

О процессе фазового перехода второго рода под влиянием сильного электрон-фононного взаимодействия

© Э.Н. Мясников, З.П. Мastrozin

Южный федеральный университет,
Педагогический институт,
Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: mastrozin@mail.ru

(Поступила в Редакцию 27 апреля 2009 г.
В окончательной редакции 18 июня 2009 г.)

Рассмотрена модель кристалла с сильным электрон-фононным взаимодействием, порождающим фазовый переход второго рода. Задачей исследования является нахождение для этой модели температурной зависимости термодинамического потенциала в симметричной фазе в области температур, непосредственно примыкающей к температуре перехода T_c . Для решения этой задачи использован метод мацубаровских квантовых функций Грина, который учитывает влияние и тепловых, и квантовых флуктуаций. Показано, что флуктуационные когерентные деформации кристаллической решетки, имеющие симметрию упорядоченной фазы, в результате взаимодействия с электронной подсистемой при $T > T_c$ оказываются энергетически выгодными. Полученные результаты позволяют построить модель процесса фазового перехода второго рода вблизи точки Кюри T_c .

1. Введение

В теории фазовых переходов второго рода (ФП2), предложенной Ландау [1], используется предположение о регулярной зависимости термодинамического потенциала от температуры в окрестности температуры перехода T_c . Однако в [1] многократно подчеркивается, что „... с математической точки зрения точка фазового перехода второго рода представляет собой некоторую особую точку термодинамических величин, в частности термодинамического потенциала...“. Решению проблем, связанных с существованием таких особенностей, посвящено много использующих квантово-полевые методы работ (описаны Васильевым [21]). Леванюк и Гинзбург [3] указали границы области вблизи T_c , вне которой можно использовать теорию Ландау. В нашей работе [4] были развиты методы квантовой теории поля, позволяющие определить характер особенности термодинамического потенциала в точке T_c . Для рассматриваемой здесь модели в [4] нами было показано, что особенность в температурной зависимости потенциала в симметричной фазе является логарифмической типа $\ln(T_c/(T - T_c))$, где T — температура кристалла. Это не противоречит теории критических индексов [5], в которой для анализа ФП2 используются только степенные функции, что не позволяет выявить предсказанную Ландау особенность термодинамического потенциала. Ведь именно логарифмическая особенность потенциала принципиально не может быть обнаружена в этой теории.

Рассматриваемая нами модель системы с ФП2 была впервые предложена группой ленинградских ученых. ФП2, обусловленный сильным межзонным электрон-фононным взаимодействием, подробно исследован ими методами квантовой теории поля, а полученные результаты обобщены в монографии [6]. Оставалась нерешенной для этой модели проблема температурной зависимости термодинамического потенциала в ближайшей окрестности точки ФП2, т.е. при температурах вблизи T_c .

В этой модели кристалл с широкой запрещенной зоной (> 1 eV) рассматривается как система квантованных полей [7] носителей заряда и фононов с электрон-фононным взаимодействием. Используемый нами метод температурных (мацубаровских) квантовых функций Грина, учитывающий роль квантовых и тепловых флуктуаций, подробно описан в [4].

2. Рассматриваемая модель и ее свойства в области $T > T_c$

Для рассматриваемой здесь модели задача существенно упрощается благодаря тому, что в [6] уже была доказана применимость в этом методе теории возмущений с учетом поправок второго и четвертого порядка по поляризованному оператору. Кроме этого, в монографии [8] представлены формулы для вычисления добавки $\Delta\Omega$ к термодинамическому потенциалу от взаимодействия свободных электронного и фононного полей (используется система единиц с постоянными Планка \hbar и Больцмана k , равными единице). Более удобная для вычислений формула имеет вид

$$\Delta\Omega = T \sum_q \int_0^{g_0(\mathbf{q})} \frac{dg}{g} \sum_{\omega_n} \frac{\omega_n^2 + \omega_0^2(\mathbf{q})}{\omega_0^2(\mathbf{q})} [D(\mathbf{q}, \omega_n) - D^{(0)}(\mathbf{q}, \omega_n)], \quad (1)$$

где $\omega_n = 2\pi nT$, n — целое число. Функция Грина фононов с учетом взаимодействия $D(\mathbf{q}, \omega_n)$ связана с функцией Грина невзаимодействующих фоно-

нов $D^{(0)}(\mathbf{q}, \omega_n) = \omega_0^2(\mathbf{q})[(i\omega_n)^2 - \omega_0^2(\mathbf{q})]^{-1}$ уравнением Дайсона

$$D(\mathbf{q}, \omega_n) = D^{(0)}(\mathbf{q}, \omega_n) + D^{(0)}(\mathbf{q}, \omega_n)P(\mathbf{q}, \omega_n)D(\mathbf{q}, \omega_n), \quad (2)$$

где $P(\mathbf{q}, \omega_n)$ — поляризационный оператор фононов.

Модель описывается гамильтонианом с межзонным взаимодействием электронов и фононов в симметричной фазе

$$H_{\text{int}} = (2N)^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} g_0(\mathbf{q}) \sqrt{\omega_0(\mathbf{q})} [a_2^+(\mathbf{k} + \mathbf{q})a_1(\mathbf{k}) + a_1^+(\mathbf{k} + \mathbf{q})a_2(\mathbf{k})] (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+), \quad (3)$$

в котором N — число ячеек в кристалле; $b_{\mathbf{q}}$ и $b_{\mathbf{q}}^+$ — операторы уничтожения и рождения фононов с импульсом \mathbf{q} и частотой $\omega_0(\mathbf{q})$; $g_0(\mathbf{q})$ — константа их взаимодействия с электронами валентной зоны (индекс 1) и зоны проводимости (индекс 2). Поля электронов этих двух зон с одночастичными энергиями $E_{\sigma}(\mathbf{k})$ ($\sigma = 1, 2$) описываются операторами рождения $a_{\sigma}^+(\mathbf{k})$ и уничтожения $a_{\sigma}(\mathbf{k})$. Гамильтониан свободных полей электронов и фононов имеет вид

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\sigma}(\mathbf{k}) a_{\sigma \mathbf{k}}^+ a_{\sigma \mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q}) b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}. \quad (4)$$

В [4] для модели (3), (4) в четвертом порядке теории возмущений было получено соотношение

$$\Delta\Omega = - \sum_{\mathbf{q}} \int_0^{g_0(\mathbf{q})} 2g d g [2n(\omega(\mathbf{q}), T) + 1] \times \omega_0^2(\mathbf{q}) \bar{\Delta}^{-1}(\mathbf{q}) \omega^{-1}(\mathbf{q}), \quad (5)$$

где $\bar{\Delta}(\mathbf{q}) = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} [E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k} - \mathbf{q})]$ — среднее расстояние между подуровнями валентной зоны и подуровнями зоны проводимости, различающимися по импульсу на \mathbf{q} , а $n(\omega(\mathbf{q}), T) = \exp(\omega(\mathbf{q})/T)^{-1}$ — функция Бозе-распределения для фононов с частотой $\omega(\mathbf{q})$ при температуре T . Согласно [6], перенормированный взаимодействием в четвертом порядке теории возмущений квадрат фононной частоты имеет вид

$$\omega^2(\mathbf{q}) = \omega_0^2(\mathbf{q}) \left[1 - \frac{4g^2}{\bar{\Delta}(\mathbf{q})} + \frac{48g^4 T}{4\bar{\Delta}^3(\mathbf{q})} \right]. \quad (6)$$

Если в (6) вместо g использовать $g_0(\mathbf{q})$, то частота $\omega^2(\mathbf{q})$ обращается в нуль при

$$T = T_c(\mathbf{q}) \equiv [4g_0^2(\mathbf{q}) - \bar{\Delta}(\mathbf{q})] \bar{\Delta}^2(\mathbf{q}) / 24g_0^4(\mathbf{q}), \quad (7)$$

а при $T > T_c(\mathbf{q})$ величина $\omega^2(\mathbf{q})$ положительна. Условие $4g_0^2(\mathbf{q}) > \bar{\Delta}(\mathbf{q})$ является условием сильной связи. Рассмотрим, как это обычно делается в теоретических моделях, случай, когда только для одной моды

колебаний с волновым вектором \mathbf{q}_0 величина в правой части (7) положительна. Соответствующую температуру $T_c(\mathbf{q}_0)$ называют температурой ФП2. Тогда для температур T выше точки перехода вблизи $T_c(\mathbf{q}_0)$ частота $\omega(\mathbf{q}_0) \ll T_c(\mathbf{q}_0)$. Поскольку для широкозонных полупроводников (например, для SbSI и BaTiO₃) $T_c/\bar{\Delta}$ порядка 10^{-2} , при $t = T - T_c \ll T_c(\mathbf{q}_0) \ll \frac{1}{6} \bar{\Delta}$ интеграл по g в соотношении (5) в слагаемом с $\mathbf{q} = \mathbf{q}_0$ легко вычисляется [4], и оно приобретает вид

$$\Delta\Omega(q_0) = -\frac{T_c}{2} \ln \frac{3t}{2\bar{\Delta}} = \frac{T_c}{2} \left(\ln \frac{T_c}{t} + \ln \frac{2\bar{\Delta}}{3T_c} \right), \quad (8)$$

так что при $T \rightarrow T_c$ величина $\Delta\Omega(\mathbf{q}_0) \rightarrow +\infty$. Это и есть предсказанная Ландау особенность термодинамического потенциала, которая не позволяет использовать его теорию ФП2 в области Гинзбурга–Леванюка, где эта особенность существенна. Заметим также, что в нашем случае $T_c(\mathbf{q}_0)/\bar{\Delta}(\mathbf{q}_0) \leq 10^{-2}$ соотношение (7) позволяет оценить величину $4g_0^2(\mathbf{q}_0)$. Согласно (7), она может лишь на проценты отличаться от $\bar{\Delta}(\mathbf{q}_0) \sim 1$ eV, а следовательно, g_0^2 порядка десятых долей eV.

Стремление частоты актуальных фононов к нулю (6), (7) при $T \rightarrow T_c$ означает, что их равновесное число стремится к бесконечности. Но еще быстрее стремится к бесконечности число микроскопических состояний системы, относящихся к рассматриваемому термодинамическому. Энтропия S системы фононов как логарифм этого числа также будет стремиться к бесконечности (отметим, что химический потенциал фононов равен нулю). В нашем случае вклад в энтропию от состояний, обеспечивающих логарифмический рост $\Delta\Omega$ при $T \rightarrow T_c$, можно оценить по формуле $\Delta S = -\frac{\partial \Delta\Omega}{\partial T} \sim \frac{1}{t}$, а число этих состояний — $\Delta\Gamma \sim \exp(\tau/t)$, $\tau > 0$. Это и предопределяет обращение в бесконечность термодинамического потенциала при $T \rightarrow T_c$ и невозможность перехода в упорядоченную фазу по равновесным макросостояниям. На основании изложенного выше можно считать макросостояния в некоторой области температур (T_c, T_0) существенно неравновесными, если в этой области логарифмический вклад в $\Delta\Omega$ будет заметен на фоне вклада неактивных фононных мод.

3. Термодинамический потенциал системы в упорядоченной фазе

Вычисление $\Delta\Omega$ в области $t < 0$ использованным выше методом провести не удастся, так как возникающие при ФП2 когерентные смещения положений равновесия атомов в кристалле изменяют его симметрию, а тепловые и квантовые флуктуации усложняют проблему. Существенное упрощение достигается, если, учитывая когерентность смещений, использовать представление квантово-когерентных состояний. В этом представлении можно найти значение термодинамического потенциала при $T = 0$ К (когда тепловые колебания атомов

отсутствуют и энтропия системы равна нулю) как среднее значение гамильтониана (3), (4) в состоянии с деформацией решетки. С учетом того, что электронные процессы в нашей системе с широкой (~ 1 eV) запрещенной зоной развиваются за время порядка 10^{-15} s, а фононные — за 10^{-13} s, вектор ее состояния в адиабатическом приближении может быть представлен в виде произведения $|U|0\rangle\psi \equiv |d, \psi\rangle$. В этом произведении ψ — вектор состояния электронной подсистемы, в котором для простоты мы не будем учитывать спиновую переменную; $|0\rangle$ — вектор основного состояния поля фононов; $U = \prod_q \exp(d_q b_q^+ - d_q^* b_q)$ — унитарный оператор перехода к новому представлению для системы фононов, где d_q — комплексные числа [9,10]. Среднее $\bar{H} = \langle d, \psi | \hat{H} | d, \psi \rangle$ гамильтониана (3), (4) можно представить в виде

$$\bar{H} = \sum_{k, \sigma=1}^2 E_\sigma(\mathbf{k}) \langle \psi | a_{\sigma\mathbf{k}}^+ a_{\sigma\mathbf{k}} | \psi \rangle + \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \omega(\mathbf{q}) d_{\mathbf{q}}^+ d_{\mathbf{q}} + \sum_{k, \sigma \neq \sigma'} \sqrt{\frac{\omega(\mathbf{q})}{2N}} g_0(\mathbf{q}) \langle \psi | a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma'} | \psi \rangle (d_{\mathbf{q}} + d_{-\mathbf{q}}^+) \right\}, \quad (9)$$

так как число реальных квантов в состоянии $|d, \psi\rangle$ равно нулю. Энергия основного состояния системы будет близка к минимальному значению \bar{H} при варьировании состояния $|d, \psi\rangle$, так как число вариационных параметров $d_{\mathbf{q}}$ бесконечно. Приравнявая нулю производную функцию (9) по $|d_{\mathbf{q}}|$ ($\mathbf{d}_{\mathbf{q}} = |d_{\mathbf{q}}| \exp[i\varphi(\mathbf{q})]$), найдем экстремум

$$\bar{H} = \sum_{k, \sigma=1}^2 E_\sigma(\mathbf{k}) \langle \psi | a_{\sigma\mathbf{k}}^+ a_{\sigma\mathbf{k}} | \psi \rangle - \sum_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q}) |d_{\mathbf{q}}|^2, \quad |d_{\mathbf{q}}| = -\frac{\cos \varphi(\mathbf{q})}{\sqrt{2N\omega(\mathbf{q})}} \sum_{k, \sigma \neq \sigma'} g_0(\mathbf{q}) \langle \psi | a_{\sigma\mathbf{k}}^+ a_{\sigma', \mathbf{k}-\mathbf{q}} | \psi \rangle, \quad (10)$$

который соответствует минимуму при $\cos \varphi(\mathbf{q}) = -1$. Соотношения (10) четко указывают на то, что энергия взаимодействия электронов с когерентной деформацией отрицательна и в 2 раза больше энергии самой деформации. Так что деформация, соответствующая структурному ФП2 при T_c , будет энергетически выгодной. Подобная ситуация имеет место в пайерлсовском диэлектрике с волной зарядовой плотности [11].

Обычно в теории фазовых переходов под влиянием электрон-фононного взаимодействия рассматривают простейший случай, когда сильным взаимодействием является взаимодействие электронов только с фононами с импульсом $\mathbf{q} = 0$, т.е. взаимодействие в случае $g_0(\mathbf{q}) = g_0 \delta_{\mathbf{q}0}$, где $\delta_{\mathbf{q}0}$ — символ Кронекера. Этому случаю соответствует согласно (10)

$$d_0 = (2N\omega_0\omega)^{-1/2} g_0 \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi | a_{\sigma\mathbf{k}}^+ a_{\sigma'\mathbf{k}} | \psi \rangle. \quad (11)$$

Волновые функции состояния электронной подсистемы при учете межзонного электрон-фононного взаимодей-

ствия с передачей нулевого импульса фононам должны быть суперпозицией двух блоховских волновых функций из разных электронных зон с одинаковыми импульсами и варьируемыми коэффициентами суперпозиции C_{nm} (n и m принимают значения 1 и 2). В случае $\mathbf{q} = 0$, варьируя коэффициенты C_{nm} , получим минимальную энергию, т.е. энергию основного состояния системы E_0 , при $T = 0$ К

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ E_1(\mathbf{k}) - \frac{(2g_0^2 - \bar{\Delta})^2}{8g_0^2} \right\} = \sum_{\mathbf{k}} E_1(\mathbf{k}) + \Delta E_0, \quad (12)$$

где ΔE_0 — отрицательная добавка от взаимодействия,

$$d_0 = N^{1/2} \sqrt{\frac{4g_0^4 - \bar{\Delta}^2}{8\omega(0)g_0^2}}, \quad |C_{12}|^2 = \frac{2g_0^2 - \bar{\Delta}}{4g_0^2}. \quad (13)$$

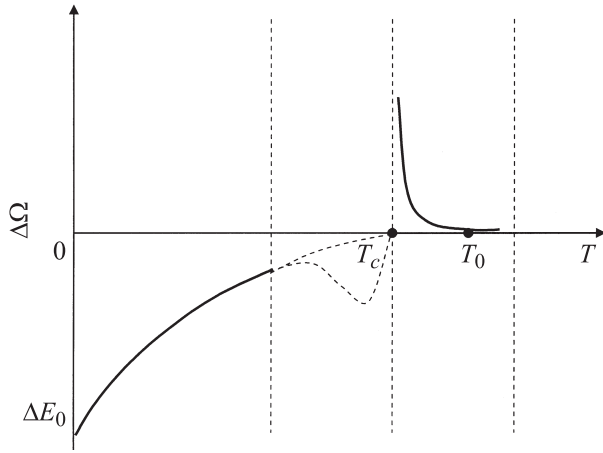
Условием реализации основного состояния системы с энергией (12) является условие сильной связи $2g_0^2 > \bar{\Delta}$, при котором $|C_{12}|^2$ действительно оказывается положительным. При учете спиновой переменной электронов это условие имеет вид

$$4g_0^2 > \bar{\Delta}. \quad (14)$$

Таким образом, использованный нами метод варьирования состояний электронной и фононной подсистем при сильном межзонном электрон-фононном взаимодействии позволил установить связь (13) между деформацией решетки при $T \rightarrow 0$ К, определяемой значением параметра d_0 , и изменением функции распределения электронов в элементарной ячейке за счет примешивания состояний зоны проводимости к состояниям валентных электронов с коэффициентом суперпозиции C_{nm} .

4. Заключение

На основании всего изложенного выше можно построить схему зависимости термодинамического потенциала статистически равновесных макросостояний от температуры в нашей модели (см. рисунок). Штриховыми вертикальными линиями на этом рисунке указаны границы области Гинзбурга–Леванюка. При температуре ниже нижней границы этой области справедливо разложение Ландау, а соответствующая ему температурная зависимость $\Omega(T) \sim (T - T_c)^2$ при значениях T , близких к T_c , представлена сплошной кривой, заканчивающейся, согласно (12), точкой $\Delta\Omega(0) = \Delta E_0$ при $T = 0$ К. В области Гинзбурга–Леванюка при $T < T_c$, в которой термодинамический потенциал рассчитать не удалось, предполагаемая зависимость изображена двумя штриховыми кривыми, переходящими на нижней границе в разложение Ландау. Верхняя из них соответствует положению $\Omega(T) \sim (T - T_c)^2$, используемому в теории Ландау, а нижняя — возможный вариант, согласованный с полученной нами зависимостью $\Delta\Omega(T)$ для области $T > T_c$. В области $T > T_c$ сплошной кривой изображен



Температурная зависимость добавки к термодинамическому потенциалу.

логарифмический рост $\Delta\Omega$ при $T \rightarrow T_c$, рассчитанный нами выше, T_0 — температура, при которой логарифмический вклад становится заметным на фоне регулярных слагаемых в $\Delta\Omega$.

Следует отметить, что T_c , согласно расчету поведения $\Delta\Omega$ при $T \geq T_c$, является температурой возникновения смещений атомов кристалла по нормальной координате моды с волновым вектором \mathbf{q}_0 , у которой максимальна константа связи $g(\mathbf{g}_0) > 0.5\Delta^{1/2}(\mathbf{q}_0)$. Для макроскопических кристаллов набор возможных волновых векторов мод практически непрерывен. Поэтому, если условие $g(\mathbf{q}_0) > 0.5\Delta^{1/2}(\mathbf{q}_0)$ выполняется для $\mathbf{q} = \mathbf{q}_0$, оно будет выполняться и в некоторой области пространства волновых векторов. Если смещения по нормальным координатам любых двух мод колебаний являются практически независимыми, т.е. если они достаточно малы, то активную роль в изменении структуры кристалла будут играть и моды с волновыми векторами \mathbf{q} , для которых $g(\mathbf{q}_0) > g(\mathbf{q}) > 0.5\Delta^{1/2}(\mathbf{q})$. Согласно (7), у таких мод частоты также будут обращаться в нуль, а их вклад в термодинамический потенциал будет иметь логарифмическую особенность. Но среди всех возможных мод будут существовать и устойчивые моды, для которых $g(\mathbf{q}) > 0.5\Delta^{1/2}(\mathbf{q})$. Эти неактивные моды не будут „смягчаться“, их вклад в термодинамический потенциал не будет иметь логарифмической особенности, а смещения по их нормальным координатам не будут когерентными. Таким образом, ФП2 в рассматриваемой модели кристалла будет размытым.

Степень размытости перехода определяется распределением числа активных мод по возможным значениям константы $g(\mathbf{q})$. Если воспользоваться разложением функции $g(\mathbf{q}) = g(\mathbf{q}_0) - \gamma|\mathbf{q} - \mathbf{q}_0|^2$ вблизи ее максимального значения $g(\mathbf{q}_0)$, то легко убедиться, что плотность числа активных мод по значениям g будет стремиться к бесконечности при $g(\mathbf{q}) \rightarrow g(\mathbf{q}_0)$. Так что температуры перехода для значительного числа мод с \mathbf{q} , близкими к \mathbf{q}_0 , будут концентрироваться в непо-

средственной окрестности температуры перехода T_c для моды \mathbf{q}_0 . Поэтому переход кристалла в новую фазу не будет пространственно однородным. При температурах вблизи T_c кристалл разобьется на домены с размерами $\Delta l \approx \frac{1}{\Delta q}$, где Δq — интервал разностей волновых векторов $|\mathbf{q} - \mathbf{q}_0|$ для мод с очень близкими значениями константы связи с электронами. Предельный размер домена в нашей модели определяется величиной $|\mathbf{q}_c - \mathbf{q}_0|^{-1}$, где \mathbf{q}_c — волновой вектор, удовлетворяющий равенству $4g^2(\mathbf{q}_c) = \Delta$.

Проводя анализ самого процесса ФП2 при понижении температуры, необходимо учесть, что при температурах $T_0 > T > T_c$, при которых заметно возрастает число фононов всех активных мод с $\omega \rightarrow 0$, флуктуационное появление когерентных деформаций, соответствующих по структуре упорядоченной фазе, будет энергетически выгодным в соответствии с соотношением (10), так как электронная подсистема адиабатически (мгновенно) следует за деформацией. Правда, возникновение такой деформации маловероятно, так как ее когерентность предполагает сфазированность смещений по нормальным координатам всех формирующих эту деформацию мод, но с ростом числа фононов эта вероятность растет. Именно энергетическая выгодность и сфазированность делают эту деформацию долгоживущей. Ведь ее исчезновение возможно только под влиянием новой флуктуации с когерентной деформацией, противоположной по фазам первой, которая также очень маловероятна. Но этот процесс разрушения домена уже не будет энергетически выгоден. При понижении температуры из метастабильной деформация превращается в стабильную при $T < T_c$. Подчеркнем, что в домене с флуктуационным возникновением при $T > T_c$ такой когерентной деформации при понижении температуры частоты актуальных мод не будут обращаться в нуль при $T = T_c$, так как структура его уже при $T > T_c$ соответствует упорядоченной фазе. Поэтому, например, при сегнетоэлектрическом переходе диэлектрическая проницаемость ϵ не будет расти до бесконечности при $T \rightarrow T_c$.

Таким образом, в области температур $T_c < T < T_0$, в которой возникают и развиваются домены в метастабильном состоянии, в кристалле оказываются сосуществующими обе структуры (симметричная и упорядоченная) даже в том случае, если состояния кристалла в процессе охлаждения при $\Delta\Omega \rightarrow \infty$ можно считать квазиравновесными. Но возможность реализации квазиравновесных состояний в процессе ФП2 при охлаждении кристалла далеко не очевидна. Ведь в равновесном макросостоянии при $T > T_c$ даже метастабильные подсистемы должны возникать и исчезать многократно. Все определяется шириной области температур $T_c \leftrightarrow T_0$ и скоростью процесса охлаждения.

Рассмотрим медленное охлаждение со скоростью $v = 1$ К/ч. Предположим, что при температуре T_0 частота активных фононных мод порядка 10^{10} Hz; следовательно, 10^{-10} s — время релаксации, так как время под-

страивания электронной подсистемы к возникшей структуре значительно меньше (10^{-15} s). За время релаксации температура изменится на $\Delta T = 3 \cdot 10^{-14}$ К. Примем, что температура перехода порядка 100 К. Согласно (8), средний вклад в $\Delta\Omega$ от активной моды с точностью до несущественных множителей на интервале $T_0 - T_c$ можно оценить по формуле $\ln(T_c/(T_0 - T_c))$. Поскольку ширина интервала $T_0 - T_c$ нам неизвестна, рассмотрим варианты с $T_0 - T_c$, равным 0.1 К или 10^{-30} К. Если $T_0 - T_c \approx 0.1$ К, то, согласно (8), $\ln(T_c/(T_0 - T_c)) \approx 8$. Следовательно, заметный вклад в термодинамический потенциал $n \cdot \ln(T_c/(T_0 - T_c))$ будут вносить активные моды, если их количество порядка $n = 1/8$ от количества N всех мод рассматриваемой фононной ветви (N — число элементарных ячеек в кристалле). При таком огромном ($N/8$) количестве активных мод флуктуативный домен с когерентной деформацией будет состоять из восьми элементарных ячеек. Такая малая флуктуация сможет многократно, порядка $\frac{T_0 - T_c}{\Delta T} \approx 10^{13}$ раз, возникнуть и релаксировать в процессе охлаждения системы. Следовательно, при таком большом $T_0 - T_c$ в процессе ФП2 состояния кристалла можно считать квазиравновесными. При таком ФП2 можно будет экспериментально заметить смещение частот мягких мод и рост ε в сегнетоэлектрическом переходе.

В случае $T_0 - T_c \approx 10^{-30}$ К найдем, что $\ln(T_c/10^{-30} \text{ К}) \approx 74$. Следовательно, метастабильный домен, возникающий при $T > T_c$, в этом случае будет содержать 74 ячейки, а его стабилизация в новой структуре будет происходить при температурах ниже T_c . Скорость охлаждения $v = 1 \text{ К/ч}$ в этом случае оказывается слишком большой (интервал $T_0 - T_c$ будет пройден за 10^{-30} h). Она не позволит на опыте заметить существование метастабильных состояний в кристалле при $T > T_c$, а процесс ФП2 не будет квазиравновесным.

Таким образом, при ФП2 флуктуативно могут возникнуть метастабильные домены упорядоченной фазы в симметричной фазе с размерами в нанометровом диапазоне. После перехода температуры через область Гинзбурга–Леванюка в совершенных кристаллах упорядоченные структуры станут равновесными. Поляризацию в этих структурах можно будет переключать внешним полем и даже монодоменизировать кристалл. В кристаллах с большим числом примесей и дефектов (неупорядоченные сегнетоэлектрики и ферромагнетики) фазовый переход второго рода может протекать с образованием в области Гинзбурга–Леванюка и неупорядоченных структур. Эти структуры будут закрепляться не только взаимодействием с электронной подсистемой кристалла, но и взаимодействием с примесями и дефектами. Причем действие примесей и дефектов может быть настолько сильным, что их переключение внешним полем может оказаться невозможным. Возникновение в области Гинзбурга–Леванюка метастабильных структур, их закрепление примесями и дефектами, процессы переключения в таких структурах неоднократно обсуждались в печати [12–14].

Список литературы

- [1] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1976). 568 с.
- [2] А.Н. Васильев. Квантово-полевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике. Изд-во ПИЯФ, СПб (1998). 774 с.
- [3] В.Л. Гинзбург. ФТТ **2**, 2031 (1960).
- [4] А.Э. Мясникова, Э.Н. Мясников, З.П. Мастропас. ТМФ **157**, 2, 273 (2008).
- [5] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1975).
- [6] Э.В. Бурсиан, Я.Г. Гиршберг. Когерентные явления в сегнетоэлектриках. Мир, М. (1989). 197 с.
- [7] J. Zinn-Justin. Quantum field theory and critical phenomena. 3rd ed. Clarendon Press, Oxford (1999).
- [8] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Наука, М. (1962).
- [9] М. Лэкс. Флуктуации и когерентные явления. Мир, М. (1974). 242 с.
- [10] Дж. Клаудер, Э. Сударшан. Основы квантовой оптики. Мир, М. (1970). 280 с.
- [11] И.В. Криве, А.С. Рожавский. УФН **152**, 1, 33 (1987).
- [12] V.A. Ryzhov, A.V. Lazuta, V.P. Khavronin, I.I. Larionov, I.O. Troyanchuk, D.D. Khalyavin. Solid State Commun. **103**, 804 (2004).
- [13] M.R. Cimberle, R. Masini, F. Canepa, G. Costa, A. Vecchione, M. Polichetti, R. Ciancio. Phys. Rev. B **73**, 214 424 (2006).
- [14] A.B. Beznosow, V.V. Eremenko, E.L. Fertman, V.A. Desnenko, D.D. Khalyavin. Low. Temp. Phys. **28**, 762 (2002).