой плотности кристалл должен быть подвергнут патологической деформации, что, разумеется, нереально.

И, наконец, отметим, что понятие о «суперсолиде» было введено Мацудой и Цунето как возможность сосуществования диагонального и недиагонального дальних порядков в системе бозонов при $T = 0$ [42]. Концепция недиагонального дальнего порядка была введена в работах [43,44] для описания взаимодействия частиц в бозе-газе и применена в [45] к сверхтекучему состоянию в жидком ${}^4\text{He}$. Вопрос о том, возможно ли автоматическое перенесение соответствующей модели на кристаллический гелий, остается в настоящее время открытым. Вполне возможно, что в рамках политипной модели твердый ${}^4\text{He}$ можно будет интерпретировать как «полужидкий» кристалл, легко текучий в направлениях вдоль базисных плоскостей, однако пока не ясно, как может проявиться статистика

атомов ${}^4\text{He}$ (а не фононов, которые остаются бозонами независимо от статистики атомов решетки) в процессах пластического течения решетки гелия. Во всяком случае, ясно, что переходы по параметрам порядка в структуре хаотических дефектов упаковки могут оказаться перспективной моделью для интерпретации большинства экспериментально наблюдаемых явлений в ${}^4\text{He}$.

4. Заключение

Очевидно, что результаты, полученные в настоящей работе в континуальном (дебаевском) приближении, должны быть в перспективе подтверждены расчетами, проведенными на последовательном микроскопическом уровне. Тем не менее уже на данном этапе использованное приближение позволяет сделать весьма важные выводы. Модель политипа из хаотических дефектов упаковки в стопке 2D базисных плоскостей на треугольной решетке представляет собой модель плотноупакованной пространственной кристаллической решетки, одномерно-разупорядоченной в перпендикулярном базисным плоскостям направлении. Несмотря на то, что в этом направлении отсутствует трансляционная симметрия, оно сохраняет смысл кристаллографической оси симметрии третьего порядка при любом порядке следования двумерных базисных элементов, не нарушающем принцип плотнейшей упаковки и, следовательно, ближний порядок в среде. В этом смысле политип может быть интерпретирован как полужидкая среда (или анизотропная жидкость), где благодаря малой энергии дефекта упаковки возможно легкое межплоскостное скольжение в базисе. Такая модель упорядоченно-разупорядоченной упругой среды позволяет как адекватно описать аномальное поведение температурных зависимостей давления в кристаллах ${}^4\text{He}$, так и прояснить механизм легкого формоизменения твердого гелия при наличии приложенных к кристаллу сдвиговых напряжений. Таким образом, можно ожидать, что политипная модель даст возможность успешно интерпретировать широкий круг эффектов, которые в настоящее время принято понимать под терминами «glassy phase» и «supersolid».

1. А.А. Лисунов, В.А. Майданов, В.Ю. Рубанский, С.П. Рубец, Э.Я. Рудавский, А.С. Рыбалко, Е.С. Сыркин, *ФНТ* **38**, 589 (2012) [*Low Temp. Phys.* **38**, 459 (2012)].
2. И.А. Дегтярев, А.А. Лисунов, В.А. Майданов, В.Ю. Рубанский, С.П. Рубец, Э.Я. Рудавский, А.С. Рыбалко, В.А. Тихий, *ЖЭТФ* **138**, 699 (2010).
3. E.Y. Rudavskii, V.N. Grigor'ev, A.A. Lisunov, V.A. Maidanov, V.Y. Rubanskii, S.P. Rubets, A.S. Rybalko, and V.A. Tikhii, *J. Low Temp. Phys.* **158**, 578 (2010).
4. В.Н. Григорьев, В.А. Майданов, В.Ю. Рубанский, С.П. Рубец, Э.Я. Рудавский, А.С. Рыбалко, В.А. Тихий, *ФНТ* **34**, 431 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 344 (2008)].
5. V.N. Grigor'ev, V.A. Maidanov, V.Yu. Rubanskii, S.P. Rubets, E.Ya. Rudavskii, A.S. Rybalko, Ye.V. Symikov, and V.A. Tikhii, *Phys. Rev. B* **76**, 224524 (2007).
6. Е.О. Вехов, В.Н. Григорьев, В.А. Майданов, Н.П. Михин, В.Ю. Рубанский, С.П. Рубец, Э.Я. Рудавский, А.С. Рыбалко, Е.В. Сырников, В.А. Тихий, *ФНТ* **33**, 835 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 635 (2007)].
7. V.N. Grigor'ev and Ye.O. Vekhov, *J. Low Temp. Phys.* **149**, 41 (2007).
8. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **18**, 185 (1992) [*Low Temp. Phys.* **18**, 128 (1992)].
9. A.V. Balatsky, M.J. Graf, Z. Nussinov, and S.A. Trugman, *Phys. Rev. B* **75**, 094201 (2007).
10. Z. Nussinov, A.V. Balatsky, M.J. Graf, and S.A. Trugman, *Phys. Rev. B* **76**, 014530 (2007).
11. И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1982) [I.M. Lifshitz, S.A. Gredeskul, and L.A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems*, John Wiley Ltd., NY (1988)].
12. Дж. Займан, *Модели беспорядка*, Мир, Москва (1982) [J.M. Ziman, *Models of Disorder*, Cambridge University Press, London (1979)].
13. Б.И. Николин, *Многослойные структуры и политипизм в металлических сплавах*, Наукова думка, Киев (1984).
14. Н.В. Белов, *Структура ионных кристаллов и металлических фаз*, Изд-во АН СССР, Москва (1947).
15. Я.Д. Вишняков, *Дефекты упаковки в кристаллической структуре*, Металлургия, Москва (1970).
16. К.А. Чишко, *ФНТ* **15**, 106 (1989) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **15**, 61 (1989)]; Деп. ВИНТИ №6367-B88 (1988).
17. К.А. Чишко, *ФТТ* **31**, 283 (1989).
18. Д.М. Васильев, *Физическая кристаллография*, Металлургия, Москва (1972).
19. Л.Д. Ландау, *ЖЭТФ* **7**, 1227 (1937) [*Phys. Zs. Sowjet.* **12**, 579 (1937)].
20. Дж. Рейсленд, *Физика фононов*, Мир, Москва (1975) [J.A. Reissland, *Physics of Phonons*, John Wiley Ltd., London (1973)].
21. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1964).
22. Р. Кубо, *Статистическая механика*, Мир, Москва (1967) [R. Kubo, *Statistical Mechanics*, North Holland Co., Amsterdam (1965)].
23. R.K. Pathria, *Statistical Mechanics*, Butterworth-Heinemann, Oxford (1996).
24. Х. Бётгер, *Принципы динамической теории решетки*, Мир, Москва (1986) [Harald Böttger, *Principles of the Theory of Lattice Dynamics*, Akademie-Verlag, Berlin (1983)].
25. Т.Н. Анцыгина, И.И. Полтавский, М.И. Полтавская, К.А. Чишко, *ФНТ* **28**, 621 (2002) [*Low Temp. Phys.* **28**, 442 (2002)].
26. Yu.A. Freiman, S.M. Tretyak, A.G. Grechnev, A.F. Goncharov, and R.J. Hemley, *Phys. Rev. B* **90**, 024501 (2014).
27. A.G. Grechnev, S.M. Tretyak, and Yu.A. Freiman, *ФНТ* **36**, 423 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 333 (2010)].

28. Yu.A. Freiman, S.M. Tretyak, A. Grechnev, A.F. Goncharov, J.S. Tse, D. Errandonea, Ho-kwang Mao, and R.J. Hemley, *Phys. Rev. B* **80**, 094112 (2009).
29. М.В. Федорюк, *Метод перевала*, Наука, Москва (1977).
30. И.А. Господарев, В.И. Гришаев, А.В. Котляр, К.В. Кравченко, Е.В. Манжелей, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **34**, 829 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 655 (2008)].
31. И.А. Господарев, В.И. Гришаев, А.В. Еременко, М.С. Ключко, А.В. Котляр, Е.В. Манжелей, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **40**, 1296 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 1013 (2014)].
32. А.Г. Курош, *Курс высшей алгебры*, Наука, Москва (1965).
33. К.А. Чишко, *Акустический журнал* **35**, 527 (1989).
34. К.А. Чишко, *Акустический журнал* **36**, 153 (1990).
35. Г.Л. Коткин, В.Г. Сербо, *Сборник задач по классической механике*, Наука, Москва (1969).
36. Г. Лейбфрид, *Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов*, ГИФМЛ, Москва (1963) [G. Leibfried, *Gittertheorie der Mechanischen und Thermischen Eigenschaften der Kristalle*, Springer-Verlag, Berlin (1955)].
37. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Атомиздат, Москва (1972).
38. Я.И. Френкель, *Кинетическая теория жидкостей*, Наука, Ленинград (1975).
39. Ж. Фридель, *Дислокации*, Мир, Москва (1967).
40. J. Day and J. Beamish, *Nature* **427**, 853 (2007).
41. J. Day, O. Syshchenko, and J. Beamish, *Phys. Rev. B* **79**, 214524 (2009).
42. H. Matsuda and T. Tsuneto, *Suppl. Progr. Theor. Phys.* **46**, 411 (1970).
43. O. Penrose, *Philos. Mag.* **42**, 1373 (1951).
44. O. Penrose and L. Onsager, *Phys. Rev.* **104**, 576 (1956).
45. C.N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962).

The nature of the glassy phase in ^4He crystals

T.N. Antsygina, M.I. Poltavskaya, and K.A. Chishko

The model of close-packed polytype with a structure of chaotic stacking faults is applied to interpret anomalous thermodynamic properties of disordered glassy phase in solid HCP ^4He within a so-called supersolid state. The temperature dependences of phonon pressure are calculated theoretically and compared with the corresponding experimental data. A quantitative agreement between theory and experiment is found.

PACS: 67.80.B– Solid ^4He ;

61.72.Nn Stacking faults and other planar or extended defects;

61.44.–n Semi-periodic solids.

Keywords: solid helium, chaotic stacking faults, phononic pressure.