Краткие сообщения по физике № 8-1987 г.

УДК 538.27

ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ПОПРАВКИ И КРИТЕРИЙ ПРИМЕНИМОСТИ ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ЛАНДАУ ПРИ РАСЧЕТЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

А.А. Собянин, А.А. Стратонников

Рассматривается влияние границы полубесконечного образца на спектр флуктуаций параметра порядка вблизи точек фазовых переходов второго рода. Вычислена первая флуктуационная поправка к поверхностной энергии образца. Из сравнения ее с основным приближением теории Ландау получен критерий применимости этой теории, аналогичный критерию Гинзбурга для безграничных систем.

Изучению критических флуктуационных явлений в ограниченных системах вблизи точек фазовых переходов второго рода посвящено большое число теоретических работ /1,2/. Однако подавляющая их часть относится к области сильно развитых флуктуаций. Интерес представляет и противоположный предельный случай, когда флуктуационные поправки к теории фазовых переходов Ландау (приближению среднего поля) малы и их можно вычислить с помощью теории возмущений. Дело в том, что для целого ряда фазовых переходов (например, сверхпроводящих и структурных переходов) область вблизи T_c, где теория Ландау неприменима, узка, и вне ее соответствующие малые поправки являются ведущими. В других случаях вычисление флуктуационных поправок необходимо, поскольку их сравнение с основным приближением теории Ландау позволяет установить область применимости этой теории. Для пространственно однородных безграничных систем такая задача решена Гинзбургом /3/. Для пространственно неоднородных и ограниченных систем (пленки, доменные стенки и пр.) вычисление флуктуационных поправок следует провести заново. В /4–7/ эта задача ставилась, но ее решение не было доведено до конца.

В настоящем сообщении приведены результаты систематических вычислений первых флуктуационных поправок к аномалиям поверхностных термодинамических величин в случае полубесконечного образца с граничным условием $\eta = 0$ для параметра порядка на его поверхности и одиночной доменной стенки, разделяющей две безграничные области с противоположным знаком η.

Рассмотрим систему с однокомпонентным параметром порядка η, функционал Гинзбурга – Ландау которой имеет вид:

$$F = \int [-at\eta^2 + \frac{b}{2}\eta^4 + g(\nabla\eta)^2]dV, \quad t = (T_c - T)/T_c. \tag{1}$$

Ниже T_c равновесное распределение параметра порядка вблизи границы полубесконечного образца (с условием $\eta = 0$ на его поверхности), реализующее минимум функционала (1), дается выражением:

$$\eta_e(z) = (at/b)^{1/2}\ \mathrm{th}(z/2r_c), \quad r_c = (g/2at)^{1/2} = r_{co}t^{-1/2}. \tag{2}$$

Такое же распределение $\eta_e(z)$ имеет место и в области внутри доменной стенки с центром при $z = 0$. Подставляя (2) в (1), для температурно-зависящей части плотности поверхностной свободной энергии образца, вычисленной в основном приближении теории Ландау, получим

$$F_s^{(0)} = 2a^2 r_{co} t^{3/2}/3b \tag{3}$$

(в случае доменной стенки этот результат нужно умножить на 2).

Для вычисления вклада тепловых флуктуаций подынтегральное выражение в (1) разложим в ряд по степеням $\varphi = \eta(r) - \eta_e(r)$. С точностью до квадратичного члена получим:

$$F \approx F(\eta_e) + \int \varphi \hat{F}^{(2)} \varphi^* dV, \quad \hat{F}^{(2)} = -\vec{\nabla}^2 + 2at - 3at\ \mathrm{ch}^{-2}(z/2r_c). \tag{4}$$

Первая флуктуационная поправка к свободной энергии выражается через спектр собственных значений ϵ_k оператора $\hat{F}^{(2)}$ /4/:

$$F_{fl} = (T/2)\sum_k \ln\epsilon_k. \tag{5}$$

В пространственно однородном случае, т.е. без учета последнего слагаемого в выражении (4) для оператора $\hat{F}^{(2)}$, его собственные функции φ_k есть плоские волны ($\varphi_k^{(0)} = V^{-1/2} e^{ikr}$) и $\epsilon_k^{(0)} = gk^2 + 2at$. Неоднородность распределения $\eta_c(z)$ вблизи границы приводит к тому, что в спектре оператора $\hat{F}^{(2)}$ появляется квазисвязанный уровень с энергией* $\epsilon_{cb} = gk_{\|}^2 + 3at/2$, а все остальные уровни испытывают температурно-зависящий сдвиг, величину которого для интересующего нас случая удается вычислить точно:

$$\delta\epsilon_k = -4ak_\perp r_{co}^2 L^{-1} [\operatorname{arctg}(1/2k_\perp r_c) + \operatorname{arctg}(1/k_\perp r_c)], \tag{6}$$

где L – толщина образца. Поверхностный вклад в свободную энергию найдем, подставляя в (5) собственные значения оператора $\hat{F}^{(2)}$ и удерживая в ответе наряду с членами, пропорциональными L (объемный вклад), члены, не зависящие от L при $L \to \infty$. Таких членов имеется три. Первый из них

$$F_{s.fl}^{(1)} = -\frac{5}{16\pi} \int_0^{k_m} \ln(gk_{\|}^2 + 2at)\, k_{\|} dk_{\|} = F_{s,reg}^{(1)} + \frac{5}{16\pi} \frac{T_c a}{g} t \ln t \tag{7}$$

представляет собой поправку, связанную с переходом в (5) от суммирования к интегрированию по $k_\perp$. Заметим, что при написании последнего и нижеследующих выражений явно выделены лишь основные, неаналитически зависящие от t слагаемые, относя все остальные слагаемые к регулярной части поверхностной свободной энергии. При $T > T_c$ флуктуационная поправка типа (7) является единственной.

Второй флуктуационный член в поверхностной энергии (присутствующий лишь ниже T_c)

$$F_{s.fl}^{(2)} = \frac{T}{4\pi} \int_0^{k_m} k_{\|} \ln\epsilon_{cв} dk_{\|} = F_{s.reg}^{(2)} - \frac{3}{16\pi} \frac{T_c a}{g} t \ln t \tag{8}$$

описывает вклад связанного состояния. Температурная зависимость вкладов (7) и (8) одинакова и совпадает с температурной зависимостью первой флуктуационной поправки к свободной энергии в однородной двухмерной системе /1/.

Величина третьего вклада в $F_{s,fl}$, связанного со сдвигом уровней в квазисплошном спектре, дается выражением

$$F_{s,fl}^{(3)} = \frac{T}{16\pi^3} \int \frac{L\delta\epsilon_k}{\epsilon_k^{(0)}} dk = F_{s,reg}^{(3)} - \frac{3}{2\pi^2} \frac{T_c a r_{co} k_m}{g} t^{1/2} - \frac{5}{32\pi} \frac{T_c a}{g} t \ln t. \tag{9}$$

Здесь главным при $t \to 0$ является второе слагаемое, зависящее от обрезающего волнового вектора k_m. Однако оно полностью устраняется при учете обусловленной флуктуациями перенормировки температуры фазового перехода. Действительно, как показано в /8,9/, при учете тепловых флуктуаций η фазовый переход происходит не при $t = 0$, а при $t = t_0 \equiv 3T_c k_m b/2\pi^2 ag$. В соответствии со сказанным, в (3) нужно произвести замену $t \to t + t_0$, после чего первое поправочное слагаемое, возникающее при разложении $(t + t_0)^{3/2}$ в ряд по t_0/t, в точности сокращается со вторым слагаемым в формуле (9).

Объединяя выражения (7) – (9), для первой флуктуационной поправки к плотности поверхностной свободной энергии ниже T_c получим (за вычетом слагаемых, регулярно зависящих от t)

$$F_{s,fl} = -(T_c a/32\pi g)\, t \ln|t|, \tag{10}$$

(выше T_c эта поправка просто меняет знак без изменения численной величины коэффициента).

---

* В случае доменной стенки наряду с указанным имеется второй квазисвязанный уровень с энергией $\epsilon_{cв}^{(0)} = gk_{\|}^2$, отвечающий капиллярным волнам. Далее он во внимание не принимается, поскольку вклад этого уровня в термодинамику межфазной границы не зависит от $T - T_c$.

Дважды дифференцируя (10) по t, получим соответствующую флуктуационную поправку к теплоемкости $C_{s,fl} = T_c a/32\pi g t$. Требуя, чтобы эта поправка была мала по сравнению с основным приближением теории Ландау $C_s^{(o)} = -(1/T)\,\partial^2 F_s^{(o)}/\partial t^2 = -a^2 r_c/2bT_c$, приходим к следующему условию применимости теории Ландау для расчета поверхностных термодинамических величин:

$$|t| \gg (1/128\pi^2)\mathrm{Gi}, \tag{11}$$

где $\mathrm{Gi} = T_c^2 b^2/ag^3$ — число Гинзбурга.

Условие (11) аналогично обычному критерию Гинзбурга /3,8/. Отличие состоит лишь в другом численном значении коэффициента в правой части (11), которое в случае однородной безграничной системы тоже весьма мало и составляет (в случае флуктуационных поправок к теплоемкости) $1/64\pi^2$ и $1/8\pi^2$ соответственно при $T > T_c$ и $T < T_c$.

Выше вычислены флуктуационные поправки к поверхностной энергии полубесконечного образца и к энергии доменной стенки. Аналогичным образом можно рассчитать поверхностные флуктуационные поправки к восприимчивости и среднему значению параметра порядка. Кроме того, расчет легко обобщить на случай, когда граничное условие для параметра порядка имеет вид $l(d\eta/dz) - \eta = 0$ с положительным или отрицательным значением длины экстраполяции l /1/. Условие типа (11) остается в силе и в указанных более общих случаях. Отсюда можно сделать вывод, что критерий Гинзбурга определяет пределы применимости теории Ландау не только в случае однородных, но и пространственно неоднородных задач.

Авторы благодарны Л.Н. Булаевскому, В.Л. Гинзбургу и Д.А. Киржницу за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Binder K. In: Phase transitions and critical phenomena, ed. C. Domb, J. L. Lebowitz, New York, Acad. Press, 1983, vol. 8.
2. Jasnow D. Rep. Prog. Phys., 47, 1059 (1984).
3. Гинзбург В.Л. ФТТ, 11, 2031 (1960).
4. Kumar P., Maki K. Phys. Rev., B13, 2011 (1976).
5. Каганов М.И., Карпинская Н.С. ЖЭТФ, 76, 2143 (1979).
6. Zittartz J. Phys. Rev., 154, 529 (1967).
7. Brezin E., Halperin B.I., Leibler S. J. Physique, 44, 775 (1983).
8. Леванюк А.П. ФТТ, 5, 1776 (1963).
9. Вакс В.Г., Ларкин А.И., Пикин С.А. ЖЭТФ, 51, 361 (1966).

Поступила в редакцию 25 мая 1987 г.