

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ЗАРЯДОВЫЕ НЕОДНОРОДНОСТИ И ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ ВБЛИЗИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ВТОРОГО РОДА

В. В. Кабанов^{a,}, Р. Ф. Мамин^{b,c,**}, Т. С. Шапошникова^b*

*^a Jozef Stefan Institute
1000, Ljubljana, Slovenia*

*^b Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского
Казанского научного центра Российской академии наук
420029, Казань, Россия*

Поступила в редакцию 21 декабря 2007 г.,
после переработки 28 августа 2008 г.

Локализованные зарядовые неоднородности и фазовое расслоение описаны в рамках феноменологической теории фазовых переходов. Показано, что кулоновское взаимодействие определяет распределение заряда и размер возникающих неоднородностей. Фазовое расслоение, связанное с образованием зарядовых неоднородностей, становится возможным из-за больших значений диэлектрической проницаемости и малой плотности дополнительного заряда в области локализации. Построена фазовая диаграмма системы и сделаны оценки выигрыша в энергии такого состояния. Показана роль кулоновского взаимодействия и приведены соответствующие оценки.

PACS: 71.45.-d, 71.23.An, 74.25.Dw, 75.47.Lx

Сложная система взаимодействий между зарядовыми, спиновыми, орбитальными и решеточными степенями свободы, как полагают, может приводить к образованию неоднородных состояний с пространственным распределением заряда и фазовым расслоением. Влияние различных типов взаимодействий на процессы возникновения необычных магнитных и транспортных явлений, таких как колоссальное магнитосопротивление в манганитах [1–6] или высокотемпературная сверхпроводимость [7–10], широко и постоянно обсуждается. Было предсказано, что неоднородные состояния могут появляться даже выше температуры Кюри, и поэтому было предположено, что существует новая характерная температура T^* [5, 7]. В то время как тенденция к зарядовому и фазовому расслоению широко обсуждается как для манганитов [4–6], так и для антиферромагнитной фазы в купратах, в которых также наблюдается высокотемпературная сверхпроводимость [7], механиз-

мы происхождения этого экстраординарного поведения далеки от понимания. Вопрос о возможности и температурной области существования этого явления остается открытым [3–6, 8–11]. Построение последовательной микроскопической теории для конкретной системы является сложной и часто неразрешимой задачей из-за отсутствия полной информации о механизмах взаимодействия параметра порядка фазового перехода с дополнительным зарядом, возникающим при допировании. Однако многие вопросы, касающиеся возможности и характера зарядового и фазового расслоений, можно решить в достаточно общем виде в рамках феноменологической теории фазовых переходов. Мы покажем, что в случае, когда в системе имеется достаточно сильное взаимодействие параметра порядка с зарядом (о чем можно судить, например, опираясь на экспериментальные данные о сильной зависимости температуры фазового перехода от уровня допирования), в системе должно неминуемо возникать фазовое расслоение, связанное с образованием зарядовых неоднородностей. Другой целью настоящей статьи явля-

*E-mail: victor.kabanov@ijs.si

**E-mail: mamin@dionis.kfti.knc.ru

ется выяснение причин того, почему возникновение зарядовых неоднородностей возможно при наличии достаточно сильного кулоновского взаимодействия. Таким образом, в этой работе в рамках феноменологической теории фазовых переходов обсуждаются условия формирования неоднородных состояний с пространственно-локализованными зарядами и фазовым расслоением и проясняется роль кулоновского взаимодействия в этих явлениях.

Проблема пространственно-неоднородных состояний в заряженных системах, фрустрированных кулоновским взаимодействием, постоянно обсуждается применительно к различным системам [3–7, 13–19]. Очень часто в работах рассматривается фазовый переход первого рода, где плотность заряда связана с параметром порядка линейно (внешнее поле) [18] или с квадратом параметра порядка (локальная температура) [19]. При этом часто кулоновское взаимодействие обсуждается в общих словах, либо в последнюю очередь [6, 14, 15, 20]. Общий метод учета дальнедействующего кулоновского взаимодействия был предложен для двумерного случая в работах [18, 19]. В недавней работе [20] была предпринята попытка рассмотрения влияния кулоновского взаимодействия на фазовый переход второго рода, однако учет кулоновского взаимодействия сводился к специальным случаям, где распределение заряда не вытекало из общей постановки задачи, а угадывалось в попытках минимизировать кулоновский вклад в свободную энергию [20]. По нашему мнению, кулоновское взаимодействие является главным в определении вида и формы неоднородных состояний, поэтому в настоящей работе последовательно учитывается кулоновское взаимодействие.

Феноменологический подход к теории фазовых переходов выявляет возможность возникновения и особенности явлений, происходящих вблизи фазовых переходов, которые определяются близостью к фазовому переходу и слабо зависят от других свойств системы. Поэтому полученные нами результаты указывают на то, что свойства пространственно-неоднородных состояний определяются близостью системы к фазовому переходу, а не спецификой взаимодействия. Мы получили соответствующие оценки вклада кулоновского взаимодействия в термодинамический потенциал неоднородного состояния, позволяющие показать, что этот вклад может быть относительно мал, чтобы возникновение зарядовых неоднородностей стало возможным. Кроме того, мы последовательно показали, что фазовое расслоение возможно для системы, испытывающей

фазовый переход второго рода, и построили фазовую диаграмму неоднородных состояний.

Рассмотрим систему с допированием вблизи фазового перехода второго рода. Будем полагать, что в системе имеются свободные носители заряда, концентрация которых ρ пропорциональна концентрации допантов x ($x = \rho a^3 / e$, a — постоянная решетки, e — заряд электрона). В качестве конкретного примера можно привести фазовый переход в антиферромагнитную фазу в купратах. В данном случае в качестве параметра порядка можно выбрать намагниченность подрешеток, являющуюся псевдовектором (в случае манганитов параметром порядка будет намагниченность, см., например, работу [21]). Поскольку спин-орбитальное взаимодействие предполагается сильным, намагниченность жестко привязана к кристаллографическим осям. Поэтому параметром порядка можно считать компоненту намагниченности в данном кристаллографическом направлении. Пусть термодинамический потенциал Φ ($\Phi = \int \phi(\eta, \rho) dV$) описывает поведение параметра порядка системы η вблизи фазового перехода второго рода и взаимодействие параметра порядка с зарядом. Тогда плотность термодинамического потенциала $\phi(\eta, \rho)$, включающая все члены, которые соответствуют симметрии задачи [15], имеет следующий вид:

$$\phi(\eta, \rho) = \phi_0 + \phi_\eta + \phi_{int} + \phi_{coul}, \quad (1)$$

$$\phi_\eta(\eta) = \frac{\alpha}{2}\eta^2 + \frac{\beta}{4}\eta^4 + \frac{D}{2}(\nabla\eta)^2,$$

$$\phi_{int}(\eta, \rho) = \frac{\sigma_1}{2}\eta^2\rho + \frac{\sigma_2}{2}\eta^2\rho^2,$$

$$\phi_{coul}(\rho) = \frac{\gamma}{2}(\rho(r) - \bar{\rho}) \int \frac{(\rho(r') - \bar{\rho})}{r - r'} dV'.$$

Здесь ϕ_0 — плотность полного термодинамического потенциала высокотемпературной фазы; ϕ_η — плотность термодинамического потенциала низкотемпературной фазы, α , β , D — коэффициенты разложения термодинамического потенциала в ряд по степеням параметра порядка и его производным ($\alpha = \alpha'(T - T_c)$, где T_c — температура фазового перехода в отсутствие допантов, $\alpha' = 1/C$, C — константа Кюри); ϕ_{int} — плотность термодинамического потенциала взаимодействия параметра порядка с электронной системой, σ_1 , σ_2 — константы взаимодействия (член $\sigma_2\eta^2\rho^2$ необходимо вводить только для глобальной стабильности системы [15], $\sigma_2 > 0$, основные физические свойства системы определяются членом взаимодействия с σ_1); ϕ_{coul} — плотность термодинамического потенциала кулоновского взаимодействия, который определяет поведение

электронной системы (полагаем, что это наиболее сильное взаимодействие, возникающее при появлении неоднородного зарядового состояния), $\bar{\rho}$ — средняя концентрация заряда (вклад в ϕ от $\bar{\rho}$ в высокотемпературной фазе учтен в ϕ_0), $\gamma = 1/\epsilon$, где ϵ — диэлектрическая постоянная.

Особого рассмотрения требует вопрос о связи параметра порядка с плотностью заряда. Следует отметить, что в литературе имеется несколько различных подходов к этой проблеме. В частности, в работе [18] Жамей, Кивелсон и Спивак предложили линейную связь параметра порядка с плотностью заряда для описания фазового перехода первого рода в фазу вигнеровского кристалла в низкоразмерных системах. Такая связь возможна лишь в случае фазовых переходов первого рода, когда параметр порядка является настоящим скаляром. В работе [19] была предложена линейная связь плотности заряда с квадратом параметра порядка для описания фазового расслоения, связанного с упорядочением ян-теллеровских поляронов при переходе первого рода. Такая связь предполагает, что параметр порядка не является настоящим скаляром, в то время как его квадрат преобразуется как скаляр. Формально связь параметра порядка с плотностью заряда можно получить следующим образом. В общем случае критическая температура зависит от концентрации электронов. В рамках микроскопической модели зависимость критической температуры магнитного упорядочения от концентрации носителей возникает вследствие обменного взаимодействия локализованных спинов со спинами электронов [22] или взаимодействия, обусловленного правилом Хунда [6, 21]. В области слабого допирования критическая температура может быть разложена в ряд по плотности заряда. В нашем случае мы учли два первых члена такого разложения. Следует отметить, что несмотря на общность феноменологического подхода, такая связь плотности заряда с параметром порядка невозможна для фазового перехода в сверхпроводящее состояние, поскольку нескомпенсированная плотность заряда автоматически приводит к электрическому полю в объеме образца. В сверхпроводниках в равновесном состоянии электрическое поле равно нулю [23]. Тогда, для такого случая, в соответствующих формулах (1) плотность заряда нужно было бы заменить на среднюю. А это, в свою очередь, делает постановку задачи бессмысленной. Наше феноменологическое описание справедливо для магнитных и структурных фазовых переходов в системах с допированием. В этом случае дополнительные заряды ведут себя как дефекты типа

«случайная температура».

С другой стороны, для различных систем и различных видов взаимодействия энергию электронной системы можно разлагать по степеням параметра порядка. Это можно делать во всех случаях, так как мы находимся вблизи фазового перехода второго рода. Такой подход позволяет определить коэффициенты разложения термодинамического потенциала, исходя из микроскопической теории. В нашем случае, оставаясь в рамках феноменологического подхода, будет более последовательно определять эти коэффициенты исходя из эксперимента — например, по зависимости температуры фазового перехода от уровня допирования. Таким образом, коэффициенты разложения термодинамического потенциала зависят от концентрации заряда ρ , и член $\sigma_1\rho(1 + \rho\sigma_2/\sigma_1)$ определяет изменение локальной температуры фазового перехода за счет влияния электронной системы. Другими словами, влияние электронной системы на фазовый переход проявляется в виде сдвига температуры фазового перехода $T_{c\rho}$, связанного с изменением локальной концентрации заряда ρ :

$$T_{c\rho}(\rho) = T_c - \frac{1}{\alpha'} \left(\sigma_1\rho \left(1 + \frac{\sigma_2}{\sigma_1}\rho \right) \right). \quad (2)$$

Локальная концентрация заряда может отличаться от $\bar{\rho}$ в некоторой области конечных размеров. Выражение для T_c , аналогичное (2), для конкретной системы можно получить на основе микроскопического подхода (см., например, [22]).

Далее мы приводим анализ нашей проблемы для 3D-случая, анализ для 2D-случая приводит к аналогичным результатам. Равновесное состояние системы находим из условий $\partial\phi(\eta, \rho)/\partial\eta = 0$, $\partial\phi(\eta, \rho)/\partial\rho = 0$. Второе из этих условий задает следующую зависимость равновесного значения концентрации заряда $\rho_0(\eta)$ от η :

$$\rho_0(\eta) \approx \bar{\rho} + \frac{\sigma_1}{8\pi\gamma} \left(1 + 2\frac{\sigma_2}{\sigma_1}\bar{\rho} \right) \nabla^2\eta^2 - \frac{\sigma_1^2}{32\pi^2\gamma^2} \left(1 + 2\frac{\sigma_2}{\sigma_1}\bar{\rho} \right) [(\nabla^2\eta^2)^2 + \eta^2\nabla^4\eta^2]. \quad (3)$$

Подставив формулу (3) в (1), получим выражение для плотности термодинамического потенциала $\phi_{\rho_0}(\eta)$ при равновесном значении концентрации заряда $\rho_0(\eta)$:

$$\phi_{\rho_0}(\eta) = \phi_\eta(\eta) + (\sigma_1\bar{\rho} + \sigma_2\bar{\rho}^2)\eta^2 - \frac{(\sigma_1 + 2\sigma_2\bar{\rho})^2}{32\pi\gamma} (\nabla\eta^2)^2 + \frac{(\sigma_1 + 2\sigma_2\bar{\rho})^2\sigma_2}{128\pi^2\gamma^2} \eta^2 (\nabla^2\eta^2)^2. \quad (4)$$

Отрицательный знак перед квадратичной формой с $(\nabla\eta)^2$ (третий член в выражении (4)) указывает на возможную неустойчивость однородного состояния по отношению к неоднородным флуктуациям. Действительно, если перейти в фурье-представление для термодинамического потенциала [19], то можно увидеть, что малые неоднородные флуктуации с малыми волновыми векторами k понижают энергию однородного состояния именно за счет этого члена. Это как раз и означает, что однородное состояние будет неустойчиво относительно неоднородных флуктуаций с малыми k [19]. В результате в системе возникают неоднородные состояния. Их возникновение связано с тем, что системе становится выгодно перевести часть своего объема в низкотемпературную фазу, сконцентрировав при этом часть заряда внутри этой фазы. Выигрыш в энергии за счет образования низкотемпературной фазы превышает проигрыш в энергии за счет кулоновского взаимодействия возникающих зарядовых неоднородностей и проигрыш за счет возникновения межфазных границ. Это связано с достаточно сильным взаимодействием заряда с параметром порядка, приводящим к сильной зависимости эффективной температуры фазового перехода $T_{c\rho}$ от локальной концентрации заряда (2). Из формулы (4) также следует, что величина σ_2 должна быть положительной, для того чтобы система была глобально устойчива относительно неоднородных флуктуаций, иначе рост неоднородных флуктуаций привел бы к бесконечному понижению энергии системы.

Эта неустойчивость приводит к возникновению пространственно-неоднородных решений, наиболее простые из которых, возникающие вблизи границы неоднородных состояний, представляют собой локально центрально-симметричные образования. Мы провели компьютерное моделирование равновесных неоднородных состояний, путем минимизации потенциала (1) в двумерном случае, при этом кулоновское взаимодействие рассматривалось как трехмерное физическое взаимодействие. Минимизация термодинамического потенциала проводилась следующим образом. Свободная энергия определялась на дискретной решетке, а дифференциальные операторы заменялись конечными разностями. Нелокальные в прямом пространстве члены вычислялись с помощью быстрого преобразования Фурье, а минимизация осуществлялась с помощью метода сопряженных градиентов. Такая процедура оказалась крайне эффективной для двумерного случая [24, 25]. Результаты такого моделирования показывают, что вблизи границы раздела фаз

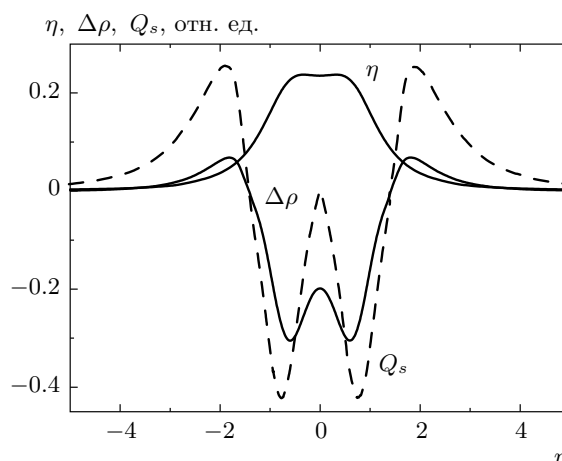


Рис. 1. Распределение параметра порядка $\eta(r)$ и плотности заряда $\Delta\rho(r) = \rho(r) - \bar{\rho}$ вдоль диаметра шара в равновесном неоднородном состоянии, полученном при компьютерном моделировании, Q_s — интегральная концентрация неравновесного заряда на расстоянии r от центра шара ($Q_s = (\Delta\rho(r)S_r)$)

неоднородные состояния всегда имеют центрально-симметричную форму. Другие формы неоднородностей, как правило, возникают далеко от границы, где концентрации симметричной и несимметричной фаз близки [24, 26]. Экстраполяция центрально-симметричного неоднородного решения, полученного при двумерном моделировании, на трехмерный случай, была получена путем пересчета пространственного распределения концентрации заряда с помощью формулы (3). При этом центрально-симметричное распределение параметра порядка бралось из численного моделирования для двумерного случая. Результат такой экстраполяции представлен на рис. 1. Поскольку известно, что центрально-симметричное пространственное распределение параметра порядка и заряда для двумерных и трехмерных систем имеет характерную форму и различается очень незначительно [18], такой пересчет вполне оправдан, потому что в нашем случае важен именно общий вид распределения заряда, для того чтобы иметь возможность определить характер зависимости кулоновской энергии от радиуса неоднородной фазы. Дополнительно представлена зависимость интегральной концентрации заряда Q от расстояния r до центра шара, что позволяет более наглядно представить распределение заряда в пространстве. Как видно на рис. 1, решение имеет вид

шара, внутри которого параметр порядка распределен однородно. Действительно, такое распределение было бы логично ожидать как в двумерном, так и в трехмерном случае, исходя из общезначимых представлений. С одной стороны, любой мобильный ограниченный в пространстве заряд стремится расположиться вблизи поверхности области локализации, чтобы минимизировать потери энергии за счет кулоновского взаимодействия. С другой стороны, внешний заряд стремится экранировать заряженную область по тем же причинам. Шарообразный вид области низкотемпературной фазы обусловлен законами минимизации энергии межфазных границ. Это решение имеет характерные размеры области локализации R_0 и характерную среднюю концентрацию заряда внутри этой области ρ_0 , тогда как средняя концентрация заряда по всей системе равна $\bar{\rho}$. Видно, что заряд концентрируется ближе к поверхности шара, что позволяет использовать для вычисления кулоновского вклада в энергию приближение двойного заряженного слоя. Вдали от шара в системе реализуется однородное равновесное состояние с $\rho = \bar{\rho}$ и $\eta = \eta_s(\bar{\rho})$ (η_s равно 0 или $\eta_0 = -\tilde{\alpha}(\bar{\rho}, T)/\beta$). Нашей целью является определение границ возникновения неоднородных состояний на фазовой диаграмме температура — средняя концентрация заряда. Как отмечалось выше, вблизи границы возникновения неоднородных состояний эти состояния имеют сферическую форму. Необходимо отметить, что вдали от границы, а также в зависимости от анизотропии системы неоднородные состояния могут принимать различные, в том числе и причудливые, формы [18, 19, 24, 26]. Кроме того, особенности экранирования в слоистых системах могут приводить к особенностям геометрии неоднородных состояний [20]. В данной статье не будет рассматриваться эволюция различных неоднородных состояний — сконцентрируемся на определении границы области существования неоднородных состояний. В рассматриваемом случае изотропной системы полагаем, что неоднородная фаза вблизи границы возникновения будет проявляться в виде сферических образований. Это, видимо, является общим правилом как для зародышеобразования, так и для границы возникновения неоднородной фазы, что подтверждается, в частности, результатами работы [26]. Тогда плотность термодинамического потенциала ϕ_s вблизи возникновения неоднородной фазы для такого решения можно представить в виде (здесь мы переходим от ρ к безразмерной переменной x , тогда \bar{x} соответствует уровню допирования нашей системы)

$$\phi_s(R_0, x_0) = \phi_0 - \frac{A(x_0)}{3} R_0^3 + \frac{B(x_0)}{2} R_0^2 + \frac{K(x_0)}{4} R_0^4. \quad (5)$$

Здесь

$$A(x_0) = \frac{\pi(\tilde{\alpha}(x_0, T))^2}{\beta V_0}, \quad B(x_0) \approx \frac{8\pi D(-\tilde{\alpha}(x_0, T))}{d\beta V_0},$$

$$K(x_0) \approx \frac{\gamma e^2 dF(\bar{x} - x_0)^2}{a^6 V_0},$$

$$\tilde{\alpha}(x, T) = \alpha(T) + \sigma_1 x + \sigma_2 x^2,$$

$$F = 4a^6 V_0 \int \phi_{coul}(x) dV / \gamma R_0^4 d(\bar{x} - x_0)^2,$$

F — безразмерный фактор распределения заряда ($F = 1/18$ в предельном случае двойного заряженного слоя), V_0 — элементарный объем, содержащий один шар ($V_0 = V/n$, где n — число шаров), d — ширина межфазной границы. Следует отметить, что такое рассмотрение справедливо, если характерный размер нанодоменов больше, чем характерная длина $\xi = \hbar v / k_B T_{c\rho}(x_0)$, где \hbar — постоянная Планка, k_B — постоянная Больцмана, v — характерная скорость задачи (в случае структурных фазовых переходов это скорость звука, в случае электронных фазовых переходов это скорость Ферми). Это условие достаточно легко достигается при $T_{c\rho}(x_0) > 10$ К. Поскольку при записи выражения энергии кулоновского взаимодействия учтено возникающее сильное экранирование локализованных зарядов, эту энергию можно представить в определенном приближении как энергию двойного заряженного слоя. В этом случае она пропорциональна dR_0^4 , тогда как без учета эффектов экранирования она была бы пропорциональна R_0^5 [7]. Видно, что $A(x_0)$ и $B(x_0)$ зависят от температуры T , а $K(x_0)$ — от средней концентрации заряда \bar{x} . Параметры (\bar{x}, T) являются внешними, и в пространстве этих параметров мы можем построить фазовую диаграмму состояний нашей системы. Так как \bar{x} определяется уровнем допирования, мы получаем информацию о том, как изменяются свойства нашей системы при допировании.

Условия минимума функции $\phi_s(R_0, x_0)$ по R_0 и x_0 и условие, чтобы термодинамический потенциал в минимуме был меньше термодинамического потенциала однородного состояния, $\phi_s < \phi_0$, задают систему уравнений для верхней границы области существования неоднородного состояния:

$$\frac{\partial \phi_s(R_0, x_0)}{\partial R_0} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \phi_s(R_0, x_0)}{\partial x_0} = 0, \quad (7)$$

$$\phi_s - \phi_0 = 0. \quad (8)$$

Уравнение (6) задает выражение для характерного размера области локализации R_0 :

$$R_0 = \frac{A(x_0)}{2K(x_0)} \left(1 + \sqrt{1 - 4 \frac{K(x_0)B(x_0)}{A^2(x_0)}} \right). \quad (9)$$

На верхней границе области пространственно-неоднородных состояний с учетом формулы (8) имеем размер области локализации $R_0 = 2A(x_0)/3K(x_0)$. В результате уравнение (8) дает следующее уравнение для определения x_0 как функции температуры T :

$$\tilde{\alpha}(x_0, T)(\sigma_1 + 2\sigma_2 x_0)^2 + \frac{16\gamma e^2 \beta F D}{\pi a^6} = 0. \quad (10)$$

С помощью соотношений (10) и (7) запишем следующее выражение для верхней границы области существования в пространстве внешних параметров \bar{x}, T (знак « \pm » определяется знаком σ_1):

$$\bar{x} = x_0(T) \pm \left(\frac{\pi a^6}{36\gamma e^2 \beta F D} \right)^{0.5} \times \times \tilde{\alpha}^{1.5}(x_0(T), T) = 0. \quad (11)$$

Эти уравнения определяют температуру T_{ps1} перехода в область устойчивых, неоднородных состояний в пространстве внешних параметров: \bar{x}, T ($T_{ps1} = f_1(\bar{x})$), при этом энергия такого состояния меньше энергии однородного состояния. Аналогичным образом находится нижняя температурная граница $T_{ps2} = f_2(\bar{x})$ области существования неоднородного состояния. Здесь необходимо отметить, что температура $T_{ps2}(\bar{x})$ всегда будет очень близка к температуре $T_{c\rho}(\bar{x})$, так как в этом случае мы не выигрываем, а, напротив, проигрываем в энергии $\phi_\eta(\eta)$ внутри шара с высокотемпературной фазой, поскольку $\phi_\eta(\eta = 0) \equiv 0$, а $\phi_\eta(\eta_0) < 0$. В этом заключается существенная разница при образовании шара с низкотемпературной фазой в высокотемпературной области по отношению к образованию шара с высокотемпературной фазой в низкотемпературной области. Первый из них энергетически более выгоден, поэтому область существования такого состояния существенно больше. Важно отметить, что уравнения (10) и (11), определяющие фазовую диаграмму системы, не зависят от ширины межфазной границы d , что позволяет не заботиться об оптимизации нашего анализа по отношению к d . Типичная

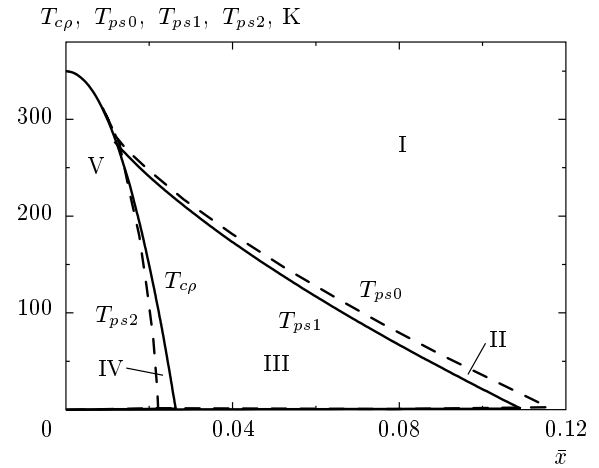


Рис. 2. Фазовая диаграмма системы с неоднородными состояниями (для случая $T_c = 350$ К, $\sigma_1/\alpha' = 50$ К, $\sigma_2/\alpha' = 5 \cdot 10^5$ К, $\gamma e^2 \beta F D / \pi a^6 \alpha'^3 = 2.33 T_c^3$): I — область однородной высокотемпературной фазы, II — область стабильной высокотемпературной фазы и метастабильных стационарных неоднородностей низкотемпературной фазы, III — область стабильной неоднородной фазы и метастабильной высокотемпературной фазы, IV — область стабильной неоднородной фазы и метастабильной низкотемпературной фазы, V — область однородной низкотемпературной фазы

фазовая диаграмма области существования неоднородного состояния для случая $\sigma_1 > 0$ представлена на рис. 2. Фазовый переход в неоднородное состояние представляет собой типичный фазовый переход первого рода. Метастабильная неоднородная фаза возникает при температуре T_{ps0} задолго до температуры фазового перехода, что показано на фазовой диаграмме штриховой линией (находится из условий (6), (7) и $A^2(x_0) = 4K(x_0, \bar{x})B(x_0, \bar{x})$ вместо (8), при этом размер области будет $R_0 = A(x_0)/2K(x_0, \bar{x})$).

Следует отметить следующую особенность нашей системы. Зарядовые неоднородности возникают в системе на размерах порядка длины эффективного экранирования свободными зарядами. Однако эта длина эффективного экранирования во многом определяется самосогласованным изменением в пространстве параметра порядка и плотности заряда. Поэтому именно характерные размеры изменения параметра порядка во многом определяют длину экранирования. Другими словами, самоорганизованное состояние зарядового и фазового расслоений устроено таким образом, что потенциал, возникающий вследствие неоднородного распределения заряда, компенсируется эффективным потенциалом, ко-

торый возникает при неоднородном распределении параметра порядка вследствие взаимодействия заряда с параметром порядка. По этим же причинам, несмотря на наличие нескомпенсированного заряда, тока в системе не возникает.

Иногда для кулоновской энергии дают оценку $e^2/a \approx 4$ эВ, что соответствует двум элементарным зарядам, локализованным в ближайших ячейках. Однако в нашем случае для фазового разделения достаточно относительно небольшого изменения заряда на элементарную ячейку по сравнению со средней концентрацией, $a^3(\rho_0 - \bar{\rho}) \approx 0.1-0.2e$. Поэтому можно получить следующие оценки как для потери энергии за счет кулоновского вклада u_ρ , так и для выигрыша энергии за счет вклада упорядоченной фазы u_η (соответственно четвертый и второй члены в выражении (5)) на одну элементарную ячейку внутри шара неоднородной фазы ($u_i = |\phi_i| a^3 V_0 \cdot 3/4\pi R_0^3$ и будем считать, что d мало и поэтому поверхностный член в формуле (5) мал). Для кулоновского вклада имеем

$$u_\rho = \left(\frac{3e^2(x_0 - \bar{x})^2}{4\pi\epsilon a} \right) \frac{dR_0}{a^2} F. \quad (12)$$

Величина в скобке имеет порядок $u_0 = 0.0003-0.001$ эВ (мы взяли $\epsilon = 30-40$, что верно для манганитов и слабодопированных сверхпроводников). Увеличение размера шара будет увеличивать энергию u_ρ на порядок и больше по сравнению с u_0 , но, с другой стороны, фактор формы F уменьшает u_ρ ($F = 1/18$ в предельном случае двойного заряженного слоя). Поэтому u_ρ можно оценить как 0.01 эВ. Соответственно, для выигрыша в энергии имеем $u_\eta \approx 3kT$ ($u_\eta \approx a^3(\tilde{\alpha}(x_0, T=0))^2/\beta \approx a^3 T_c \eta_0^2(x_0, T=0)/C$, $C = k/3N_A \eta_0^2(T=0)$, где N_A — число Авогадро), что имеет порядок величин 0.03–0.1 эВ, поэтому в нашем случае фазовое расслоение становится возможным. При этом размер возникающих нанобластей можно оценить как $R_0 \approx 1-20$ нм.

Анализ парной корреляционной функции, полученной из нейтронных исследований манганитов, показал, что в лантан-стронциевых манганитах плотность допирующих дырок распространяется более чем на три атома Mn, даже когда они локализованы в виде поляронов [5, 12]. Это означает, что дырки локализованы не в отдельные поляроны, а имеется некоторая плотность дырок на масштабе нанобласти, при этом дополнительный заряд на элементарную ячейку не может быть больше $0.1 - 0.2e$, что согласуется с нашими оценками. Можно характеризовать такие состояния как состояния с наноразмерными зарядовыми неоднородностями взаимосвязан-

ными с фазовым расслоением. Динамика таких заряженных нанобластей может приводить к высоким значениям диэлектрической проницаемости в низкочастотной области [11].

Таким образом, в работе показано, что фазовый переход второго рода с критической температурой, обращающейся в нуль при некоторой концентрации допанта (квантовая критическая точка), нестабилен по отношению к образованию пространственно-неоднородных зарядовых состояний. В рамках феноменологической теории показано, что такие состояния возникают при некоторой температуре T_{ps1} , которая может быть значительно выше температуры $T_{c\rho}$ (см. рис. 2). При этом фазовый переход в неоднородное состояние является фазовым переходом первого рода. В этой связи следует отметить, что именно дальнедействующее кулоновское взаимодействие определяет характер фазового перехода. Именно кулоновское взаимодействие определяет распределение заряда, экранирование и характерные размеры возникающих состояний. Возникновение пространственно-неоднородной фазы становится возможным при относительно малом пространственном изменении плотности заряда в системах с относительно большой диэлектрической постоянной (30–40). Неоднородные зарядовые состояния рассматривались для случая фазовых переходов первого рода [18, 19], но в том случае они были связаны с наличием двухъямного потенциала в области гистерезиса фазового перехода. В нашем случае возможность неоднородных состояний связана с перераспределением заряда в пространстве.

В заключение отметим, что локализованные зарядовые неоднородности и фазовое расслоение возникают даже при фазовом переходе второго рода. Особенности таких состояний описаны в рамках феноменологической теории фазовых переходов. Кулоновское взаимодействие определяет распределение заряда, экранирование и размер возникающих состояний. Фазовое расслоение, взаимосвязанное с образованием зарядовых неоднородностей, становится возможным из-за больших значений диэлектрической проницаемости и малой плотности дополнительного заряда в области локализации. Построена фазовая диаграмма системы и сделаны оценки выигрыша в энергии такого состояния.

Авторы благодарны А. С. Александрову, А. П. Леванюку, Б. З. Малкину, Д. Михайловичу и Г. Б. Тейтельбауму за плодотворное обсуждение результатов и полезные замечания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 05-02-17182), Словенско-Российской научно-технической кооперации, а также гранта Adfuturа (Словения). Работа Т. С. Ш. поддержана РФФИ (грант № 07-02-01184).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Jin, T. H. Tiefel, M. McCormack, R. A. Fastnacht, R. Ramesh, and L. H. Chen, *Science* **264**, 413 (1994).
2. Y. Tokura, and N. Nagaosa, *Science* **288**, 462 (2000).
3. A. J. Millis, P. B. Littlewood, and B. I. Shraiman, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 5144 (1995).
4. E. L. Nagaev, *Phys. Rev. B* **60**, R6984 (1999).
5. E. Dagotto, T. Hotta, and A. Moreo, *Phys. Rep.* **344**, 1 (2001).
6. М. Ю. Каган, К. И. Кугель, *УФН* **171**, 577 (2001).
7. Л. П. Горьков, А. В. Сокол, *Письма в ЖЭТФ* **46**, 420 (1987); L. P. Gorkov, *J. Supercond.* **14**, 365, (2001).
8. V. J. Emery, S. A. Kivelson, and O. Zachar, *Phys. Rev. B* **56**, 6120 (1997).
9. T. Egami and S. J. L. Bellinge, in: *Physical Properties of High-Temperature Superconductors V*, ed. by D. M. Ginsberg, World Scientific, Singapour (1996), p. 265.
10. L. P. Gorkov and G. B. Teitel'baum, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 247003 (2006).
11. R. F. Mamin, T. Egami, Z. Marton, and S. A. Migahev, *Phys. Rev. B* **75**, 115129 (2007); Р. Ф. Мамин, Т. Игами, Ж. Мартон и др., *Письма в ЖЭТФ* **86**, 731 (2007).
12. D. Louca, T. Egami, E. L. Brosha et al., *Phys. Rev. B* **56**, R8475 (1997).
13. *Phase Separation in Cuprate Superconductors*, ed. by E. Sigmund and K. A. Muller, Springer-Verlag, Berlin (1993).
14. V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Physica C* **209**, 597 (1993).
15. O. Zachar, V. J. Emery, and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. B* **57**, 1422 (1998).
16. B. Spivak, *Phys. Rev. B* **67**, 125205 (2003); B. Spivak and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. B* **70**, 155114 (2004).
17. C. B. Muratov, *Phys. Rev. E* **66**, 066108 (2002).
18. R. Jamei, S. A. Kivelson, and B. Spivak, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 056805 (2005); J. Lorenzana, C. Castellani, and C. Di Castro, *Phys. Rev. B* **64**, 235127 (2001); C. Ortix, J. Lorenzana, and C. Di Castro, *Phys. Rev. B* **73**, 245117 (2007); C. Ortix, J. Lorenzana, M. Beccaria, and C. Di Castro, *Phys. Rev. B* **75**, 195107 (2007).
19. T. Mertlj, V. V. Kabanov, J. Miranda, and D. Mihailovic, *Phys. Rev. B* **76**, 054523 (2007); T. Mertlj, V. V. Kabanov, and D. Mihailovic, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 147003 (2005).
20. B. Fine and T. Egami, *Phys. Rev. B* **77**, 014519 (2008).
21. K. I. Kugel, A. L. Rakhmanov, and A. O. Sboychakov, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 267210 (2005).
22. Л. И. Глазман, А. С. Иоселевич, *Письма в ЖЭТФ* **49**, 503 (1989); **47**, 464 (1988).
23. Л. П. Горьков, Н. Б. Копнин, *УФН* **116**, 413 (1975).
24. J. Miranda and V. V. Kabanov, *Physica C* **468**, 358 (2008).
25. T. Mertelj and V. V. Kabanov, *Phys. Rev. B* **67**, 134527 (2003).
26. C. Ortix, J. Lorenzana, and C. Di Castro, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 246402 (2008).