

МЕХАНИЗМ РЕКОНСТРУКТИВНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В КРИСТАЛЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

Карпенко С.В., Темроков А.И.*

НИИ ПМА КБНЦ РАН, Нальчик

**sv_karpenko@mailru.com*

Несомненные успехи, достигнутые в последние десятилетия в построении теории фазовых переходов второго рода, до сих пор практически не затронули фазовые переходы первого рода и, в частности, реконструктивные фазовые превращения, протекающие в кристаллах под действием высокого давления. В настоящей работе сделана попытка построить схему этих переходов, опираясь на теорию протекания [1] и гипотезу подобия [2], успешно используемые в теории фазовых переходов второго рода. В рамках этого подхода получают объяснение характеров изменения энтропии фазового превращения и скачкообразный характер превращения.

Согласно нашей модели фазовый переход начинает развиваться в поверхностной области кристалла. Как известно, внешнее давление изменяет соотношение между радиусами частиц, слагающих элементарную ячейку, что приводит к изменению кристаллической сингонии, так как энергетически выгоднее становится более плотноупакованная структура. Подобная трансформация с большей вероятностью может произойти на поверхности кристалла. В результате возникает зародыш новой фазы, который представляет собой макроскопическое образование со счетным числом частиц (кластер). Зарождение кластеров происходит стохастически вблизи дефектных областей поверхности.

Пока расстояние между двумя ближайшими кластерами меньше некоторого критического, характеризуемого радиусом корреляции ρ , который определяется согласно выражению $(4\pi/3)\rho^3 = \bar{n}v$ (\bar{n} — среднее число узлов в кластере, v — средний объем, приходящийся на частицу в кластере), критическая доля объема ξ новой фазы недостаточна для образования нового кластера. Существует критическое значение ξ_c объема новой фазы, определяемое следующим образом

$$\xi_c = \frac{\Delta_0}{v_0} \left(\frac{z}{1.5} \right)^{1/(a \cdot z)}$$

При $\xi = \xi_c$ начинается слияние кластеров, которое приводит к образованию канала протекания. Слияние последних образует тонкую пленку новой фазы. В дальнейшем процесс развивается внутрь образца, приводя к появлению кластеризованных областей новой фазы по всему объему кристалла.

1. Шкловский Р.Э., Эфрос А.Л. // УФН. 1975. Т.117. С.401.
2. Hankey A., Stanley H.E. // Phys. Rev. 1976. V.6. P.3515.