

КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В ДВОЙНИКОВЫХ ГРАНИЦАХ ГПУ КРИСТАЛЛА ГЕЛИЯ

Лыках В.А., Сыркин Е.С., Галушак И.В., Кривонос С.С.

Национальный технический университет

«Харьковский политехнический институт», г. Харьков

Дефекты играют значительную, зачастую первостепенную, роль в поведении реальных кристаллов. При обработке материалов значительная доля усилий уделяется именно изменению дефектной структуры, а именно созданию, удалению или модификации дефектов, от них зависят как механические, так термодинамические и электронные свойства материалов. Кристаллы гелия обладают уникальными свойствами: они являются квантовыми кристаллами [1], могут быть сравнительно легко получены чистые кристаллы до содержания примесей недостижимых в обычных материалах, дефектная система кристалла He также легко управляема. Поэтому кристаллы гелия могут служить удобным модельным объектом для моделирования атомарных кристаллов и изучения их квантовых свойств. Двойниковые границы (ДГ) образуются в процессах роста и деформации кристалла. В работах [2,3] авторы рассматривали классическое поведение межфазных границ и ДГ в металлах и гелии, их влияние на асимметрию фазового перехода.

В данной работе показано, что внутри ДГ потенциал решетки для атома уменьшает свою симметрию: вытягивается вдоль направления сдвига атомных плоскостей. Решается задача нахождения волновой функции атома гелия для сферического (внутри ГПУ фазы) и анизотропного (внутри ДГ) осциллятора. Показано, что изоповерхности волновой функции атома из сфер в объеме кристалла превращаются в эллипсоиды внутри ДГ. Для оценки параметров термодинамического потенциала применяются модели сфер и эллипсоидов, применяется метод последовательных приближений для самосогласованного описания деформации волновой функции.

Следствиями квантового поведения кристалла являются:

1) увеличение степени перекрытия волновых функций атомов внутри двойниковых границ, 2) связанный с этим рост квантовой диффузии в ДГ, 3) уменьшение энергии и увеличение толщины ДГ в сравнении с классическим случаем.

Список литературы:

1. Квантовые кристаллы. Ред. С.В. Вонсовский. М.: Мир. 1975.
2. В.А. Лыках, Е.С. Сыркин. Физ. твердого тела. **52**, 358 (2010)
3. V.A.Lykah, E.S.Syrkin. J. Low Temp. Phys. **160**, 179 (2010)