Список литературы

[1] Bernard D., Pannetier J., Lucas J. // Ferroelectrics. 1978. V. 21. N 1—4. P. 429—431.
[2] Jona F., Shirane G., Pepinsky R. // Phys. Rev. 1955. V. 98. N 4. P. 903—909.
[3] Колпакова Н. Н., Маргграф Р., Петрашко А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 6. С. 2638—2643.
[4] Исупов В. А., Тарасова Г. И. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 3. С. 1018—1024.
[5] Банис Й., Григас Й., Колпакова Н., Собестиянскас Р., Шер Е. // Лит. физ. сб. 1989. Т. 29. № 1. С. 209—214.
[6] Марковин П. А., Писарев Р. В., Шер Е. С., Шерматов Б. Н. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 12. С. 3642—3647.
[7] Kolpakova N. N., Polomska M., Margraf R., Sher E. S. // Ferroelectrics. Proceed. IMF 7 (Saarbrücken). 1989.
[8] Krainik N. N., Kamzina L. S., Salaev F. M., Tarakanov E. A. // Jpn. J. Appl. Phys. Suppl. 24—2. Proceed IMF 6 (Kobe.) 1985.
[9] Колпакова Н. Н., Синий И. Г., Поломска М., Маргграф Р. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 6. С. 1729—1736.
[10] Сканави Г. И. // Физика диэлектриков (область слабых полей). М., 1949. 600 с.
[11] Brisse F., Stenart D. J., Seidl V., Knop O. // Can. J. Chem. 1972. V. 50. N 5. P. 3648—3666.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
3 января 1990 г.

---

УДК 539.360

© Физика твердого тела, том 32, № 6, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 6, 1990

# О ВОЗМОЖНОСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ВТОРОГО РОДА БЕЗ ИСЧЕЗНОВЕНИЯ ПОРЯДКА

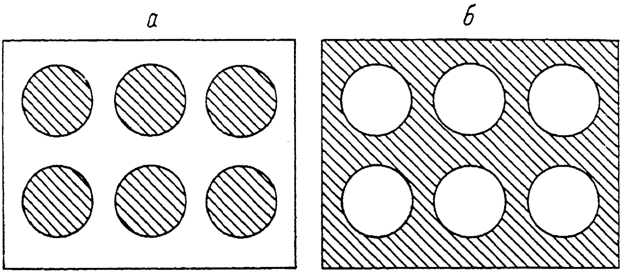
*Э. Л. Нагаев, А. И. Подельщиков*

Теория Ландау фазовых переходов II рода исходит из того, что при таком переходе неупорядоченное состояние непрерывно превращается в упорядоченное. При этом симметрия системы понижается. Параметр порядка $\eta$ в упорядоченном состоянии есть мера понижения симметрии: в симметричной фазе он при всех температурах равен нулю. Из того факта, что группа симметрии упорядоченной фазы есть подгруппа симметрии неупорядоченной, непосредственно следует обращение в нуль линейных по $\eta$ членов в разложении термодинамического потенциала.

Цель этой заметки — обратить внимание на возможность непрерывных фазовых переходов без изменения симметрии системы, т. е. происходящих без разрушения упорядоченного состояния системы. Соответственно параметр порядка для таких переходов имеет совершенно иной смысл, чем для переходов порядок—беспорядок. У таких переходов особенности термодинамических величин должны быть совершенно иного типа, чем в теории Ландау.

Эти переходы могут реализоваться, в частности, в системах с неоднородным распределением заряда, характер которого зависит от температуры. Примером могут служить вырожденные антиферромагнитные полупроводники. Согласно [1, 2], при $T=0$ они могут самопроизвольно распадаться на микрообласти радиуса $R \sim 10 \div 100$ Å с ферромагнитным (ФМ) и антиферромагнитным (АФМ) упорядочением, причем все электроны проводимости оказываются сосредоточенными в первых из них. Если концентрация $n$ электронов проводимости не слишком велика, то ФМ часть кристалла представляет собой изолированные друг от друга сферические капли внутри АФМ матрицы (см. рисунок, *а*). В пренебрежении хаотическим потенциалом примеси они образуют периодическую структуру. Однако по мере роста $n$ ФМ часть кристалла из многосвязной превращается в односвязную и уже внутри нее находятся АФМ капли (см. рисунок, *б*). В конфигурации *а* кристалл ведет себя как изолятор, а в конфигурации *б* — как проводник. Экспериментально такие состояния наблюдались в EuSe и EuTe (см. анализ эксперимента в [2]).

Расчет показывает (см. ниже), что с ростом $T$ доля ФМ фазы в изолирующем состоянии (см. рисунок, *а*) растет. Поэтому при некоторой температуре $T_c$ ФМ области придут в соприкосновение друг с другом и произойдет электронное протекание. Представляется достаточно правдоподобной гипотеза, что в точке протекания $T_c$, где изменяется топология проводящей части кристалла, термодинамические величины должны обнаруживать особенности. Например, они могут быть связаны с различной температурной зависимостью площади поверхности раздела АФМ и ФМ фаз выше и ниже $T_c$, что должно повлечь за собой особенность поверхностной энергии. Если это так, то в $T_c$ происходит фазовый переход II рода из изолирующего в проводящее состояние, вызванный изменением топологии АФМ—ФМ состояния. Но симметрия состояния при $T > T_c$ не ниже, чем при $T < T_c$.




Двухфазные состояния вырожденного антиферромагнитного полупроводника: изолирующее (*а*), проводящее (*б*).

Заштрихованная — ферромагнитная, а незаштрихованная — антиферромагнитная части кристалла.

В качестве параметра порядка можно ввести

$$\eta = (V_{AFM}/V_{FM})_T - (V_{AFM}/V_{FM})_{T_c},$$

где $V_{AFM}$, $V_{FM}$ — объемы АФМ и ФМ фаз. Очевидно, что ниже $T_c$ $\eta > 0$, а выше $T_c$ $\eta < 0$. Можно написать простейшее феноменологическое выражение для неполного термодинамического потенциала $\Phi$ типа Ландау при единственном предположении, что точка протекания выделенная: теплоемкость $C$ имеет в $T_c$ особенность. Тогда

$$\Phi = a\eta + {}^1/_4\, b\eta^4, \tag{1}$$

где $a = \alpha\,(T - T_c)$, $b\,(T_c) > 0$. Член $\sim\eta^2$ отсутствует в (1), иначе точка $T_c$ не была бы выделенной. Член $\sim\eta^3$ исключен, чтобы получались вещественные значения $\eta$ как выше, так и ниже $T_c$. Из (1) сразу же следует, что $C \sim |T - T_c|^{-2/3}$, т. е. если в теории Ландау теплоемкость должна испытывать скачок, то здесь она расходится (аналогия с результатами теории скейлинга чисто внешняя). Во всяком случае $\Phi$ (1) подтверждает принципиальную возможность фазового перехода II рода без исчезновения параметра порядка как выше, так и ниже $T_c$.

К сожалению, точность результатов расчета, основанного на микроскопической модели [1, 2], вблизи $T_c$ недостаточна, чтобы подтвердить (1) или же сам факт фазового перехода II рода при протекании. Однако этот расчет позволяет установить, что при повышении температуры конфигурация *а* в случае благоприятных параметров должна переходить в конфигурацию *б*, т. е. что электронное протекание может происходить вследствие подъема температуры.

Расчет производился с помощью вариационного принципа для свободной энергии системы, являющегося обобщением использованного в [1, 2] на конечные температуры. В таком обобщенном принципе учитывается, что намагниченность областей, где сосредоточены электроны проводимости, отлична от максимальной. Соответственно в областях, где электронов нет, АФМ упорядочение при конечных температурах либо полностью, либо частично разрушено (строго говоря, при конечных температурах электроны проводимости должны быть и в этих областях, но число их экспоненциально мало). Геометрия неоднородного состояния системы дается на рисунке, *а*, *б*. Отношение $x$ объемов АФМ и ФМ областей кристалла является вариационным параметром. Радиус $R$ сферических включений иной фазы в матрицу доминирующей фазы — это второй вариационный параметр.

Ввиду вырожденности электронов при интересующих нас температурах вкладом тепловых возбуждений в их свободную энергию можно пренебречь. Поэтому для плотностей объемной $E_V$ и поверхностной $E_S$ электронных энергий, а также для плотности кулоновской энергии $E_Q$ используются соответствующие выражения из [1, 2].

При конечных температурах энергия магнитной подсистемы из [1, 2] должна быть заменена свободной энергией, плотность которой $F_M$ вычисляется в приближении самосогласованного поля. При этом предполагается, что рассматриваемый кристалл — антиферромагнетик с обменом только между ближайшими соседями, а электроны в ФМ области полностью поляризованы по спину. Тогда $F_M$ дается суммой вкладов от АФМ и ФМ фаз

$$F_M = \frac{x}{1+x} F_M(0, T) + \frac{1}{1+x} F_M\left(\frac{A}{2} na^3(1+x), T\right),$$

$$a^3 F_M(H, T) =$$

$$a^3 F_M(H, T) = \begin{cases} -\dfrac{H^2}{4|\mathcal{J}_0|} + \dfrac{1}{2}|\mathcal{J}_0| S_1^2 - T \ln\left[\sum\limits_{M=-S}^{S} \exp\left(\dfrac{m|\mathcal{J}_0| S_1}{T}\right)\right], & H \leqslant 2|\mathcal{J}_0| S_1, \\ -\dfrac{1}{2}|\mathcal{J}_0| S_2^2 - T \ln\left\{\sum\limits_{m=-S}^{S} \exp\left[\dfrac{m}{T}(H - |\mathcal{J}_0| S_2)\right]\right\}, & H \geqslant 2|\mathcal{J}_0| S_1, \end{cases}$$

где $A$ — интеграл $s$—$f$-обмена; $a$ — постоянная решетки; $S$ — величина спина магнитных атомов; $\mathcal{J}_0$ — интеграл прямого обмена; $S_1$ и $S_2$ удовлетворяют следующим уравнениям самосогласования ($B_S$ — функция Бриллюэна)

$$S_1 = SB_S\left(\frac{S|\mathcal{J}_0| S_1}{T}\right), \quad S_2 = SB_S\left[\frac{S}{T}(H - |\mathcal{J}_0| S_2)\right].$$

Стационарное состояние системы определяется из условия минимума по $x$ и по $R$ полной свободной энергии системы $F = E_V + E_S + E_Q + F_M$. Численный расчет производился при тех же значениях параметров системы, что и в [1, 2] (они соответствуют соединениям редких земель типа EuTe). В этом случае при $n = 10^{20}$ см$^{-3}$ переход из изолирующего неоднородного состояния в проводящее неоднородное состояние происходит при температуре $T_c = 2.5$ К, причем вариационные параметры в точке перехода имеют значения $x \simeq 1$ и $R = 30$ Å.

## Список литературы


[1] Нагаев Э. Л. // Письма в ЖЭТФ. 1972. Т. 16. № 6. С. 558—562; Кашин В. А., Нагаев Э. Л. // ЖЭТФ. 1974. Т. 66. № 10. С. 2105—2115.
[2] Nagaev E. L. Physics of magnetic Semiconductors. M., 1983. § 7.5.



Поступило в Редакцию
3 января 1990 г.