

атомами типа A или B происходит равновероятно (вероятности $P_A = P_B$), что соответствует неупорядоченному состоянию. Ниже критич. темп-ры $P_A \neq P_B$, что соответствует упорядоченному состоянию. При этом возникает сверхструктура, характеризующаяся скалярным параметром порядка $|P_A - P_B| / (P_A + P_B)$ и волновым вектором $k \neq 0$ [4]. Аналогично может быть описано упорядочение в некоторых фазах внедрения, напр. упорядоченное распределение водорода или дейтерия по междоузлиям Nb и Ta в гидридах Nb—H (D) и Ta—H (D).

Более сложный (трёхкомпонентный векторный) параметр порядка необходим для описания С. ф. п. типа смещения в сверхпроводящих *интерметаллических соединениях* Nb₃Sn и V₃Si (пространственная группа симметрии O_h^3), а также в HfV₂ и ZrV₂, находящихся в т. н. фазе Лавеса (пространственная группа симметрии O_h^4). В первом случае кристалл переходит из простой кубич. решётки в тетрагональную (изменение симметрии $O_h^3 \rightarrow D_{4h}$), а во втором — в орторомбическую или ромбоэдрическую (изменение симметрии $O_h^4 \rightarrow D_{2h}^8$ или D_{3d}^5). В обоих случаях элементарная ячейка сохраняется, т. е. $k = 0$. В сегнетоэлектриках BaTiO₃ и SrTiO₃ С. ф. п. происходят посредством смещения ионов относительно октаэдра O_6 или посредством поворота этого октаэдра.

Образование доменов. Особенностью С. ф. п. по темп-ре является образование доменов в кристалле при $T < T_c$. Поскольку температурное воздействие является скалярным, т. е. не имеет направленности (в отличие, напр., от воздействия механического), то в соответствии с *Кюри принципом* точечная симметрия кристалла не должна изменяться. Это и приводит к появлению доменной структуры (см. *Домены*). Симметрия в пределах каждого домена ниже симметрии исходного кристалла, однако расположение доменов определяется элементами симметрии, утраченными при переходе (в простейшем случае образуются т. н. антифазные домены). При образовании доменов в реальном кристалле существенны энергетич. факторы, граничные условия, дефекты и т. п. [5].

Каждый домен должен отличаться от остальных значением тензора деформации, описывающим спонтанную деформацию исходной элементарной ячейки. Внеш. давление снимает вырождение по энергии у доменов и делает энергетически выгодным один из них; при этом фазовая диаграмма кристалла становится более сложной. Напр., в тетрагонально деформированном кристалле при одноосном напряжении изменяется род фазового перехода со 2-го на 1-й и на фазовой диаграмме появляется *трикритическая точка*. Фазовые диаграммы С. ф. п., содержащие *поликритические точки*, характерны для многих кристаллов, напр. кристаллов типа перовскитов KMnF₃, CsPbVg₃ и кристаллов типа MnAs, допускающих неск. последовательных С. ф. п., а также *магнитные фазовые переходы*.

Количественное описание С. ф. п. даётся обычно на основе *Ландау теории* фазовых переходов с дальнейшими уточнениями (напр., учётом флуктуаций параметра порядка). Применяется также приближённое вычисление статистич. суммы кристалла, напр. при описании упорядочивающихся сплавов приближением Брэгга—Вильямса (см. *Среднего поля приближение*), Кирквуда и др. [6] (см. *Корреляционная функция*).

В основе микроскопич. описания С. ф. п. лежит простой квазиклассич. гамильтониан [6, 7], описывающий динамически неустойчивую решётку как набор связанных ангармонич. осцилляторов [6, 7]:

$$\mathcal{H} = \sum_l \frac{p_l^2}{2M} + \sum_l \left\{ \frac{A}{2} u_l^2 + \frac{B}{4} u_l^4 \right\} + \frac{C}{2} \sum_{ll'} (u_l - u_{l'})^2.$$

Такой гамильтониан моделирует кристалл с 2 подрешётками, в к-ром атомы одной из них (жёстко фиксированной) создают характерный двухъямный потенциал для подвижных атомов др. подрешётки (см. рис.). Здесь u_l , p_l (в одномерном случае — скалярные величины) — смещение и импульс атома массы M , расположенного в l -м узле кристаллич. решётки; коэф. $A \neq 0$, B и $C > 0$. Коэф. A харак-



Конфигурационная потенциальная энергия атомов «подвижной» подрешётки в поле атомов «неподвижной» подрешётки (одномерный случай).

теризует модуль упругого сжатия, коэф. B — ангармонизм решётки, C — взаимодействие между атомами в соседних узлах l, l' .

В системе, описываемой гамильтонианом \mathcal{H} , при $T_c \neq 0$ происходит фазовый переход в упорядоченное состояние с конечным ср. смещением $\bar{u}_l \neq 0$. Возможны 2 предельных случая, соответствующие переходам типа смещения и типа порядок — беспорядок. Если при низких темп-рах все подвижные атомы расположены на дне левой потенциальной ямы, то с ростом T возможна реализация одного из двух случаев: в первом наиб. вероятное положение подвижных атомов соответствует вершине потенциального барьера (переход типа смещения), во втором — дну потенциальной ямы, в результате чего левая и правая ямы заполнены равновероятно (переход порядок — беспорядок). Параметром, различающим эти 2 случая, является отношение $\xi = \delta_0 / \delta_c$, где $\delta_0 = A^2 / 4B$ характеризует глубину ямы (высоту барьера), $\delta_c = 4C |A| / B$ — энергию взаимодействия атомов в разл. ямах на соседних узлах (минимумы двухъямного потенциала соответствуют смещениям $\pm u_0 = \pm \sqrt{|A| / B}$).

При $\xi \gg 1$, $A < 0$ (предельный случай перехода порядок — беспорядок) каждый подвижный атом локализован вблизи дна ямы при всех T , кроме $T \gg T_c$. Т. о., в гармонич. приближении все колебания атомов вблизи высокотемпературного положения равновесия (вершины барьера) неустойчивы; в этом случае осн. динамич. процессы — прыжковые за счёт туннелирования атомов между соседними ямами в одном узле. Такая ситуация может быть описана с помощью эфф. *спинового гамильтониана* [2, 3], а при высоких темп-рах — моделью, соответствующей взаимодействующим ангармонич. осцилляторам. При $\xi \ll 1$, $A > 0$ (предельный случай перехода типа смещения) неустойчивой оказывается небольшая часть длинноволновых колебаний вблизи высокотемпературного положения равновесия; ниже T_c происходит «замораживание» мягкой фононной моды. В одномерном случае гамильтониан допускает возможность точных решений ур-ний динамики, к-рые обнаруживают 2 типа элементарных возбуждений в системе: *фононы* с малой амплитудой колебаний и *солитоны* (доменные стенки) — с большой [6] (см. также *Точно решаемые модели* в статистич. физике).

Одномерный гамильтониан применим, напр., для описания упорядочения протонов в соединениях с водородными связями (KN₂PO₄, биополимеров и др.). Для реальных трёхмерных кристаллов следует учитывать анизотропию энергии межатомного взаимодействия U_c , обладающую не двумя, а большим числом локальных минимумов разл. глубины. Существен также учёт взаимодействия решётки с электронной подсистемой (особенно в металлах) и спиновой (в магнетиках) [6]. Напр., в фононном спектре некоторых переходных металлов и сплавов возможно «смягчение» фононов с волновым вектором $2k_F$, где $\hbar k_F$ — импульс Ферми (коновская особенность). С др. стороны, *электрон-фононное взаимодействие* может приводить к т. н. пайерловской неустойчивости (см. *Пайерловский переход*) и связанному с ней С. ф. п. — спонтанному искажению решётки с волновым вектором $2k_F$. При этом в электронном спектре возникает щель (см. *Переход металл — диэлектрик*), а распределение заряда описывается *волной зарядовой плотности*. Аналогично сильное спин-решётчное взаимодействие в некоторых сплавах переходных и редкоземельных металлов (*гигантская магнитострикция*) также приводит к С. ф. п.