Письма в ЖЭТФ, том 13, стр. 208 – 211 *20 февраля 1971 г.*

КРИТИЧЕСКАЯ ТОЧКА ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА, БЛИЗКИХ КО ВТОРОМУ

А.М.Коротких, В.М.Набутовский

Известно, что в некоторых сегнетоэлектриках и магнетиках фазовый переход оказывается переходом первого рода, близким ко второму. Ларкин и Пикин [1] показали для упруго-изотропной модели, что переход первого рода связан со сжимаемостью решетки и влиянием длинноволновых фононов в том случае, когда без учета такого влияния теплоемкость обращается в бесконечность.

В реальных экспериментах всегда присутствуют факторы "размывающие" пик теплоемкости: электрическое поле E или магнитное поле H, примеси. Мы покажем, что существуют критические значения параметров, при которых фазовые переходы описанного типа исчезают, получим значения критического поля H_c, концентрации y_c и исследуем термодинамику вблизи такой критической точки.

Для простоты изложения ограничимся рассмотрением магнетиков. В качестве моделей используем модель Изинга в магнитном поле (МИП) и декорированную модель Изинга (ДМИ) [2]. В первом случае гамильтониан с учетом сжимаемости запишется в виде

$$\mathcal{H} = \sum_{ij}\left[\left(\frac{K_0}{2}-\frac{\mu}{3}\right)\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\alpha}\right)^2 + \mu\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta}\right)^2 + I\left(1+q\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\alpha}\right)\sigma_i\sigma_j\right] + \sum_i H m\sigma_i\,, \qquad (1)$$

а во втором

$$\mathcal{H} = \sum_{ij}\left[\left(\frac{K_0}{2}-\frac{\mu}{3}\right)\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\alpha}\right)^2 + \mu\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta}\right)^2 + I\left(1+q\frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\alpha}\right)\sigma_i\pi\right]. \qquad (2)$$

Здесь K_0 и μ-модули всестороннего сжатия и сдвига, $\partial u_\alpha/\partial r_\beta$ – тензор деформаций, I – обменный интеграл, $q = (a/3I)(\partial I/\partial a)$, a – межатомное расстояние, $\sigma_i = \pm 1$, π; $\sigma_j = 0, \pm 1$, m – магнитный момент узла.

Выполнив преобразования, описанные в [1] и разложив выражение для свободной энергии (3.1) из [3] по целым степеням τ, получим термодинамический потенциал Гиббса Φ для МИП в параметрической форме[1)]:

$$\Phi = \Phi_0 - \frac{p^2}{2K_0} + T_c\left[a h^{\rho} - \frac{b h^{-\epsilon}}{2}x^2 + \frac{d h^{-\phi}}{12}x^4 + \frac{\lambda}{2}\left(a h^{\rho} - b h^{-\epsilon}x + \frac{d h^{-\phi}}{3}x^3\right)^2\right]; \qquad (3)$$

$$t \equiv \frac{T - T_c - cp}{T_c} - \lambda a h^{\rho} = x - \lambda b h^{-\epsilon}x + \frac{\lambda d h^{-\phi}}{3}x^3, \qquad (4)$$

где Φ – плавная функция температуры T и давления p, $H_0 = I/m$, $h = H/H_0$ – безразмерное магнитное поле, $\lambda = 4\mu K_0 c^2/[T_c(3K_0 + 4\mu)]$, $c = (q/K_0)(\partial T_c/\partial a)$, x – параметр, T_c – температура перехода, $a, b, d \sim 1$, $\rho = \nu_2/(6-\nu_1)$, $\epsilon = (6-2\nu_2)/(6-\nu_1)$, $\phi = (18-4\nu_2)/(6-\nu_1)$, критические индексы ν_1 и ν_2 определяются соотношениями $\langle\langle m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')\rangle\rangle \sim |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-\nu_1}$, $\langle\langle \mathcal{E}(\mathbf{r})\mathcal{E}(\mathbf{r}')\rangle\rangle \sim |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-\nu_2}$. Для трехмерной модели Изинга $\nu_1 \approx 1$, $\nu_2 \approx 2{,}8$.

Из (4) следует, что x, а значит и Φ, становятся неоднозначными функциями температуры при $h < h_c = (\lambda b)^{1/\epsilon}$, причем $x_1 \to x_2$ при $h \to h_c$ (x_1 и x_2 – корни уравнения (4)).

Формулы (3), (4) дают возможность построить термодинамику системы вблизи критической точки в $h - t$ плоскости. Для простоты рассмотрим термодинамические величины вдоль линий $t = 0$ и $h = h_c$ (через $\tilde{y}$ обозначим особую часть величины y, $\eta = (H_c - H)/H_c$, $g_k \sim 1$).

---

1) Следует заметить, что в (3) нельзя осуществить непрерывный предельный переход $h \to 0$, поскольку в достаточно малой окрестности точки Кюри любое поле является сильным.

При $t \to 0^{\pm}$, $\eta > 0$,

$$\tilde{S}_{\pm} = \pm g_1(\lambda b)^{(\phi/2\epsilon)-(3/2)}\eta^{1/2}, \quad \tilde{M}_{\pm} \equiv \left(-\frac{\tilde{\partial}\phi}{\partial H}\right)_{\pm} = \pm\frac{g_2 T_c}{H_o}(\lambda b)^{\nu_1/(6-\nu_1)}\eta^{1/2},$$

$$\tilde{c}_p = \frac{\eta^{-1}}{\lambda}, \qquad \tilde{\chi} \equiv \left(\frac{\tilde{\partial} M}{\partial H}\right) = \frac{g_3 H_o}{T_c}(\lambda b)^{-(6-2\nu_1)/(6-2\nu_2)}\eta^{-1}, \tag{5}$$

$$\left(\frac{\partial\tilde{c}_v}{\partial T}\right)_{\pm} = \pm\frac{g_4}{T_c}\left(\frac{4\mu}{3K_o+4\mu}\right)^2(\lambda b)^{(-\phi/2\epsilon)-(1/2)}\eta^{-1/2}.$$

При $\eta = 0$

$$\tilde{c}_p = g_5(\lambda b)^{(\phi/3\epsilon)-(4/3)}t^{-2/3}, \quad \left(\frac{\partial\tilde{c}_v}{\partial T}\right) = \frac{g_6}{T_c}\left(\frac{4\mu}{3K_o+4\mu}\right)^2(\lambda b)^{(-\phi/3\epsilon)-(2/3)}t^{-1/3}. \tag{6}$$

Для ДМИ используя [1] и [2], находим для малых γ

$$\Phi = \Phi_o - \frac{p^2}{2K_o} + T_c\left[\frac{Ax^2}{2\gamma} + \frac{1-a}{2-a}\,\frac{B|x|^{(2-a)/(1-a)}}{\gamma^{(2-a)/(1-a)}} + \frac{\Lambda}{2}\left(\frac{Ax}{\gamma} - \frac{Bx|x|^{a/(1-a)}}{\gamma^{(2-a)/(1-a)}}\right)^2\right], \tag{7}$$

$$r \equiv \frac{T - T_c - cp}{T_c} = x - \frac{\lambda Ax}{\gamma} + \frac{\lambda Bx|x|^{a/(1-a)}}{\gamma^{(2-a)/(1-a)}}.$$

Здесь γ – концентрация немагнитных примесей, $A, B \sim 1$, a – критический индекс теплоемкости в модели Изинга, $a \doteq (6-2\nu_2)/(6-\nu_2)$. Фазовый переход первого рода исчезает при $\gamma > \gamma_c = \lambda A$. Особые части термодинамических величин, найденные из (5) при $t = 0$, $\xi = \dfrac{\gamma_c - \gamma}{\gamma_c} > 0$ имеют вид:

$$\tilde{S}_{\pm} = \pm g_8(\lambda A)^{(1-a)/a}\xi^{(1-a)/a}, \quad \tilde{c}_p = \frac{\xi^{-1}}{\lambda},$$

$$\left(\frac{\partial\tilde{c}_k}{\partial T}\right)_{\pm} = \pm\frac{g_9}{T_c}\left(\frac{4\mu}{3K_o+4\mu}\right)^2(\lambda A)^{-\chi-1}\xi^{(a-1)/a}, \tag{8}$$

а при $\xi = 0$, $r \neq 0$:

$$\tilde{c}_p = g_{10}(\lambda A)^{a/(1-a)}|r|^{-a}, \quad \left(\frac{\partial\tilde{c}_v}{\partial T}\right) = \frac{g_{11}}{T_c}\left(\frac{4\mu}{3K_o+4\mu}\right)^2(\lambda A)^{1/(1-a)}\frac{|r|^a}{r}. \tag{9}$$

Из формул (3) – (9) ясно, что в рассмотренном случае термодинамика существенно отличается от классической вблизи критической точки системы жидкость – газ [4]. В частности для МИП $c_p \sim t^{-2/3}$, а не t^{-1}.

Область применимости формул (6) и (8) ограничена условиями $|t| << (\lambda b)^{1/a}$ и $|t| << (\lambda A)^{1/a}$ соответственно для МИП и ДМИ. Такая сильная зависимость от λ ($1/a \approx 8$ для трехмерной модели Изинга) позволяет экспериментально наблюдать описанные эффекты лишь на веществах с λb (или λA) достаточно близким к единице.

По аналогичной причине ($1/\epsilon \approx 12$) описанные в [1] переходы первого рода подавляются уже слабыми магнитными полями.

Авторы благодарны А.З.Паташинскому за внимание к работе.

Институт неорганической химии
Академии наук СССР
Сибирского отделения

Поступила в редакцию
29 декабря 1970 г.

Литература

[1] А.И.Ларкин, С.А.Пикин. ЖЭТФ, 56, 1664, 1969.

[2] I.W.Essam, H.Gorelick. Proc. Phys. Soc., 92, 136, 1967.

[3] А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. ЖЭТФ, 50, 434, 1966.

[4] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика, М., 1964.