УДК 537.94

Физика твердого тела, том 31, в. 9, 1989
Solid State Physics, vol. 31, N 9, 1989

ТЕОРИЯ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ КРИСТАЛЛОВ Cs_2HgBr_4 И Cs_2CdBr_4: НЕОБЫЧНАЯ ТОЧКА ЛИФШИЦА

О. Г. Влох, Е. П. Каминская, А. В. Китык, А. П. Леванюк, О. М. Мокрый

Кристаллы Cs_2HgBr_4 и Cs_2CdBr_4 обладают сходной последовательностью фазовых переходов: нормальная (Н)—несоразмерная (НС)—соразмерная (С) фаза. Группа симметрии Н-фазы *Pnma*, а С-фазы — $P2_1/n$, причем число формульных единиц в элементарной ячейке для этих двух фаз одинаково [1]. Изменение симметрии при Н—С переходе отвечает собственному сегнетоэластическому фазовому переходу. Волновой вектор НС-фазы **q** близок к центру зоны Бриллюэна [2], т. е. в рамках классификации Брюса—Каули НС-фаза относится к типу II [3]. В работе [4] было обнаружено, что для Cs_2HgBr_4 при давлении $P_k=140$ МПа линии переходов Н—НС и НС—С сливаются в линию фазовых переходов Н—С. Аналогичная фазовая диаграмма получена для кристаллов Cs_2CdBr_4 ($P_k=100$ МПа); подробное изложение будет опубликовано вскоре.

Можно ожидать, что точка Лифшица в собственном сегнетоэластике обладает специфическими особенностями, поскольку при описании однородного состояния адекватными переменными являются компоненты тензора упругой деформации, а неоднородного — компоненты вектора смещений. Ниже будет показано, что значение **q** в рассматриваемой точке конечно, хотя Н—С переход является переходом второго рода. При этом линии переходов НС—С и Н—НС не имеют в точке Лифшица общей касательной.

В рассматриваемом случае параметр порядка для Н—С перехода эквивалентен по своим трансформационным свойствам компоненте тензора деформации u_{yz}. Вместе с тем волновой вектор модулированной фазы параллелен оси X, т. е. неоднородные деформации могут отвечать лишь тем компонентам u_{ik}, которые не содержат никаких других производных, кроме производных по x. Очевидно, что неоднородная деформация, отвечающая компоненте u_{yz}, в этом случае не возникает. Поэтому для рассмотрения фазовых переходов в НС-фазу в качестве параметра порядка необходимо использовать некоторую «оптическую» координату η, обладающую теми же трансформационными свойствами, что и u_{yz}. В данном случае физический смысл η известен — это поворот тетраэдров MBr_4 (M=Cd, Hg) вокруг оси X [5, 6].

Плотность термодинамического потенциала Ландау запишем в виде

$$\hat{F}=\frac{1}{2}A\eta^2+\frac{1}{2}g\left(\frac{\partial\eta}{\partial x}\right)^2+\frac{1}{2}h\left(\frac{\partial^2\eta}{\partial x^2}\right)^2+\frac{1}{4}B\eta^4+\alpha\eta u_{yz}+2c_{44}u_{yz}^2. \qquad (1)$$

Поскольку неоднородные деформации из рассмотрения выпадают, то после минимизации по однородным деформациям получим

$$F=\int\hat{F}dr=\left(A-\frac{\alpha^2}{4c_{44}}\right)\eta_0^2+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}\neq 0}(A+gq^2+hq^4)\,|\eta_{\mathbf{q}}|^2+$$
$$+\frac{1}{4}B\sum_{\mathbf{q}_1,\,\mathbf{q}_2,\,\mathbf{q}_3,\,\mathbf{q}_4}\eta_{\mathbf{q}_1}\eta_{\mathbf{q}_2}\eta_{\mathbf{q}_3}\eta_{\mathbf{q}_4}\delta(\mathbf{q}_1+\ldots+\mathbf{q}_4). \qquad (2)$$

Из (2) следует, что переход в НС-фазу из Н-фазы определяется условием

$$A-g^2/4h=0, \qquad (3)$$

причем вектор модуляции $q_0=(-g/2h)^{1/2}$.

Линия фазовых переходов первого рода между НС- и С-фазами находится по аналогии с [7]

$$A = (\sqrt{6}+2)\,(\alpha^2\sqrt{6}/16c_{44} - g^2/4h). \tag{4}$$

Легко видеть, что на фазовой плоскости (A, g) эти линии пересекаются в точке $g = g_c < 0$, т. е. волновой вектор модуляции в тройной точке имеет конечное значение

$$q_c = (\alpha/2 \cdot \sqrt{1/hc_{44}})^{1/2}. \tag{5}$$

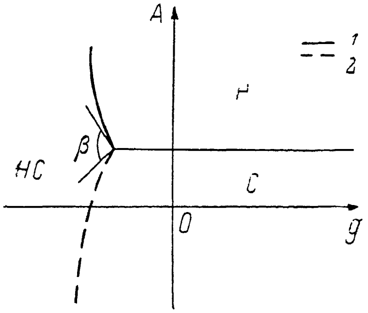
Н—С переход определяется условием

$$A - \alpha^2/4c_{44} = 0. \tag{6}$$

Касательные к линиям переходов Н—НС и НС—С составляют в точке Лифшица угол β

$$\operatorname{tg}\beta = \frac{\alpha}{2}\sqrt{\frac{1}{hc_{44}}}\,\frac{3+\sqrt{6}}{1-(\alpha^2/4hc_{44})\,(\sqrt{6}+2)}. \tag{7}$$

Полученная фазовая диаграмма приведена на рисунке. К сожалению, существующих экспериментальных данных недостаточно для определения коэффициентов термодинамического потенциала.



Фазовая диаграмма в окрестности точки Лифшица.

1 — фазовый переход II рода, *2* — фазовый переход I рода.

Отметим, что критические аномалии, характерные для собственного сегнетоэластического фазового перехода, в окрестности тройной точки не меняются, поскольку критическим флуктуациям в рассматриваемом случае отвечают волновые векторы, близкие к осям Y и Z.

Список литературы

[1] Plesko S., Kind R., Arend H. // Phys. St. Sol. (a). 1980. V. 61. N 1. P. 87—94.
[2] Maeda M., Honda A., Yamada N. // J. Phys. Soc. Jap. 1983. V. 52. N 9. P. 3219—3224.
[3] Bruce A. D., Cowley R. A. // J. Phys. C. 1978. V. 11. P. 3609—3614.
[4] Влох О. Г., Китык А. В., Мокрый О. М., Кириленко В. В., Олексеюк И. Д., Пирога С. А. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 6.
[5] Plesko S., Kind R., Arend H. // Ferroelectrics. 1980. V. 26. P. 703—706.
[6] Nakatama H., Nakamura N., Chihara H. // J. Phys. Soc. Jap. 1987. V. 56. N 8. P. 2927—2934.
[7] Michelson A. // Phys. Rev. B. 1977. V. 16. P. 577—584.

Институт кристаллографии АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
7 апреля 1989 г.