

О ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ ВТОРОГО РОДА БЕЗ РАСХОДИМОСТЕЙ ВО ВТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

А.П.Леванюк, А.А.Собянин

Известно, что теория фазовых переходов второго рода Ландау непригодна в непосредственной окрестности точки перехода из-за сильного возрастания длинноволновых флуктуаций характерного параметра перехода [1, 2]. С другой стороны, если флуктуации сопровождаются появлением далекодействующих полей (электрических, магнитных, упругих), их характер существенно меняется [3]. В результате в достаточно анизотропных кристаллах вблизи точки перехода возрастает интенсивность не всех флуктуационных волн, а лишь волн с определенными направлениями волнового вектора, что приводит к сильному уменьшению фазового объема, связанного с большими флуктуациями. Примером такого рода могут служить одноосные сегнетоэлектрики [4-6], в которых из-за возникновения электрического поля возрастают лишь флуктуации с волновыми векторами, лежащими в плоскости, перпендикулярной сегнетоэлектрической оси. В результате теплоемкость, например, возрастает по мере приближения к точке перехода по другому закону, чем в изотропном веществе.

В настоящей работе рассмотрен другой пример, когда флуктуации характерного параметра еще более подавлены. Оказывается, что если в симметричной фазе существует линейная связь между параметром перехода η и упругой деформацией u_{ik} , то возрастают лишь флуктуации с волновыми векторами, параллельными определенным кристаллографическим осям, т. е. фазовый объем, отвечающий большим флуктуациям, уменьшается еще сильнее, чем в предыдущем случае. Вследствие этого теплоемкость при $T \rightarrow T_c$ (T_c — температура перехода) остается конечной, а термодинамический потенциал может быть раз-

ложен в ряд по η , подобно тому, как это имеет место в теории Ландау¹⁾. Однако полного совпадения с теорией Ландау нет. Особенность термодинамического потенциала в точке перехода полностью не исчезает. Так, все производные теплоемкости по температуре расходятся при $T \rightarrow T_c$. Это же относится, конечно и к другим производным термодинамического потенциала выше второго порядка. В работе [7] было показано, что фазовые переходы в твердых телах, сопровождающиеся бесконечным возрастанием теплоемкости, не могут быть переходами второго рода. Подчеркнем, что к переходам рассматриваемого типа выводы работы [7] не относятся, так как теплоемкость в точке перехода остается конечной.

По-видимому, единственным известным сейчас в эксперименте примером интересующих нас переходов являются сегнетоэлектрические переходы в кристаллах с пьезоэффектом в парафазе (сегнетова соль, KN_2PO_4 и др.) Однако, как показывает анализ, линейная связь между параметром перехода и упругими деформациями возможна и для некоторых несегнетоэлектрических фазовых переходов, а также для ряда переходов с изменением магнитной структуры.

Поясним теперь, как получаются изложенные выше результаты. Поскольку в точке перехода существенно возрастают лишь длинноволновые флуктуации характерного параметра, для гамильтониана системы можно принять приближение сплошной среды. Зададим плотность гамильтониана в виде

$$n(\eta) = -\frac{a}{2}\eta^2 + b\eta^4 + c(\nabla\eta)^2 + d\eta u_{xy} + \frac{\lambda}{2}u_{\ell\ell}^2 + \mu u_{ik}^2. \quad (1)$$

Мы пренебрегли здесь анизотропией упругих свойств кристалла, учтя однако его анизотропию при написании четвертого члена; x и y поэтому представляют собой вполне определенные кристаллографические направления. Исходя из (1), можно получить диаграммные разложения для корреляционных функций и термодинамических величин и убедиться, что расходимости в диаграммах для корреляционных функций, появляющиеся обычно в теории фазовых переходов, в нашем случае отсутствуют. Однако в рамках настоящей работы уместно вычислить лишь первые поправки к результатам теории Ландау. Как оказывается, качественные результаты относительно температурной зависимости термодинамических величин остаются справедливыми и с учетом высших приближений. Соответствующее рассмотрение будет приведено в более подробной статье. Воспользуемся

1) Перед отправкой этого сообщения в печать авторам стала известна работа [9], где на основании критерия самосогласованности теории Ландау, полученного в [2] и совпадающего с критерием Гинзбурга [1], делается утверждение о непротиворечивости этой теории для сегнетоэлектриков с пьезоэффектом в парафазе (при определенных условиях на константы кристалла). Такое утверждение в известной степени совпадает с одним из результатов настоящей работы. Подчеркнем однако, что самого по себе критерия [1, 2] недостаточно для того, чтобы сделать окончательные заключения о температурной зависимости термодинамических величин. Для этого необходимо выйти за пределы первого приближения к теории Ландау. Сообщаемые в настоящей работе результаты таких исследований в ряде существенных пунктов отличаются от результатов работы [9]. Авторы благодарны Д.И. Хомскому, указавшему им на работу [9].

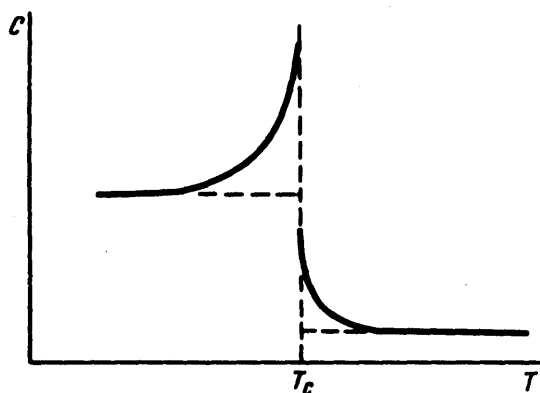
методом, предложенным в [8]. Для плотности свободной энергии примем выражение, отличающееся от (1) лишь заменой $-a$ на $a = a'_\theta (T - \theta)$, где θ — температура перехода в зажатом кристалле, т. е. при $u_{xy} = 0$; фактически же T_c определяется условием $a - \frac{d^2}{4\mu} = 0$. Ограничимся случаем симметричной фазы. Как вытекает из выражения для свободной энергии

$$\langle \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} \rangle = \frac{T}{V \tilde{\alpha}(\mathbf{k})} = \frac{T}{V \left[a - \frac{d^2}{4\mu} + \frac{d^2}{4\mu} (\cos^2 \theta + \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \sin^4 \theta \sin^2 2\phi) + c k^2 \right]}, \quad (2)$$

где $\eta_{\mathbf{k}}$ — Фурье-компонента $\eta(x)$, $\langle \rangle$ — статистическое усреднение, θ и ϕ — углы сферической системы координат с полярной осью вдоль оси z . Ограничиваясь поправками первого порядка к теории Ландау, для теплоемкости имеем [8]:

$$C = C_0 + A \int \frac{dk}{\alpha^2(k)}, \quad (3)$$

где C_0 — регулярная часть теплоемкости, A — постоянная. Нетрудно убедиться, что интеграл в (3) сходится, а $\partial C / \partial T \sim |T - T_c|^{-1/2}$. Вид зависимости теплоемкости от температуры показан на рисунке. Напомним, что в изотроп-



Зависимость теплоемкости от температуры. Значение теплоемкости в точке перехода, вычисленное с учетом флуктуаций, отличается от предсказываемого теорией Ландау (пунктир) на величину порядка $C_0 \sqrt{T_c (T_c / T_c - \theta)}$

ном случае в принятом приближении $C \sim (T - T_c)^{-1/2}$. Как показано в [5], выражение для теплоемкости вблизи T_c может быть представлено в виде ряда по степеням интеграла, входящего в (3). При $T = T_c$ члены этого ряда остаются конечными.

Заметим, наконец, что сегнетоэлектрики с пьезоэффектом в парафазе являются одновременно одноосными. Поэтому подавление флуктуаций в них происходит не только из-за возникновения упругих напряжений, но также из-за влияния электрического поля. Это обстоятельство однако не меняет характера температурной зависимости термодинамического потенциала и поэтому здесь не учитывалось.

Авторы выражают благодарность В.Г.Ваксу, В.Л.Гинзбургу, А.И.Ларкину за полезные советы и обсуждения, а также М.А.Кривоглазу и другим участникам X Всесоюзной зимней школы по теории твердого тела (Свердловск, февраль 1970 г.) за дискуссии после доклада о настоящей работе.

Институт физики
высоких давлений
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
21 апреля 1970 г.

Литература

- [1] В.Л.Гинзбург. ФТТ, 2, 2031, 1960.
 - [2] А.П.Леванюк. ЖЭТФ, 36, 810, 1959.
 - [3] М.А.Кривоглаз. ФТТ, 5, 3437, 1963.
 - [4] А.П.Леванюк. Изв. АН СССР, сер. физ. 29, 879, 1965.
 - [5] В.Г.Вакс, А.И.Ларкин, С.А.Пикин. ЖЭТФ, 51, 361, 1966.
 - [6] А.И.Ларкин, Д.Е.Хмельницкий. ЖЭТФ, 56, 2067, 1969.
 - [7] А.И.Ларкин, С.А.Пикин. ЖЭТФ, 49, 975, 1965.
 - [8] А.П.Леванюк. ФТТ, 5, 1773, 1963.
 - [9] J.Villain. Sol. State comm., 8, 295, 1970.
-