

Двойниковые границы как зародыши новой фазы при ОЦК—ГПУ-переходах в твердом гелии

© В.А. Лыках, Е.С. Сыркин*

Национальный технический университет „Харьковский политехнический институт“, Харьков, Украина

* Физико-технический институт низких температур НАН Украины, Харьков, Украина

E-mail: lykah@ilt.kharkov.ua, syrkin@ilt.kharkov.ua

(Поступила в Редакцию 17 марта 2009 г.)

В окончательной редакции 15 июня 2009 г.)

Рассматривается обратимость когерентного фазового перехода ОЦК—ГПУ. Проведена топологическая классификация и качественное описание возникающих зерен (доменов) и 60, 90, 120, 180° двойниковых границ. Введен термодинамический параметр отклонения от равновесия фаз. Этот параметр позволил аналитически описать тонкую структуру 180° границы, ее распад на две межфазные границы при обратном фазовом переходе. Показано, что вблизи фазового перехода это описание применимо к 60, 90, 120° границам. Показано, что двойниковые границы являются зародышами исходной (материнской) фазы, структура которой может восстанавливаться полностью. На этой основе объяснена причина асимметрии фазового перехода ОЦК—ГПУ, наблюдаемая в экспериментах, проводимых на твердом ^4He . Предложена схема нового эксперимента, обрабающая асимметрию этого фазового перехода.

1. Введение

Недавние оптические эксперименты [1] показали, что в твердом ^4He при ОЦК (объемно центрированный куб)—ГПУ (гексагональная плотная упаковка) фазовом переходе (ФП) формируется поликристалл. Эксперимент обнаружил обратимое и повторяемое перемещение межфазной границы (МФГ) при смещении условий равновесия фаз. Последнее, а также кинетика превращения побудили авторов [1] к обсуждению аналогии мартенситного перехода и ОЦК → ГПУ-ФП в твердом ^4He . Исследование кинетики ОЦК—ГПУ-превращения методом прецизионного измерения давления [2,3] выявило обратимое и повторяемое изменение давления и асимметрию ФП при циклировании по температуре. В работах [2,3] асимметрией ФП называют мергенситоподобную (с переохлаждением и задержкой) кинетику ОЦК → ГПУ-перехода и легкий обратный ОЦК → ГПУ-переход на линии равновесия фаз. К настоящему моменту асимметрия этого ФП еще не получила своего объяснения.

Мартенситный ФП как непрерывный переход между ОЦК- и ГЦК-решетками был впервые описан Бейном, а первые реальные взаимные ориентации этих решеток (Курдюмова—Закса и Нишиямы) были найдены на основе рентгеноструктурных данных [4,5]. Курдюмовым [4–6] были введены основные положения мартенситной теории: мартенситный ФП имеет бездиффузионный кооперативный характер: атомные сдвиги коррелированы в различных элементарных ячейках и не превышают размер ячейки, имеются непрерывные преобразования исходной (материнской) решетки в решетку мартенситной фазы.

Мартенситный ФП описан в случае ОЦК—ГПУ-перехода в сплавах железа [6] и в таллии [7], в которых

справедливы соотношения или ориентировка Нишиямы

$$(110)_{\text{bcc}} \parallel (001)_{\text{hcp}}, \quad [111]_{\text{bcc}} \parallel [110]_{\text{hcp}}, \quad (1)$$

где индексы bcc и hcp означают ОЦК- и ГПУ-решетку соответственно.

В работе [8] нами было предложено применить к твердому гелию микроскопический механизм непрерывного преобразования между ГПУ- и ОЦК-кристаллическими решетками, следуя [7,9], построена континуальная модель МФГ для двух- и трехъямного потенциалов. Преобразование ГПУ—ОЦК по модели Ванэйблса [9] соответствует ориентировке Нишиямы (1) и включает два этапа. 1) Деформация элементарной ячейки от ромбического основания ГПУ (0001)-плоскостей с углом 60° к углу $\approx 70.5^\circ$. 2) Скольжение атомов каждой второй деформированной (0001)-плоскости ГПУ из положения H над центром треугольного основания к положению b над центром большей стороны треугольного основания, формирование (110)-плоскости ОЦК. В [8] введена обобщенная координата ξ , изменяющаяся по оптимальной траектории в пространстве параметров при одновременной подстройке других параметров (угол, деформация). За координату ξ принято смещение центрального атома ячейки между положениями H и b . Для трехъямного потенциала смещение происходит по прямой между позициями H_1-b-H_2 над плоскостью (0001), где позиции H_1 и H_2 расположены над центрами соседних треугольников (рис. 1).

Общее рассмотрение модели двухъямного термодинамического потенциала для описания МФГ в мартенситном переходе использовалось в [10]. В теории ФП первого рода, которым и является мартенситный переход [4,5], используют трехъямный потенциал [11] в приближении Гинзбурга—Ландау. Объемная плотность

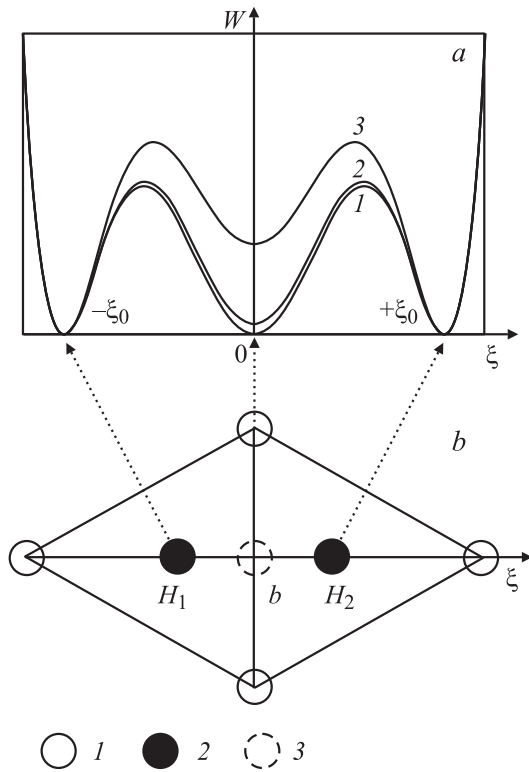


Рис. 1. *a*) Форма трехъямного термодинамического потенциала в зависимости от параметра ξ относительно смещения плоскостей решетки при различных значениях параметра отклонения от равновесия фаз ϕ . 1 — $\phi_1 = 10^{-4}\xi_0^2$; 2 — $\phi_2 = 10^{-2}\xi_0^2$; 3 — $\phi_3 = 9 \cdot 10^{-2}\xi_0^2$. *b*) Деформированная плоскость (0001) ГПУ или (110) ОЦК. 1 — атомы плоскости А. Положения атома соседней плоскости В: H_1 и H_2 — для соседних ГПУ-ячеек (2), b — для ОЦК-фазы (3). Пунктирные стрелки указывают соответствие положений H_1 – b – H_2 минимумам потенциала.

свободной энергии с учетом пространственно-неоднородного члена и трехъямного потенциала может быть записана в виде [8,12]

$$w(\xi, z) = \frac{\alpha}{2} \left(\frac{d\xi}{dz} \right)^2 + \frac{k_6 \xi^6}{6} - \frac{k_4 \xi^4}{4} + \frac{k_2 \xi^2}{2}, \quad (2)$$

где α — параметр дисперсии, z — координата вдоль нормали к МФГ, $k_6, k_4, k_2 > 0$ — феноменологические параметры потенциала. Условие совпадения плотности энергии внутри объема фаз при равновесии позволяет привести потенциал (2) к виду

$$w(\xi, z) = \frac{\alpha}{2} \left(\frac{d\xi}{dz} \right)^2 + \frac{k_6}{6} \xi^2 (\xi^2 - \xi_0^2)^2 \quad (3)$$

с минимумами и максимумами однородной части в точках

$$\xi_{0\text{вс}}^{(3)} = 0; \quad \xi_0^2 \equiv \xi_{0\text{нр}}^{(3)2} = \frac{3k_4}{4k_6}; \quad \xi_{0\text{макс}}^{(3)2} = \frac{k_4}{4k_6}. \quad (4)$$

Варьируя свободную энергию (3) по ξ , получим дифференциальное уравнение, интегрирование которого с

учетом граничных условий дает форму МФГ [8]

$$\xi^2 = \xi_0^2 \frac{\exp(\pm z/l_{pb}^{(3)})}{1 + \exp(\pm z/l_{pb}^{(3)})}; \quad l_{pb}^{(3)} = \frac{1}{2\xi_0^2} \sqrt{\frac{3\alpha}{k_6}} = \frac{2}{k_4} \sqrt{\frac{\alpha k_6}{3}}. \quad (5)$$

Здесь $\xi_0 = \xi_0^{(3)} = l_{nb}$ — величина атомного сдвига между ГПУ- и ОЦК-положениями; $l_{pb}^{(3)}$ — характерная ширина МФГ. Плюс или минус перед координатой z ставится в зависимости от того, с какой стороны МФГ находится ОЦК-фаза. Подстановка зависимости относительно смещения слоев от координаты в (3) и последующее интегрирование дают поверхностную плотность энергии МФГ.

По оценкам [8] ширина МФГ может колебаться в пределах $l_{pb} \simeq 0.64$ – 3.5 nm, а поверхностная плотность энергии МФГ — в пределах $w_{pb} \simeq (4$ – $17) \cdot 10^{-5}$ J/m². Экспериментальные значения поверхностной плотности энергии [2,3] лежат между минимумом и средней частью приведенного диапазона оценок. Ширина МФГ по данным моделирования методом молекулярной динамики составляет 6–8 межатомных расстояний, т.е. 2–3 nm [13].

В металлах упругие напряжения значительны, так что мартенситный ФП вовлекает в превращение только часть кристалла [4,5]. Феноменологическая теория размытых мартенситных переходов, чувствительная к структурным, размерным, кинетическим факторам, хорошо описывает рост степени превращения в зависимости от температуры, давления, деформации решетки при структурной перестройке (см. работу [14] и ссылки в ней). Твердый гелий — гораздо менее жесткий материал [15], имеющий упругие модули на порядки меньше, чем в металлах. Поэтому можно ожидать, что степень превращения при ФП и когерентность МФГ в твердом гелии могут быть значительно выше.

В настоящей работе ставится задача исследования расщепления двойниковых границ в ОЦК- и ГПУ-фазах и объяснения на этой основе асимметрии при структурном фазовом переходе ОЦК–ГПУ, наблюдаемой в эксперименте [2]. В предлагаемом нами подходе удастся не только объяснить эксперимент [2], но и предложить, новый эксперимент для выяснения механизма рассматриваемого перехода в твердом гелии.

2. Модель 180° (антифазной) границы. Параметр отклонения от равновесия фаз

Мартенситный ФП является переходом первого рода [5,10] и описывается трехъямным термодинамическим потенциалом (2). В точке ФП фазы находятся в равновесии, и термодинамический потенциал принимает более простой вид (3). При изменении внешних параметров (температуры T и давления p) в трехъямном потенциале изменяется относительная глубина минимумов,

соответствующих разным фазам. Все три параметра $k_6(T, p)$, $k_4(T, p)$, $k_2(T, p)$ термодинамического потенциала $w(\xi, z)$ (2) зависят от внешних факторов, относительная глубина минимумов в трехъямном потенциале записывается через них очень громоздко.

Введем параметр ϕ отклонения от равновесия фаз при помощи замен

$$k_4 = \frac{2k_6}{3} (2\xi_0^2 - \phi); \quad k_2 = \frac{k_6}{3} \xi_0^2 (\xi_0^2 - 2\phi); \quad C_{Tp} = \frac{k_6}{6\nu} \xi_0^4 \phi, \quad (6)$$

где C_{Tp} — дополнительное слагаемое к потенциалу (2). Тогда получим форму записи термодинамического потенциала, близкую к (3),

$$w(\xi, z) = \frac{\alpha}{2} \left(\frac{d\xi}{dz} \right)^2 + \frac{k_6}{6} (\xi^2 + \phi)(\xi^2 - \xi_0^2)^2. \quad (7)$$

В этом потенциале минимумы ГПУ-фазы сохраняются: $w_{hcp}(\pm\xi_0) = 0$, а минимум ОЦК-фазы изменяет свой уровень $w_{bcc}(0) = k_6 \xi_0^4 \phi / 6$ пропорционально ϕ . Параметр отклонения от равновесия фаз ϕ непосредственно описывает это главное свойство термодинамического потенциала вблизи ФП (рис. 1). ОЦК-фаза устойчива при $\phi < 0$, ГПУ — при $\phi > 0$, их равновесие — при $\phi = 0$, когда термодинамический потенциал (7) переходит в (3). Согласно теории фазовых переходов Ландау [16], вблизи критической точки $T_c p_c$ параметр ϕ линейно зависит от внешних термодинамических параметров: $\phi = a_T(T - T_c) + a_p(p - p_c)$, где a_T, a_p — постоянные.

Рассмотрим область устойчивости ГПУ-фазы при $\phi > 0$. Варьирование свободной энергии с плотностью (7) по ξ приводит к дифференциальному уравнению, интегрирование которого при учете граничных условий $\xi(z \rightarrow \pm\infty) = \mp\xi_0$ и использовании справочника [17] дает форму 180° границы между зернами ГПУ-фазы

$$\xi_T(z^*) = -\xi_0 \frac{\sqrt{\phi} \operatorname{sh}(z^*/2)}{\sqrt{\phi \operatorname{ch}^2(z^*/2) + \xi_0^2}}, \quad z^* \equiv \frac{z}{l_{tb}}. \quad (8)$$

Здесь характерная ширина 180° границы описывается выражением

$$l_{tb} = \frac{1}{2\xi_0 \sqrt{\xi_0^2 + \phi}} \sqrt{\frac{3\alpha}{k_6}}. \quad (9)$$

При $\phi \rightarrow 0$ она совпадает с характерной шириной МФГ: $l_{tb} = l_{pb}$. Поведение зависимости (8) представлено на рис. 2, b при различных значениях параметра ϕ .

Отметим, что решения (5) для МФГ и (8) для двойниковой границы (ДГ) принципиально не переходят друг в друга при $\phi = 0$, так как имеют различную топологию. А именно решение (8) при $\phi \rightarrow 0$ включает в себя две МФГ. Зависимости (5), (8) совместно представлены на рис. 2, b. Все значения параметра $\phi > 0$ брались для

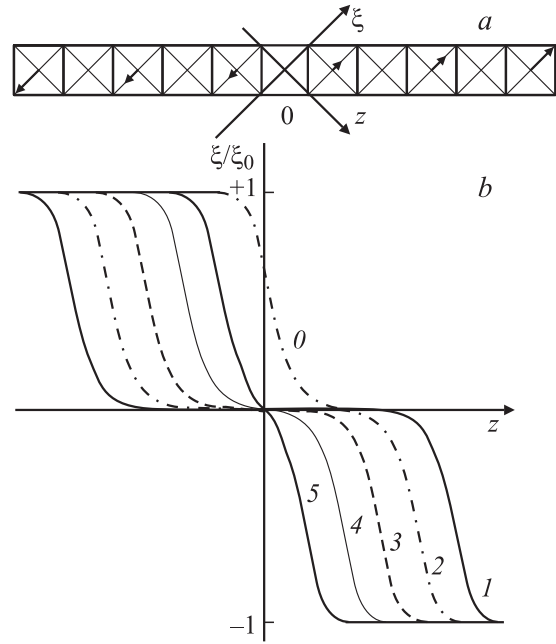


Рис. 2. 180° двойниковая (антифазная) граница в ГПУ-фазе. а) Дискретное представление. Стрелки — смещения атомов в направлении $[110]$ исходной ОЦК-решетки. Квадраты — проекции ячеек. б) Континуальное представление (8). Кривые соответствуют различным значениям параметра отклонения от равновесия фаз: 1 — $\phi_1 = 10^{-10} \xi_0^2$; 2 — $\phi_2 = 10^{-8} \xi_0^2$; 3 — $\phi_3 = 10^{-6} \xi_0^2$; 4 — $\phi_4 = 10^{-4} \xi_0^2$; 5 — $\phi_5 = 10^{-2} \xi_0^2$. 0 — МФГ (5).

диапазона устойчивости ГПУ-фазы. Тем не менее ДГ между ГПУ-зернами расщепляется на две МФГ. Таким образом, ДГ являются зародышами при возникновении прежней (исходной или материнской) ОЦК-фазы. При этом зарождение этой фазы происходит безактивационно и еще до достижения условий равновесия фаз.

Для аналитического описания такой связи запишем приближенное решение как сумму двух МФГ, находящихся в точках $\pm z_0$. Поведение приближенного и точного решения (8) совпадает при следующей связи параметров:

$$\phi = 4\xi_0^2 e^{-z_0^*}. \quad (10)$$

Еще раз подчеркнем, что с учетом связи (10) параметр отклонения от равновесия фаз непосредственно связан с расстоянием между МФГ (рис. 3), т.е. с размером $L = L^* l_{tb}$ зародыша новой фазы при обратном ФП

$$L^* = 2z_0^* = -2 \ln \left(\frac{\phi}{4\xi_0^2} \right). \quad (11)$$

3. Классификация двойниковых границ

Выше введен параметр порядка (ПП), совпадающий со смещением атомов (атомных плоскостей) по прямой. Эта линия соединяет соседние энергетические минимумы ГПУ—ОЦК—ГПУ. В действительности существует

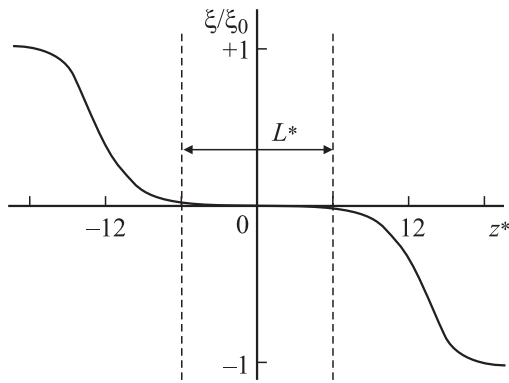


Рис. 3. Размер L^* зародыша ОЦК-фазы при расщеплении двойниковой границы в ГПУ-фазе на две МФГ согласно (11). Параметр отклонения от равновесия фаз $\phi = 4 \cdot 10^{-6} \xi_0^2$.

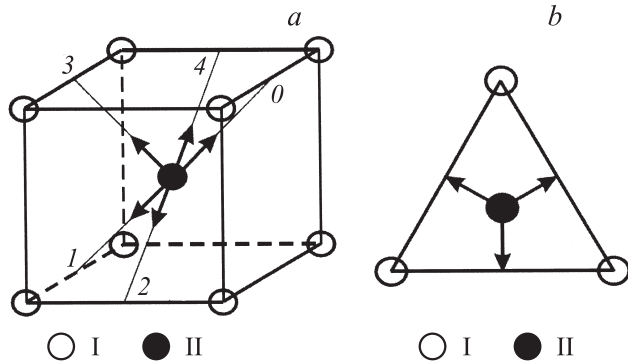


Рис. 4. Смещения атомов (стрелки) в разных зернах (доменах) при ФП. *a* — из ОЦК- в ГПУ-фазу. I — атомы в вершинах ОЦК-ячейки, II — смещающийся атом в центре ячейки, θ — ориентация смещений в выбранном домене (смещается вся атомная плоскость типа (110)), 1–4 — ориентация смещений в домене, образующем с доменом θ двойниковую границу 180, 120, 90 и 60° соответственно. *b* — из ГПУ- в ОЦК-фазу. I — атомы плоскости A, II — атомы плоскости B (смещаются). Всего возможно три вида доменов, образующих по две 120° двойниковые границы.

несколько энергетически эквивалентных позиций при смещении атома из центрального положения в элементарной ячейке. Рассмотрим их подробнее.

Рассмотренные выше смещения при переходе в ГПУ-фазу происходят вдоль одной из семейства атомных плоскостей {110} ОЦК-решетки. Всего таких плоскостей 6, а возможных направлений смещения в них 12 (по числу ребер) для одной из подрешеток (рис. 4). Таким образом, из ОЦК-монокристалла возможно образование 12 зерен ГПУ. Углы между направлениями смещений внутри ГПУ-доменов можно определить из рис. 4. Некоторый домен (0 на рис. 4) может иметь несколько видов ДГ с различным числом возможных кристаллографических ориентаций: одну 180°, четыре 120°, две 90°, четыре 60°. Всего возможно существование 11 ориентаций 4 видов границ и слияние эквивалентных доменов (нулевой или 12-й вид). Топологическое

различие между доменами в 180° (антифазной) границе состоит в смене чередования *АВАВ*... плоскостей (110) в одном домене на чередование *ВАВА*... в другом. Топологическое различие между доменами в 120°, 90°, 60° ДГ состоит и в смене чередования, и в повороте плоскостей (110) в разных доменах. Минимум энергии деформации кристаллической решетки достигается при симметричном расположении доменов относительно ДГ, показанном для двух возможных 90° ДГ на рис. 5, *a, b*. Именно при таком сопряжении решеток отсутствуют дислокации несоответствия [4].

При образовании ОЦК-фазы смещение одной из подрешеток в ГПУ-кристалле возможно в трех направлениях. Соответствующие смещения плоскостей между минимумами ГПУ–ОЦК показаны на рис. 4, *b*. Таким образом, из ГПУ-монокристалла возможно образование трех зерен (доменов) ОЦК, расположенных под углом 120°.

Пусть в плоскости ПП между энергетическими минимумами ГПУ–ОЦК–ГПУ показан на рис. 6, *a, b*; между минимумами ОЦК–ГПУ–ОЦК — на рис. 6, *c*. Возможно, при малой толщине ДГ путь „сглаживает“, скругляет угол, особенно, если угол острый, что требует дальнейшего более детального исследования.

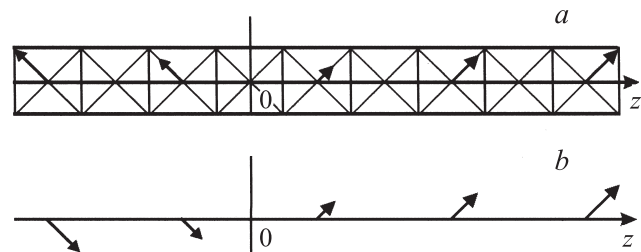


Рис. 5. Два типа 90° двойниковых границ в ОЦК-фазе с симметричным (*a*) и антисимметричным (*b*) смещениями относительно плоскости границы одной из подрешеток в разных доменах. Симметричное расположение доменов относительно границы соответствует отсутствию макроскопических деформаций решетки [4].

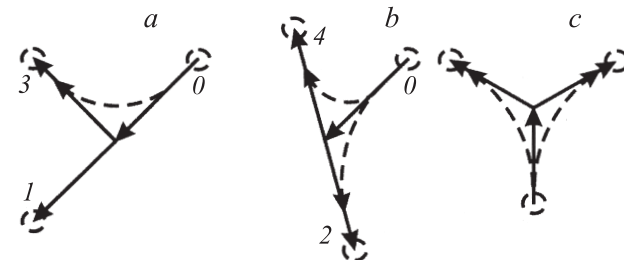


Рис. 6. Пути изменения на плоскости параметра порядка в двойниковых границах. Сплошные стрелки соответствуют смещениям на рис. 4, *a, b*. 0–4 — смещения в доменах на рис. 4, *a*. Штриховые стрелки — примерный путь при малой толщине двойниковых границ: *a* — 180° и 90° границы ГПУ–ОЦК–ГПУ, *b* — 120° и 60° границы ГПУ–ОЦК–ГПУ, *c* — 120° границы ОЦК–ГПУ–ОЦК.

При столь сложной пространственной эволюции ПП необходимо описывать не только модуль, но и направления смещений атомных плоскостей. Введем углы $\varphi(z)$, $\vartheta(z)$, описывающие ориентацию векторного ПП $\xi(z)$ аналогично [4]. Введем $\vartheta(z)$ как угол поворота плоскости (110) относительно оси [001], лежащей в этой же плоскости. Для описания 180 и 90° ДГ достаточно этого угла. Для описания 120 и 60° ДГ введем $\varphi(z)$ как угол в плоскости (110) между осью [001] и новой осью поворота этой плоскости. Тогда для 60° ДГ угол между направлениями [001] и [111] составляет $\varphi(z) \simeq 55^\circ$, а угол $\vartheta(z) = 120^\circ$. Для 120° ДГ угол между [001] и $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ составляет $\varphi(z) \simeq 145^\circ$, а угол $\vartheta(z) = 120^\circ$.

Ограничимся случаем широких ДГ, когда уже вполне заметно их расщепление на две МФГ. Все изменения ориентации происходят тогда при исчезающе малых значениях $|\xi(z)| \rightarrow 0$ (на рис. 6 это ломаные пути). Ориентация $\xi(z)$ меняется на расстояниях $l_\phi \simeq l_{pb}$, много меньших ширины прослойки другой фазы L_n (11). Углы можно аппроксимировать ступенчатой функцией Хевисайда $\theta(z)$: для 180° и 90° ДГ $\vartheta(z) = \vartheta_0\theta(z)$, для 120° и 60° ДГ $\vartheta(z) = \vartheta_0\theta(z)$ и $\varphi(z) = \varphi_0\theta(z)$. В этом случае при описании поведения векторного ПП $\xi(z)$ достаточно отделить описание для его модуля $\xi(z)$ и использовать метод, развитый для 180° ДГ (7), (8).

4. Обсуждение экспериментов в твердом ${}^4\text{He}$

В экспериментах [2,3] применяют метод прецизионного измерения давления при внешних воздействиях на превращения в твердом и жидком ${}^4\text{He}$. Из жидкой фазы ${}^4\text{He}$ изначально получали ОЦК-кристалл с понижением температуры при постоянном объеме. При дальнейшем охлаждении методы прецизионного измерения давления обнаружена мартенситоподобная кинетика перехода из ОЦК- в ГПУ-фазу. Наблюдалась задержка этого ФП при переохлаждении ниже линии фазового равновесия на p - T -диаграмме. Траектория на p - T -плоскости в эксперименте [2,3] показана на рис. 7. Возникновение зародышей в этой области описывается теорией гомогенного зародышеобразования, хорошо согласующейся с экспериментом [3].

Обратное превращение из ГПУ- в ОЦК-фазу происходит при повышении температуры. Его ход показан на том же рис. 7 стрелкой $0b$. В обратном ФП возврат из ГПУ- в ОЦК-фазу фиксируется в эксперименте прямо на линии равновесия без какой-либо задержки при перегреве. Таким образом, в эксперименте наблюдается ярко выраженная асимметрия фазового перехода (термин авторов работ [2,3]). Прямой переход ОЦК \rightarrow ГПУ требует переохлаждения и носит активационный характер. Обратный переход ГПУ \rightarrow ОЦК при нагреве идет без задержки, перегрева и т.д. К настоящему моменту это обстоятельство еще не получило своего объяснения.

Мы объясняем факт безактивационного характера обратного ФП ГПУ \rightarrow ОЦК следующим образом.

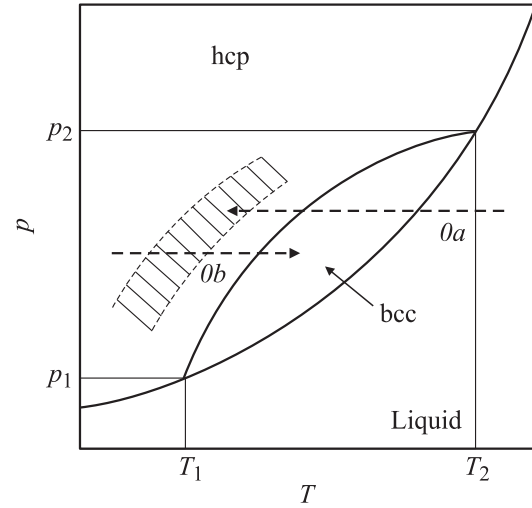


Рис. 7. Фазовая диаграмма ${}^4\text{He}$ вблизи ОЦК-фазы. Отмечены нижняя ($T_1 = 1.464 \text{ K}$, $p_1 = 26.27 \cdot 10^5 \text{ Pa}$) и верхняя ($T_2 = 1.763 \text{ K}$, $p_2 = 30.13 \cdot 10^5 \text{ Pa}$) тройные точки. Штриховые стрелки — пути изменения параметров при прямом ($0a$) и обратном ($0b$) фазовом переходе ОЦК–ГПУ. Заштрихована область переохлажденной ОЦК-фазы в эксперименте [2].

В эксперименте всегда получали из жидкого ${}^4\text{He}$ ОЦК-кристалл. Дальнейшее охлаждение приводит к мартенситоподобному появлению ГПУ-зародышей. Мы предполагаем, что аналогично металлам при появлении зародышей выполняются ориентационные соотношения Нишиямы [6] для когерентного сопряжения ОЦК- и ГПУ-фаз. Не исключены другие условия сопряжения фаз, важна их когерентность. Справедливость выполнения ориентационных соотношений Нишиямы для ${}^4\text{He}$ можно было бы проверить прямыми рентгеновскими измерениями, аналогично выполненным при установлении соотношений Курдюмова–Закса и Нишиямы [5,6] для ОЦК–ГЦК-переходов. Первоначально беспорядочно появившиеся зародыши ГПУ-фазы имеют ориентации, показанные на рис. 4. Исходные зародыши ГПУ-фазы полностью сливаются при достаточном переохлаждении и выдержке. Зерна с разной ориентировкой (разные домены) разделены ДГ, описанными выше.

Образовавшиеся ДГ являются топологическими дефектами. Они могут быть устранены при отжиге [4–6], когда часть зерен поглощается диффузионно. Число зародышей в мартенсите растет с переохлаждением [4]. В поликристалле исходной ОЦК-фазы идет когерентное образование доменов в каждом зерне. Возможна потеря когерентности участками границ вследствие больших деформаций, но они минимальны при симметричном расположении доменов относительно ДГ (рис. 6).

При нагреве обратный ФП ГПУ \rightarrow ОЦК идет путем описанного выше расщепления ДГ на две МФГ. Как отмечалось, такое расщепление происходит еще до достижения условий равновесия фаз на диаграмме. Таким образом, топологический дефект — ДГ — несет в себе память об исходной ОЦК-прафазе. Поэтому обратный

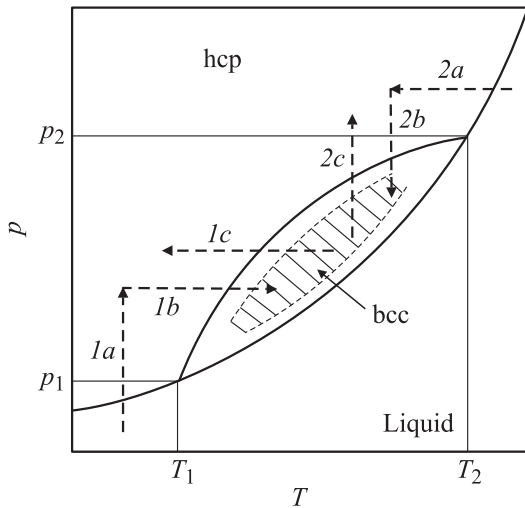


Рис. 8. Предлагаемые пути изменения термодинамических параметров для получения задержки перехода ГПУ → ОЦК (область задержки заштрихована). Штриховые стрелки — пути обхода нижней (1) и верхней (2) тройных точек.

ФП ГПУ → ОЦК начинается, по сути, еще до линии равновесия фаз и связан с топологической памятью о прафазе, сосредоточенной в ДГ. Упругие деформации доменов только способствуют обратному переходу. По нашему мнению, именно эта топологическая память является физической причиной асимметрии ФП ГПУ ↔ ОЦК, наблюдаемой в эксперименте.

На основе проведенного выше анализа можно предложить метод проведения эксперимента, который изменит асимметрию ФП ОЦК–ГПУ на обратную. А именно задержка будет происходить при переходе ГПУ → ОЦК, а обратный переход ГПУ ← ОЦК будет осуществляться безактивационно.

Для достижения такой кинетики ФП ГПУ ↔ ОЦК необходимо из жидкой фазы получить сначала ГПУ моно- или поликристалл, затем — совершить переход ГПУ → ОЦК. Такой переход должен идти активационным путем. Образовавшиеся в результате домены ОЦК-фазы будут ориентированы определенным образом, указанным выше. ДГ, возникающие между доменами ОЦК-фазы, несут информацию о материнской прафазе ГПУ. Обратный переход ГПУ ← ОЦК должен проходить безактивационно путем расщепления ДГ.

Возможна экспериментальная реализация такого подхода при изменении внешних термодинамических параметров (температуры и давления) двумя разными путями, показанными в плоскости $T-p$ -диаграммы на рис. 8. В используемом методе реализации ФП жидкий гелий ↔ ОЦК ↔ ГПУ при $V = \text{const}$ изменяется только один внешний параметр — температура, относительно небольшие скачки давления связаны с изменением объема фаз. Предлагаемый метод труднее реализовать экспериментально, так как он требует изменения обоих внешних параметров: T и p . Область ОЦК при переходе из жидкой фазы можно обойти двумя

путями, каждый из которых включает в себя по два участка с изменением разных параметров.

1) Первый путь проходит из области температур и давлений более низких, чем в нижней тройной точке: $T < T_1$ и $p < p_1$ на рис. 8. Переход в ОЦК-фазу возможен в два этапа. 1а) При $T = \text{const}$ необходимо поднять давление до попадания в область параметров ОЦК-фазы $p_1 < p < p_2$. Происходит ФП сверхтекучий гелий II → ГПУ. 1б) При $p = \text{const}$ необходимо поднять температуру до попадания в область ОЦК-фазы $T_1 < T < T_2$. ФП ГПУ → ОЦК относится к переходам активационного типа с задержкой, перегревом и другими признаками мартенситоподобной кинетики.

2) Второй путь проходит из области температур и давлений более высоких, чем в верхней тройной точке: $T > T_2$ и $p > p_2$ на рис. 8. Для перехода в область ОЦК-фазы необходимо провести два процесса. 2а) При $p = \text{const}$ охладить образец до попадания в область параметров ОЦК-фазы $T_1 < T < T_2$. Происходит ФП жидкий гелий → ГПУ. 2б) При $T = \text{const}$ необходимо снизить давление до попадания в область параметров ОЦК-фазы $p_1 < p < p_2$. Должен происходить ФП ГПУ → ОЦК активационного типа с задержкой, пониженным давлением.

Обратный ФП ОЦК → ГПУ может идти двумя путями независимо от того, как получена ОЦК-фаза. 1с) При постоянном давлении (объеме) $p \approx \text{const}$ необходимо понижать температуру. 2с) При постоянной температуре $T \approx \text{const}$ следует увеличивать давление до выхода из ОЦК-фазы. Обратный ФП, теперь уже ОЦК → ГПУ, должен идти путем безактивационного расщепления ДГ в ОЦК-фазе и зарождения на них прафазы ГПУ.

Переход из жидкой фазы путями 1 и 2 может иметь различия в кинетике, числе и размерах зерен ГПУ. Так, переход из сверхтекучей фазы имеет свою специфику вблизи нижней тройной точки [1]. Кроме того, может различаться дефектность структуры ГПУ-кристалла, так как на пути 1 заметно меньше температура кристаллизации. Возникшие особенности строения ГПУ могут приводить к различиям в кинетике перехода в ОЦК-фазу по путям 1 и 2. Само количество доменов ОЦК-фазы (3), зарождающихся в монокристалле ГПУ, существенно меньше количества доменов ГПУ-фазы (12), зарождающихся в ОЦК-фазе. Это обстоятельство может стать главным в развитии двойников, кинетике прямого и обратного переходов ГПУ → ОЦК.

5. Заключение

1) Микроскопический механизм, развитый для мартенситного превращения в металлах, применен к описанию непрерывного преобразования между ОЦК- и ГПУ-кристаллическими решетками при ФП в твердом ^4He . Построена континуальная модель когерентной межфазной границы между ОЦК- и ГПУ-фазами и 180° двойниковой границы в кристалле ГПУ. Найдена их форма, аналитически показан процесс распада ДГ и зарождения на ее месте ОЦК-фазы.

2) Проведена топологическая классификация, найдено число возникающих в монокристалле ОЦК-зерен (доменов) ГПУ-фазы, а в монокристалле ГПУ — зерен ОЦК-фазы, и соответствующих ДГ. Показано, что в 120, 90 и 60° ДГ необходимо учитывать векторный характер параметров порядка. Показано, что в окрестности ФП, когда заметно расщепление ДГ на две МФГ, можно разделить координатные зависимости величины и направления ПП. В этом случае для величины ПП применимо аналитическое описание, развитое для 180° ДГ.

3) Указана причина асимметрии ФП ОЦК–ГПУ в экспериментах, проводимых на твердом ^4He : в них при охлаждении из жидкой фазы сначала получали ОЦК-кристалл, затем ГПУ (пороговое образование зародышей). В обратном ФП при нагреве топологические дефекты — ДГ и в ГПУ-фазе — распадаются на пары МФГ с образованием ОЦК-фазы еще до достижения условия равновесия фаз.

4) Предложена схема обращения асимметрии ФП ОЦК–ГПУ в твердом ^4He в планируемых экспериментах: необходимо получить из жидкого гелия сначала ГПУ-фазу, а затем из нее ОЦК-фазу. В предлагаемых экспериментах должны изменяться два внешних термодинамических параметра — давление и температура. Предложены два различных пути на T – p -диаграмме в обход тройных точек.

Список литературы

- [1] M. Maekawa, Y. Okumura, Y. Okuda. Phys. Rev. B **65**, 144 525 (2002).
- [2] А.П. Бирченко, Е.О. Вехов, Н.П. Михин, А.В. Полев, Э.Я. Рудаковский. ФНТ **32**, 12, 1471 (2006).
- [3] V.N. Grigor'ev, N.P. Mikhin, E.Y. Rudavskii, Y.O. Vekhov. JLTР **150**, 1, 47 (2008).
- [4] Дж. Кристиан. Теория превращений в металлах и сплавах. Мир, М. (1978). 808 с.
- [5] Л.И. Лысак, Б.И. Николин. Физические основы термической обработки стали. Наук. думка, Киев (1975). 304 с.
- [6] Z. Nishiyama. Martensitic Transformation. Academic Press, NY. (1988). 467 p.
- [7] M. Iizumi. J. Phys. Soc. Jpn. **52**, 2, 549 (1982).
- [8] В.А. Лыках, Е.С. Сыркин. Изв. РАН. Сер. физ. **71**, 8, 1174 (2007).
- [9] J.A. Venables. Phil Mag. **7**, 73, 35 (1962).
- [10] А.Л. Ройтбурд. Современное состояние теории мартенситных превращений. В сб.: Несовершенства кристаллического строения и мартенситные превращения / Под ред. Ю.А. Осипьяна, Р.И. Энтина. Наука, М. (1972). С. 7.
- [11] F. Falk. J. de Physique. Coll. C4 **43**, C4-202-8. (1982).
- [12] М. Лайнс, А. Гласс. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. Мир, М. (1981). 736 с.
- [13] D. Ceperley. Nature Phys. **2**, 659 (2006).
- [14] Г.А. Малыгин. ФТТ **50**, 8, 1480 (2008).
- [15] C. Trickey, W. Kirk, E. Adams. Rev. Mod. Phys. **44**, 3, 668 (1972).
- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1995). 608 с.
- [17] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. Интегралы и ряды. Наука, М. (1981). 800 с.