Письма в ЖЭТФ, том 32, вып.11, стр. 654 – 656 *5 декабря 1980 г.*

СТРИКЦИОННЫЕ СВЕРХСТРУКТУРЫ В ДВУМЕРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ

А.Ф.Андреев

Показано, что стрикционная связь параметра порядка с деформацией решетки приводит к появлению сверхструктур в широком классе фазовых переходов второго рода в двумерных системах на поверхностях кристаллов.

Двумерные фазовые переходы могут осуществляться фактически лишь в различных мономолекулярных слоях, адсорбированных на поверхностях кристаллов. В этих условиях во многих случаях (например, в сегнетоэлектрических переходах, в поверхностных критических точках газ-жидкость, в фазовых переходах, связанных с изменением характера равновесной формы кристаллов) возникает, как будет показано ниже, своеобразная капиллярно-стрикционная связь параметра порядка с деформацией решетки в объеме кристалла. Известно [1, 2], что стрикция существенно изменяет характер перехода в обычных трехмерных системах. В нашем случае вместо однородной фазы в точке перехода должна возникать фаза с пространственно-модулированным параметром порядка. Если стрикционная связь мала, то период модуляции макроскопически велик.

Пусть η – параметр порядка, соответствующий фазовому переходу в двумерной системе на плоской поверхности кристалла $z = 0$. Вблизи точки перехода в отсутствие стрикционных эффектов поверхностная свободная энергия a имеет обычный вид

$$a = a_o + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (at + gk^2) \, | \eta(\mathbf{k}) |^2, \qquad (1)$$

где $\mathbf{k}$ – двумерный волновой вектор, $\eta(\mathbf{k})$ – пространственные гармоники Фурье параметра порядка, a, g – положительные постоянные, $t = T - T_c$. Мы не выписали в формуле (1) членов четвертого порядка, поскольку они не существенны для наших целей.

Деформация решетки, описываемая тензором деформации u_{ik}, сопровождается изменением поверхностной энергии δa. При малых деформациях связь δa с u_{ik} линейна: $\delta a = a_{ik} u_{ik}$. Величины a_{ik} содержат обычный (см. [3]) для поверхностных величин произвол, устраняющийся введением условия $a_{ii} = 0$, эквивалентного, как легко понять, обычному условию отсутствия поверхностного числа частиц. Полная свободная энергия деформации равна

$$F_d = \int d^3x \frac{1}{2} \sigma_{ik} u_{ik} + \int d^2x \, a_{ik} u_{ik},$$

где σ_{ik} — объемный тензор напряжений, первый интеграл берется по объему кристалла, второй – по поверхности $z = 0$. Условие равновесия в объеме $\partial\sigma_{ik}/\partial x_k = 0$ позволяет преобразовать объемный интеграл в поверхностный

$$F_d = \int d^2x \left(\frac{1}{2}\sigma_{iz}u_i + a_{\mu i}\frac{\partial u_i}{\partial x_\mu} + a_{iz}\frac{\partial u_i}{\partial z} \right), \tag{2}$$

где $\mu = 1,2$.

Пусть симметрия кристаллической грани $z = 0$ такова, что она допускает линейные соотношения вида

$$a_{ik} = \gamma_{ik}\eta, \tag{3}$$

где γ_{ik} – постоянные такие, что $\gamma_{ii} = 0$. Тогда из (2) получаем следующее выражение для вклада $a_d = F_d/S$ (S – площадь поверхности) деформации решетки в поверхностную энергию

$$a_d = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ ik_\mu \gamma_{\mu i}\,\eta^*(\mathbf{k})\,u_i(\mathbf{k}) + \gamma_{iz}\eta^*(\mathbf{k})\frac{\partial u_i}{\partial z}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}\sigma_{iz}(\mathbf{k})\,u_i^*(\mathbf{k}) \right\}. \tag{4}$$

Производные $\partial u_i/\partial z$ при $z = 0$ могут быть, в принципе, выражены через u_i при $z = 0$ путем решения объемных уравнений равновесия. В результате

$$\frac{\partial u_i}{\partial z}(\mathbf{k}) = G_{ik}(\mathbf{k})\,u_k(\mathbf{k}), \tag{5}$$

где компоненты тензора G_{ik} являются некоторыми однородными функциями первого порядка от компонент волнового вектора. Для упруго изотропного кристалла

$$G_{\mu\nu} = \frac{1}{k}\left(k^2\delta_{\mu\nu} = \frac{k_\mu k_\nu}{3 - 4\sigma}\right), \quad G_{zz} = \frac{2(1 - 2\sigma)}{3 - 4\sigma}k,$$

$$G_{\mu z} = G_{z\mu} = -\frac{ik_\mu}{3 - 4\sigma},$$

где E, σ – соответственно модуль Юнга и коэффициент Пуассона.

Следует подчеркнуть, что только при условиях (5), т.е. при выполнении объемных условий равновесия, поверхностная энергия является определенной функцией одного только тензора u_{ik}. В противном случае прилегающий к поверхности объем кристалла, а потому и сама поверхность, не являются равновесными.

Минимизируя поверхностную энергию (4) по $u_i(\mathbf{k})$ при заданных $\eta(\mathbf{k})$ получим выражение вида

$$a_d = -\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})\, k\, |\eta(\mathbf{k})|^2, \tag{6}$$

где $f(\mathbf{k})$ – положительная однородная функция нулевого порядка от компонент волнового вектора. В изотропном случае имеем

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1+\sigma}{Ek^2}\left\{ \frac{(1-2\sigma)^2}{(3-4\sigma)(1-\sigma)} k^2 \gamma_{\mu\mu}^2 + \frac{32\sigma^2 - 52\sigma + 21}{(3-4\sigma)^2}(\gamma_{z\mu} k_\mu)^2 + \right.$$

$$+ \left[\left(\delta_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2}\right)\gamma_{\nu\lambda} k_\lambda\right]^2 + (1-\sigma)\left[\frac{1}{k}\gamma_{\mu\nu} k_\mu k_\nu - \frac{\sigma}{1-\sigma} k \gamma_{\mu\mu}\right]^2 +$$

$$\left. + \left[\left(\delta_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2}\right)\gamma_{z\nu}\right]^2 k^2 \right\}.$$

Сумма выражений (1) и (6) определяет полную свободную энергию, описывающую рассматриваемый фазовый переход, Видно, что благодаря стрикционным эффектам переход происходит при температуре, более высокой, чем T_c , причем в состояние, характеризуемое конечным значением волнового вектора $k_0 \sim f/g \sim \gamma^2/Eg$. Если, как это часто бывает, кристалл является слабо деформируемым ($E \gg \gamma^2/ga$, a – межатомное расстояние), то стрикционная энергия мала и период $1/k_0$ сверхструктуры велик по сравнению с межатомным расстоянием.

Подчеркнем в заключение, что указанный вывод не относится к переходам из парамагнитных состояний в магнитоупорядоченные, поскольку в этих случаях η меняет знак при инверсии времени и все γ_{ik} равны нулю.

Выражаю благодарность И.М.Лифшицу, В.И.Марченко и А.Я.Паршину за полезную дискуссию.

Институт физических проблем
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
30 октября 1980г.

Литература

[1] А.И.Ларкин, С.А.Пикин. ЖЭТФ, **56**, 1664, 1969.

[2] А.П.Леванюк, А.А.Собянин. Письма в ЖЭТФ, **11**, 540, 1970.

[3] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика, часть I , М., изд. Наука, 1976, §154.