Письма в ЖЭТФ, том 24, вып. 7, стр. 403 – 406 *5 октября 1976 г.*

О ВОЗМОЖНОСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ РАВНОВЕСНЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ СОСТОЯНИЙ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

М.А.Кривоглаз

Обсуждается косвенное взаимодействие большого радиуса, возникающее, когда сверхструктурный вектор обратной решетки $\mathbf{K}$ близок к расстоянию $2\mathbf{k}_F$ между почти плоскими участками поверхности Ферми (ПУПФ). Оно может привести к образованию неоднородной структуры, состоящей из упорядоченных (УО) и неупорядоченных областей (НУО).

1. Дальнодействующие силы могут приводить к возникновению равновесных гетерогенных структур. В полупроводниках они связаны с экранированным кулоновским взаимодействием (см., например, [1]). В металлических системах взаимодействие большого радиуса может возникать, например, если $\mathbf{K} \approx 2\mathbf{k}_F$. Тогда фриделевские осцилляции $r^{-1}\cos(2\mathbf{k}_F r + \phi)$ приводят к взаимодействию между изменениями параметра порядка η типа $r^{-1}\cos(Qr + \phi)$, где $\mathbf{r} \parallel \mathbf{k}_F$, $Q = 2k_F - K$ и $Q \ll K$.

Это взаимодействие связано с логарифмической особенностью в зависимости поляризационного оператора $P(\mathbf{k})$ и удельной электронной энергии E_e от волнового вектора $\mathbf{k} - \mathbf{K}$ статической волны порядка [2].

При одномерном распределении $\eta(x)$ в кристаллах с одной парой ПУПФ во втором приближении по взаимодействию $V(k)\eta(k-K)$ электронов с неоднородностями параметра порядка имеем

$$E_e = -\sum_k A(k)|\eta(k-K)|^2; \quad A(k) = \frac{1}{2}|V(k)|^2\frac{P(\mathbf{k})}{\epsilon(\mathbf{k})} \approx A\ln\frac{\kappa^2}{(k-2k_F)^2+k_0^2}. \qquad (1)$$

Здесь $k \equiv k_x$, $\hbar = 1$, $A \sim (2\pi)^{-3}S/v_x$, $\kappa \sim \epsilon_F/v_x$, S – площадь ПУПФ, ϵ_F и v_x – энергия и скорость электронов на этом участке, k_0 имеет порядок наибольшей из величин kT/v_x, $|V(k)\eta(k-K)|/v_x$, обратной длины пробега электронов или "амплитуды гофрировки" ПУПФ. Первая формула для $A(k)$ справедлива в приближении псевдопотенциала при $|k-2k_F| >> k_0$, а вторая – когда диэлектрическая постоянная $\epsilon(\mathbf{k}) \approx 1$.

2. При низких температурах особенность $A(k)$ приводит к возникновению структур с волнообразным изменением $\eta(x) = \eta_0(x) \sim \cos(qx+\psi)$ (см., например, [3]). Однако при повышенных температурах, если неособая (локальная) часть термодинамического потенциала $\phi(\eta)$ ниже в неупорядоченной фазе и не является четной функцией η, то более выгодной может быть неоднородная структура, содержащая перемежающиеся УО и НУО больших размеров $\sim \pi/Q$. В ней УО сохраняются лишь вблизи максимумов волны модуляции параметра порядка при $\eta > 0(\phi(\eta>0) < \phi(\eta<0)$; вблизи же минимумов вместо УО с $\eta < 0$ образуются НУО со значительно меньшим $\phi(\eta)$. Несколько меньшее понижение особой части электронной энергии по сравнению со случаем $\eta_0(x)$ компенсируется при этом выигрышем среднего значения $\overline{\phi(\eta)}$.

Рассмотрим, например, простейшую модель одномерной структуры с периодом $2L_0 = 2\pi/q$, содержащей УО толщиной $2L = p2L_0$ с $\eta(x) = \eta = \mathrm{const}$ и НУО с $\eta(x) = 0$, когда $\eta(nq) = \eta(nqL_0)^{-1}\sin(nqL)$. Для простоты анализа ограничимся случаем $Q >> k_0$ и пренебрежем членами $\sim \zeta = (\ln Q/k_0)^{-1}$. Тогда с учетом (1) разность удельных термодинамических потенциалов гетерогенной системы и полностью неупорядоченной фазы при $\epsilon(\mathbf{k}) \approx 1$ можно записать в виде

$$\Delta\Phi = p\,\phi(\eta) + \frac{\sigma}{L_0} - A\eta^2p^2\frac{\sin^2 qL}{(qL)^2}\ln\frac{Q^2}{k_0^2+(q-Q)^2}; \quad qL = \pi p. \qquad (2)$$

Здесь учтено, что сумма (по n) членов в E_e без особенности типа $1/\zeta$ пропорциональна p. Она включена в $p\phi(\eta)$ и принято $\phi(0) = 0$. Связанная же с дальнодействием особая часть слагаемого с $n = 1$, пропорциональная $1/\zeta$ (при $q \approx Q$) выделена в отдельный член. Существенно, что он нелинейно зависит от p (этот важный эффект нелокальности $\Delta\Phi$ не был учтен в интересной феноменологической модели УО, рассматриваемых как флуктуационные образования [4]). Если поверхностная энергия σ достаточно мала ($\sigma Q << \phi(\eta)$), то значения $2L_0$, p и η, соответствующие минимуму $\Delta\Phi$, определяются формулами

$$\pi/L_0 = q \approx Q; \quad \sin 2\pi p = B(\eta) = \frac{\pi\phi(\eta)}{2\eta^2A\ln Q/k_0} < 0{,}72 \ \text{ при } \ \frac{1}{2} > p > 0{,}37;$$

$$\eta\left(\frac{\phi'(\eta)}{\phi(\eta)}\right) = \frac{\operatorname{tg}\pi p}{\pi p} . \tag{3}$$

Таким образом, если параметр $B(\eta)$ невелик (и $\phi(\eta) > 0$), то при $T < T_c$, где $B < B_c < 0{,}72$, происходит фазовый переход первого рода в неоднородное состояние со значительной долей p УО, расположенных в максимумах волны модуляции. Для того чтобы УО не возникали вблизи ее минимумов и не образовывалась обычная волна $\eta_0(x)$, функция $\phi(\eta)$ не должна быть четной и должно выполняться также условие $B(-\eta) > a \sim 1$. Учет зависимости η от x в УО, перераспределения концентрации в растворах и упругой энергии должен понизить $\Delta\Phi$ и стабилизировать неоднородное состояние.

3. В квазиодномерных кристаллах можно пренебречь взаимодействием между цепочками молекул и рассмотренные структуры должны возникать в каждой цепочке независимо. Случайные сдвиги фаз в цепочках понизят не только флуктуационную часть $\Delta\Phi$, но и E_e. Это связано с тем, что размытие узлов обратной решетки в диски, параллельные ПУПФ, уменьшает $\epsilon(\mathbf{k}) = 1 + 4\pi e^2 k^{-2} P(\mathbf{k})$ (увеличивая в среднем k^2), не меняя $P(\mathbf{k})$. Учет кулоновского взаимодействия может привести и к возникновению трехмерной структуры, где в поперечном направлении соседствуют УО и НУО (ср. [3]). Ее выгодности может способствовать также упругая энергия. Такая структура с чередующимися иглообразными участками, перпендикулярными ПУПФ, может образовываться не только в цепочечных системах, если выигрыш E_e и упругой энергии превысит рост поверхностной энергии боковых границ.

4. Если в кубических упорядоченных фазах имеется несколько векторов $\mathbf{K}$ вблизи ПУПФ, то для того, чтобы вклад в E_e давали все такие участки, должна возникать трехмерная гетерогенная структура. Рассмотрим, например, кристаллы с простой кубической решеткой, у которых ПУПФ расположены вблизи узлов типа $(h00)$. Примем, что возникающая структура состоит из кубических УО толщиной $2L$, периодически расположенных в неупорядоченной матрице на расстояниях $2L_0 = 2\pi/q$. Тогда при $\sqrt{S} >> Q$ и $\ln Q/k_0 >> 1$

$$\Delta\Phi = p\,\phi(\eta) + \frac{3}{L_0}\, p^{2/3}\sigma - \frac{3}{\pi^2}\, p^{2/3}\eta^2 A \ln\frac{Q^2}{k_0^2 + (q - Q)^2}\sin^2\pi\frac{L}{L_0}\,; \qquad p = \left(\frac{L}{L_0}\right)^3 . \tag{4}$$

Функция (4) имеет минимум, лежащий ниже минимума (2). Доля УО p монотонно растет при уменьшении B и σ, достигая значения $p \approx 0{,}27$ в пределе $B << 1$; $\sigma << \phi(\eta)/Q$.

5. Хотя приведенные результаты для простоты были получены в модели периодической гетерогенной структуры, установление корреляции на бесконечности не является необходимым, поскольку уже ближний порядок в расположении УО при не очень больших $\ln Q/k_0$ дает не намного меньший выигрыш E_e. Это связано с тем, что ближний порядок обуславливает достаточно острый пик структурного фактора в $\mathbf{k}$-пространстве (даже для стопки из трех слоев квадрат структурного фактора падает вдвое при удалении от максимума на $\approx q/7$). Поэтому с понижением

температуры должен произойти фазовый переход в гетерогенное состояние, имеющее, по-видимому, ближний порядок в расположении УО. Лишь при дальнейшем понижении температуры может установиться корреляция между ними на больших расстояниях. Затем может произойти фазовый переход в состояние с постоянным или волнообразным порядком.

Заметим, что рассмотренные гетерогенные состояния могут быть связаны не только с ПУПФ, но с любыми достаточно острыми минимумами функции $A(k)$. Аналогичные эффекты могут возникать также при магнитном упорядочении.

Институт металлофизики
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
2 августа 1975 г.

Литература

[1] М.А.Кривоглаз. ЖЭТФ, 63, 670, 1972; М.А.Кривоглаз, А.И.Карасевский. ФТТ, 16, 1458, 1974; 17, 2565, 1975; ЖЭТФ, 69, 297, 1975; Письма в ЖЭТФ, 19, 454, 1974.

[2] А.М.Афанасьев, Ю.Каган. ЖЭТФ, 43, 1456, 1962; L.M.Roth, M.J.Leiger, T.A.Kaplan. Phys. Rev., 149, 519, 1966; М.А.Кривоглаз, Тю Хао. Сб. "Дефекты и свойства кристаллической решетки", "Наукова думка", Киев, 1968 г., стр. 84.

[3] Л.Н.Булаевский. УФН, 115, 263, 1975.

[4] H.E.Cook. Acta Met., 22, 239, 1974; J. Appl. Cryst., 8, 132, 1975.