

УДК 537.656

## К ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ БЕЗ ИЗМЕНЕНИЯ СИММЕТРИИ В ЛЕГИРОВАННЫХ МАНГАНИТАХ

**Б.Р. ГАДЖИЕВ, Ф.Б. ГОДЖАЕВ**

*Институт Физики НАН Азербайджана  
Пр.Г.Джавида,33 ,Баку, 370143*

Обсуждается возникновение фазового перехода без изменения симметрии с промежуточной квазипериодической структурой в легированных структурах. Показано, что в системе в квазипериодической фазе с изменением концентрации легирования возможен переход металл-диэлектрик.

Изучение манганитов с перовскитоподобными структурами привело к открытию ряда новых явлений, в частности, колоссального магнитосопротивления [1-3]. Легированные манганиты, как твердые растворы, являются соединениями со смешанной валентностью и проявляют характерные решеточные и магнитные эффекты [4]. Структурные исследования показывают, что кристаллические структуры манганитов являются производными от структуры кубического перовскита, для которой характерны искажения, вызванные как несоответствием размеров катионов размерам занимаемых ими пор, так и эффектом Яна-Теллера [1-3,5]. Принято считать, что именно в результате этого реальные структуры манганитов обнаруживают, наряду с кубической, моноклинную и ромбоэдрическую симметрию. Кроме этого, в реальных материалах, благодаря разнице ионных радиусов атомов структуры и атомов замещения, возникают дополнительные, характеризующиеся фактором толерантности, искажения решетки [2,6]. Экспериментальные данные о фазовой диаграмме на плоскости температура – концентрация ( $T-m$ ) свидетельствуют об аномально сильной связи между магнитной подсистемой и кристаллической решеткой в манганитах лантана [2]. Из анализа топологически эквивалентных фазовых диаграмм манганитов следует, что температура перехода из парамагнитного состояния в магнитоупорядоченное состояние является нелинейной функцией концентрации  $m$ , с ростом которой наблюдается последовательность переходов типа порядок-порядок между различными магнитоупорядоченными состояниями [1]. Так, для предельных концентраций  $m=0$  и  $m=1$  во всех известных манганитах наблюдается антиферромагнитное упорядочение и эти соединения являются изоляторами [1,6]. Скошенное магнитное упорядочение возникает при незначительном ( $m \ll 1$ ) допировании структуры и соединение также является изолятором, причем эта фаза наблюдается как вблизи  $m=0$ , так и  $m=1$ . С дальнейшим ростом  $m$  на фазовой диаграмме возникает ферромагнитное упорядочение [1]. Ферромагнитно-упорядоченная фаза при варьировании  $m$  испытывает переход металл-диэлектрик, то есть происходит фазовый переход между состояниями ФИ (ферромагнетик-изолятор) – ФМ (ферромагнетик-металл) [1,7]. Последний переход не сопровождается структурным фазовым переходом [1,7] и является переходом без изменения симметрии. В соединениях  $(La_{1-m}Ca_m)MnO_3$ ,  $(La_{1-m}Sr_m)MnO_3$  и  $(Pr_{1-m}Sr_m)MnO_3$  в ферромагнитно-упорядоченном состоянии переход металл-диэлектрик происходит приблизительно при  $m \approx 0.2$  [1]. Топологическая

эквивалентность фазовых диаграмм манганитов указывает на единство физических процессов, протекающих в легированных манганитах. В данной работе фазовые переходы без изменения симметрии и переходы металл-диэлектрик в легированных манганитах анализируются с учетом энергии, вносимой легированием структуры.

Таким образом, в общем случае, можно считать, что физические свойства твердых растворов определяются соизмеримостью порядка и беспорядка в структуре.

Рассмотрим непрерывный фазовый переход в неоднородной системе. Пусть параметр порядка до и после перехода отличен от нуля и преобразуется по единичному представлению группы симметрии структуры. Такой фазовый переход может происходить в системе с неоднородным распределением заряда, если это распределение зависит от температуры [5]. В соответствии с симметричными аргументами, с учетом энергии, которую вносит неоднородность структуры, выражение для функционала свободной энергии системы можно представить в виде

$$F = \frac{1}{d} \int_0^d f(x) dx, \tag{1}$$

$$f(x) = a\eta + \frac{\beta}{4}\eta^4 + \frac{\delta}{2}\eta'^2 + \frac{\chi}{2}\eta \cdot \eta'^2 + \frac{\lambda}{2}\eta''^2,$$

здесь  $\alpha = \alpha_0(T - T_0)$ ,  $T_0$  — точка фазового перехода,  $d$  является периодом функции  $f(x)$  и штрих обозначает пространственную производную.

Равновесные значения параметра порядка  $\eta$  определяются из условия минимума функционала  $F$ . Соответствующее уравнение Эйлера имеет вид:

$$\lambda\eta^{IV} - (\delta + \chi\eta)\eta'' - \frac{\chi}{2}\eta'^2 + \alpha + \beta\eta^3 = 0. \tag{2}$$

Равновесный период определяется из условия  $\frac{\delta F}{\delta d} = 0$ , которое имеет вид:

$$\lambda \cdot \left( \eta''''\eta' - \frac{1}{2}\eta''^2 \right) - \frac{1}{2}(\delta + \chi\eta)\eta'^2 + \alpha\eta + \frac{\beta}{4}\eta^4 = F. \tag{3}$$

Интегрирование уравнения (3) по  $x$  от нуля до  $d$  и подстановка выражения для  $F$  (1) приводит к условию равновесия в виде

$$\int_0^d (\delta\eta'^2 + 2\lambda\eta''^2 + \chi\eta\eta'^2) dx = 0. \tag{4}$$

Введем функцию  $Z(\eta) = \eta'^2$ . Тогда, используя уравнение (3) для  $Z(\eta)$ , получаем уравнение

$$\frac{\lambda}{8}(4ZZ'' - Z'^2) - \frac{1}{2}(\delta + \chi\eta)Z + \alpha\eta + \frac{\beta}{4}\eta^4 = F. \tag{5}$$

Если известно решение уравнения (5), тогда

$$x = \int [Z(\eta)]^{\frac{1}{2}} d\eta. \tag{6}$$

Решение уравнения (5) будем искать в виде полинома

$$Z(\eta) = \frac{a_3}{3}\eta^3 + \frac{a_2}{2}\eta^2 + a_1\eta + a_0. \tag{7}$$

Уравнение (5) имеет действительные корни лишь при  $Z(\eta) > 0$ . Однако, интервал значений интеграла, при которых  $Z \rightarrow 0$ , должен быть ограниченным, иначе величина  $\eta$  достигла бы бесконечных значений. Следовательно, необходимо рассмотреть случай, когда уравнение для  $Z(\eta)$  имеет три реальных корня.

Последнее означает, что имеется только одна область значений  $\eta$ , в которой  $Z(\eta) > 0$ .

Решения уравнения (6) имеют вид:

$$1) \text{ если } a_3 > 0, \text{ то } \eta(x) = c + (b-c)sn^2(px, k), \text{ где } p = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{a_3(a-c)}{3}}, k_1^2 = \frac{b-c}{a-c} < 1 \quad (8)$$

$$2) \text{ если } a_3 < 0, \text{ то } \eta(x) = a + (a-b)cn^2(px, k), \text{ здесь } p = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-a_3(a-c)}{3}}, k_2^2 = \frac{a-b}{a-c} < 1, \quad (9)$$

а  $a > b > c$  — реальные корни уравнения  $Z(\eta) = 0$ . Из уравнений (8) и (9) определяется период  $d = \frac{2K(k)}{p}$ , где  $K(k)$  полный эллиптический интеграл первого рода.

Необходимо подчеркнуть, что среднее значение решений (8) отлично от нуля.

Таким образом, учет энергии беспорядка, вносимого при легировании в структуру с данным порядком, порождает квазипериодическое упорядочение в системе. В приближении сплошной среды распределение неоднородностей в структуре можно характеризовать вектором смещения  $u(\vec{r})$  [7]. Как известно [7], относительное изменение объема  $\rho$  при деформации выражается вещественным тензором деформации  $\xi$

$$\rho = Sp\xi = \text{div}u(\vec{r}). \quad (10)$$

Естественно предположить, что параметр порядка  $\eta$ , обладающий полной симметрией структуры, пропорционален  $\rho$ . Следовательно, в наиболее общем случае смещение является квазипериодической функцией координаты. Поэтому, как следствие квазипериодической зависимости смещений от координат, потенциальная энергия системы является квазипериодической функцией координаты.

В одномерном случае в приближении сильной связи уравнение Шредингера, посредством которого определяются энергетический спектр  $E$  и волновые функции электронов  $\psi = \sum_n c_n \phi_n$  в квазипериодическом потенциале, сводится к дискретной версии уравнения Матье [8]

$$t(c_{n+1} + c_{n-1}) + \lambda \cos(qn + \phi)c_n = Ec_n. \quad (11)$$

В общем случае свойства систем, описываемых уравнением (11), определяются видом квазипериодического потенциала, энергии и волнового вектора [8]. Исследование уравнения Матье показывает, что при  $\lambda < 2$  все состояния являются делокализованными, тогда как при  $\lambda > 2$  состояния локализованы. В предельном случае  $\lambda = 2$  электронные состояния являются ни делокализованными, ни локализованными. На плоскости  $E-q$  в областях, где зона является квазинепрерывной, состояния - делокализованными. Если  $E = E(q)$  является однородной функцией, электронные состояния локализованы, и в промежуточной области между локализованными и делокализованными областями возникают псевдоделокализованные состояния. Так как свойство локализации является важным для проводимости, то изменение характера состояний на уровне Ферми как функции вектора модуляции порождает изменение проводимости материала. В этом смысле переход при  $\lambda = 2$ , определяемый уравнением Матье, может быть интерпретирован как переход металл-изолятор. Можно утверждать, что легирование структуры приводит к изменению спектра электронов. Естественно предположить, что это связано с зависимостью  $\lambda = \lambda(m)$ . Кроме этого, при низких уровнях легирования  $\lambda = \lambda(m)$  может оказаться случайной функцией концентрации

$m$  и в этом случае случайные флуктуации потенциала могут создать локализованные состояния [4].

В заключение отметим, что наличие в кристаллической структуре манганитов неоднородностей, вызванных легированием структуры, имеет ряд характерных следствий. Так, последовательный учет вклада энергии неоднородностей в общую свободную энергию системы показывает, что в манганитах может происходить непрерывный фазовый переход без изменения симметрии с образованием промежуточной квазипериодической структуры. При этом возникает ситуация, когда потенциальная энергия электронов (или дырок) становится квазипериодической функцией координаты. Как результат, в зависимости от значения параметра  $\lambda$  возможен переход металл-диэлектрик. По-видимому, вариации параметра  $\lambda$ , как функции концентрации уровня легирования, являются причиной фазового перехода ферромагнетик-металл – ферромагнетик-изолятор в манганитах  $(La_{1-m}Ca_m)MnO_3$ ,  $(La_{1-m}Sr_m)MnO_3$  и  $(Pr_{1-m}Sr_m)MnO_3$  при  $m \approx 0.2$ .

1. J.M.D.Coe, M.Viret and S. von Molner, *Adv. Phys.*, **48** N12 (1999) 167.
2. Л.П.Горьков, *УФН*, **168** (1998) 665.
3. Э.Л.Нагаев, *УФН*, **166** (1996) 883.
4. J.M.D.Coe, M.Viret and L.Ranno, *Phys. Rev. Lett.*, **75** (1995) 3910.
5. E.L.Nagaev, A.I.Podol'shchikov, *Phys. Rev. Lett. A*, **144** (1990) 473.
6. J.Inoue and S.Mackawa, *Phys. Rev. Lett.*, **74** (1995) 3407.
7. А.С.Давыдов, *Теория твердого тела*, М., Наука, (1976) 640.
8. P.Janssen and A.Janner, *Adv. Phys.*, **36** (1987) 519.

## AŞKARLANMIŞ MANQANİTLƏRDƏ FAZA KEÇİDLƏRİNİN NƏZƏRİYYƏSİNƏ DAİR

**B.R.HACIYEV, F.B.QOCAYEV**

Aşkarlanmış strukturlarda simmetriyanın dəyişilməməzliyi, aralıq kvaziperiodik srukturanın müşaidəsilə keçən faza keçidləri müzakirə olunur. Kvaziperiodik fazada aşkarlanma konsentrasiyasının dəyişməsilə bağlı metal-dielektrik keçidinin mümkünlüyü göstərilmişdir.

## A THEORY OF PHASE TRANSITIONS IN IMPURITY MANGANITES.

**B.R.GADZHIEV, F.B.GODZHAEV**

In impurity manganites with medium quasi-periodic structure the phase transitions without symmetry change have been discussed. It was showed that in quasi-periodic phase in system the metal-isolator transition was possible while the impurity concentration is varied.

Редактор: С.Мехтиева