СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р17 - 10743

С.Стаменкович, Н.М.Плакида, В.Л.Аксенов, Т.Шиклош

ОБОБЩЕННАЯ ТЕОРИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ
КВАНТОВЫЙ СЛУЧАЙ

1977

P17 - 10743

С.Стаменкович[1], Н.М.Плакида, В.Л.Аксенов, Т.Шиклош[2]

ОБОБЩЕННАЯ ТЕОРИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ. КВАНТОВЫЙ СЛУЧАЙ

[1] Институт ядерных наук им. Бориса Кидрича, Белград.
[2] Центральный институт физических исследований, Будапешт.

Стаменкович С. и др. P14 10743

Обобщенная теория сегнетоэлектриков. Квантовый случай

В рамках обобщенной теории сегнетоэлектриков исследован фазовый переход типа смещения в квантовом предельном случае нулевой температуры, когда фазовый переход определяется энергией нулевых колебаний. Получены оценки для критического значения энергии нулевых колебаний - без учета эффекта туннелирования - для предельных случаев полностью упорядоченной и полностью разупорядоченной решеток.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Stamenkovich S. et al. P17 10743

Unified Model of Ferroelectrics. Quantum Case

A phase transition of displacement type ferroelectrics in a quantum limiting case at zero temperature is investigated on the basis of the unified model of ferroelectrics. In this case the phase transition is determined by zero-point vibration energy. The critical values for it are obtained in both limiting cases of the order and disorder lattice. The tunneling motion of active atoms is not considered.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

В работе /1/ была предложена обобщенная модель сегнетоэлектрического фазового перехода, учитывающая как статистическое разупорядочение ионов по ячейкам, так и динамическую неустойчивость колебаний решетки, приводящих к переходам типа смещения. Решение самосогласованной системы уравнений для двух параметров порядка: $\sigma_\alpha = \langle \sigma_i^\alpha \rangle$ - среднего числа ионов в состоянии $\alpha = \pm 1$ и $\vec{b}_\alpha = \langle \vec{\xi}_i^\alpha \rangle$ - среднего смещения ионов в ячейке в состоянии α -было проведено в /1/ и последующей работе /2/ в классическом предельном случае высоких температур, $kT \gg \hbar \omega_b$. Представляет также интерес рассмотрение квантового предельного случая нулевой температуры, когда фазовый переход определяется квантовыми флюктуациями и обусловлен энергией нулевых колебаний, а не тепловыми возбуждениями. Переход типа смещения в модели сегнетоэлектрика в квантовом случае был рассмотрен в работе /3/.

I. Самосогласованная система уравнений

Модель сегнетоэлектрика /1/ описывается системой гармонически связанных ионов, каждый из которых может находиться в одном из двух минимумов ($\alpha = \pm 1$) одночастичной потенциальной ямы:

$$H = \sum_{i,\alpha} \sigma_i^\alpha \left[\frac{1}{2m} (\vec{p}_i^\alpha)^2 - \frac{A}{2} (\vec{s}_i^\alpha)^2 + \frac{B}{4} (\vec{s}_i^\alpha)^4 \right] + $$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{\alpha,\beta} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\beta \varphi_{ij} \frac{1}{2} (\vec{s}_i^\alpha - \vec{s}_j^\beta)^2 , \qquad (I)$$

где операторы проектирования $\sigma_i^+ = 1$ или 0 ($\sigma_i^- = 1 - \sigma_i^+ = 0$ или I, соответственно), если в узле i ион находится в положении $\alpha = +1$ или $\alpha = -1$. $\vec{p}_i^\alpha$ и $\vec{s}_i^\alpha$ – импульс и координата иона, A и B – параметры одночастичной ямы и φ_{ij} – константа взаимодействия ионов в трехмерной решетке.

Из условий равновесия $d\langle \vec{p}_i^\alpha(t) \rangle / dt = 0$ в /I/ было получено уравнение

$$\eta_\alpha^3 - (1 - 3y_\alpha)\eta_\alpha + (\eta_+ + \eta_-) f_0 \sigma_{-\alpha} = 0 , \qquad (2)$$

связывающее равновесные положения ионов $\eta_\alpha = \sqrt{\frac{B}{A}} \langle s_i^\alpha \rangle$ и среднее число ионов $\sigma_\alpha = \langle \sigma_i^\alpha \rangle$ в положении α. Безразмерная константа связи $f_0 = \sum_j \varphi_{ij} / A = \varphi_0 / A$.

Среднеквадратичные смещения ионов в положении α определялись с помощью фононной функции Грина (ФГ) в виде:

$$y_\alpha = \frac{B}{A} \langle (u_i^\alpha)^2 \rangle = \frac{B}{NA^2} \sum_q \int_0^\infty d\omega \, cth \frac{\omega}{2\theta} \left[-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} D_q^\alpha (\omega + i\varepsilon) \right], \qquad (3)$$

$$D_q^\alpha(\nu) = \frac{\nu^2 - (\Delta_{-\alpha}^2 + f_0)}{(\nu^2 - \nu_{q+}^2)(\nu^2 - \nu_{q-}^2) - \sigma_+ \sigma_- f_q^2} = \frac{\nu^2 - (\Delta_{-\alpha}^2 + f_0)}{(\nu^2 - \nu_{q1}^2)(\nu^2 - \nu_{q2}^2)} , \qquad (4)$$

где $\nu^2 = \omega^2 / (A/m)$; $\nu_{q\alpha}^2 = \Delta_\alpha^2 + (f_0 - \sigma_\alpha f_q)$; $\Delta_\alpha^2 = -1 + 3(y_\alpha + \eta_\alpha^2)$;
$f_q = \frac{1}{A} \sum_j \varphi_{ij} e^{i\vec{q}(l_i - l_j)}$; $\nu_{q(1,2)}^2 = \frac{1}{2} \left\{ (\nu_{q+}^2 + \nu_{q-}^2) \pm \sqrt{(\nu_{q+}^2 - \nu_{q-}^2)^2 + 4\sigma_+ \sigma_- f_q^2} \right\}$.

Выполняя интегрирование в (3) при нулевой температуре, когда $cth \frac{\omega}{2\theta} = 1$, с учетом (4) получаем:

$$y_\alpha = \frac{\lambda}{N} \sum_q \frac{1}{2(\nu_{q1} + \nu_{q2})} \left(1 + \frac{\Delta_{-\alpha}^2 + f_0}{\nu_{q1} \nu_{q2}} \right) , \qquad (5)$$

$\lambda = \frac{\sqrt{A/M}}{A^2/B}$ – квантовый параметр, отношение энергии нулевых колебаний $\hbar\omega_0 = \sqrt{A/M}$ к высоте барьера в одночастичном потенциале $U_0 = A^2/4B$.

Для определения средних чисел заполнения σ_α или квазиспиновой переменной $\sigma = \langle s_i^z \rangle = (2\sigma^+ - 1) = 1 - 2\sigma^-$ был введен эффективный квазиспиновый гамильтониан

$$\tilde{H}_s = \sum_i h_i s_i^z - \frac{1}{2} \sum_{ij} \tilde{J}_{ij} s_i^z s_j^z , \qquad (6)$$

где $\hat{S}_i^z = \pm 1$, h_i и $\tilde{J}_{ij}$ – эффективное среднее поле и "обменная энергия", зависящие от состояний фононной подсистемы /I/.

В гамильтониане (I), (6) не учитываются эффекты туннелирования между состояниями $\alpha = \pm 1$ и поэтому при $\theta \to 0$ возникает единственное решение: $\sigma = 1$ (при $\tilde{J}_{ij} > 0$, $h_i \geq 0$). Учет эффектов туннелирования, предложенный в работе /4/, позволяет обобщить гамильтониан (I) и ввести в (6) поперечное поле $\Omega \sum_i s_i^x$, которое может приводить к решениям $\sigma \to 0$ и при $\theta \to 0$. В настоящей работе мы не будем обсуждать полное решение самосогласованной системы уравнений для фононной и квазиспиновой систем для промежуточных значений $0 < \sigma < 1$, а рассмотрим лишь два предельных случая полностью упорядоченной, $\sigma = 1$, и полностью разупорядоченной , $\sigma = 0$, решеток, предполагая, что соответствующий выбор величины поперечного поля Ω может обеспечить переход от $\sigma = 1$ к $\sigma = 0$ при нулевой температуре, $\theta = 0$.

2. Переход типа смещения в упорядоченной решетке

В полностью упорядоченной решетке все ионы находятся в одном положении, например $\alpha = +1$ и $\sigma = 1$. В этом случае уравнение самосогласования (5) принимает вид

$$y_+ = \frac{\lambda}{2N} \sum_q \frac{1}{\sqrt{\Delta_+^2 + f_0 - f_q}} = \frac{\lambda}{2} \int_0^{\omega_D} \frac{g(\omega^2)\, d\omega^2}{\sqrt{\Delta_+^2 + \omega^2}}, \quad (7)$$

где введена плотность фононных частот:

$$g(\omega^2) = \frac{1}{N} \sum_q \delta(f_0 - f_q - \omega^2), \quad \omega < \omega_D. \quad (8)$$

Учитывая условия равновесия (2) при $\sigma = 1$ $(\sigma_- = 0)$, получаем одно уравнение для самосогласованного определения равновесного смещения η или щели в спектре частот $\Delta_+^2 = 2\eta^2$ в сегнетофазе:

$$\eta^2 = 1 - \frac{3\lambda}{2} \int_0^{\omega_D} \frac{g(\omega^2)\, d\omega^2}{\sqrt{2\eta^2 + \omega^2}}. \quad (9)$$

Как видно, решение этого уравнения для сегнетофазы с $\eta \neq 0$ существует лишь при $\lambda < \lambda_{c(1)}$, где критическое значение $\lambda_{c(1)}$ определяется в виде:

$$\lambda_{c(1)} = \frac{2}{3} \left[\int_0^{\omega_D} \frac{g(\omega^2)\, d\omega^2}{\omega} \right]^{-1} \equiv \frac{2}{3} \frac{\sqrt{f_0}}{\mu_{-1}}, \quad (10)$$

где $\mu_{-1} = \overline{\omega^{-1}}$ - среднее значение обратной частоты, для дебаевского спектра $g(\omega^2) = 3\omega/2\omega_D^3$, $\mu_{-1} = \frac{3}{2\sqrt{2}} \approx 1$ при $\omega_D^2 = 2f_0$. Таким образом, переход типа смещения может произойти в упорядоченной решетке только для решетки из достаточно тяжелых ионов,

$$M > \left(\frac{2}{3} \frac{\sqrt{\varphi_0}}{\mu_{-1}} \frac{A}{B} \right)^{-2} \quad (11)$$

при заданной величине связи ионов в решетке φ_0 и ширине одночастичной ямы $S_0 = \sqrt{A/B}$ в соответствии с работой /3/.

3. Переход типа смещения в неупорядоченной решетке

Обсудим влияние неупорядоченности в решетке на переход типа смещения. Полагая в уравнениях (2) и (5) $\sigma = 0$, что соответствует одинаковому числу ионов в положениях $\alpha = +1$ и $\alpha = -1$, и следовательно, $\Delta_+^2 = \Delta_-^2 = \Delta_0^2$, $\eta_+ = \eta_- = \eta$, получаем систему уравнений:

$$\eta^2 = 1 + f_0 - 3y, \quad (12)$$

$$y = \frac{\lambda}{2} \int_0^{\omega_D} \frac{g(\omega^2)\, d\omega^2}{\sqrt{\Delta_0^2 + \omega^2}}. \quad (13)$$

В результате самосогласованное уравнение для определения щели $\Delta^2 > 0$ в спектре фононов при $\sigma = 0$ и $\eta > 0$ принимает вид:

$$\Delta_0^2 = 2\eta^2 - f_0 = 2 - 3f_0 - 3\lambda \int_0^{\omega_D} \frac{g(\omega^2)\, d\omega^2}{\sqrt{\Delta_0^2 + \omega^2}}. \quad (14)$$

Фазовый переход типа смещения, $\eta > 0$, возможен при $\lambda < \lambda_{c(0)}$, где критическое значение параметра определяется из условия $\Delta_0^2(\lambda_{c(0)}) = 0$:

$$\lambda_{c(0)} = \frac{2}{3} \frac{\sqrt{f_0}}{\mu_{-1}} \left(1 - \frac{3}{2} f_0\right) = \lambda_{c(1)} \left(1 - \frac{3}{2} f_0\right). \quad (15)$$

Следовательно, появление неупорядоченности в решетке понижает предельно допустимое значение энергии нулевых колебаний, как и предельное значение температуры фазового перехода в классическом пределе высоких температур: $T_c^{(0)} = T_c^{(1)} [1 - 3f_0/2]$ /1/. Следует однако отметить, что переход в состояние с $\sigma = 0$ может возникнуть лишь при $f_0 \ll 1$ и поэтому формула (15) верна лишь при $f_0 \ll 1$. В случае $f_0 \gg 1$, в соответствии с /1/, возможно лишь состояние с $\sigma = 1$, когда справедлива формула (10).

Явный учет эффектов туннелирования и оценка предельного значения квантового параметра λ в этом случае будут сделаны в отдельной работе.

Литература:

1. S.Stamenković, N.M.Plakida, V.L.Aksienov and T.Siklós. Phys.Rev., B14, 5080, 1976.
2. В.Л.Аксенов, Х.Бретер, Я.М.Ковальски, Н.М.Плакида, В.Б.Приезжев, ФТТ 18, 2920, 1976.
3. T.R.Koehler and N.S.Gillis. Phys.Rev. B7, 4980, 1973.
4. S.Stamenković, N.M.Plakida, V.L.Aksienov and T.Siklós. Report KFKI-77-4, Budapest, 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 июня 1977 года.