сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-80-576

В.Л.Аксенов, В.А.Загребнов, Н.М.Плакида,
С.Стаменкович *

НЕЛИНЕЙНЫЕ ЭФФЕКТЫ И МЯГКИЕ ФОНОНЫ ПРИ СТРУКТУРНОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ

* Институт ядерных наук им. Б.Кидрича, Белград, СФРЮ.

1980

1. ВВЕДЕНИЕ

Основные черты структурных фазовых переходов могут быть описаны на основе модели связанных ангармонических осцилляторов:

$$H = \sum_i \left[\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} + U(\vec{s}_i) \right] + \sum_{ij} V(\vec{s}_i - \vec{s}_j), \qquad /1/$$

где $V(\vec{s}_i - \vec{s}_j)$ - энергия парного взаимодействия, быстро спадающего с расстоянием между частицами, а $U(\vec{s}_i)$ - одночастичный потенциал, имеющий два или более минимумов. Полная координата частицы $\vec{s}_i$ может быть представлена в виде

$$\vec{s}_i = \vec{r}_i + \vec{u}_i, \qquad /2/$$

где $\vec{r}_i$ - равновесные положения в одном из минимумов потенциала U, а $\vec{u}_i$ - амплитуда малых колебаний относительно этих положений равновесия. Представление /2/ было введено в работе /1/, где было показано, что в случае сильного ангармонизма $V \ll U$ /переход типа порядок-беспорядок/ нелинейная модель /1/ принадлежит изинговскому универсальному классу. Исследования последних лет /см. /2-6/ и цитированную там литературу/ показали, что то же самое можно сказать о модели /1/ и в случае слабого ангармонизма $V \gg U$/переход типа смещения/. В этом случае в критической области система разбивается на кластеры, переходя в режим релаксационной динамики. Встает вопрос, как с точки зрения динамики решетки описать спектр возбуждений в системе /1/ при переходе типа смещения. В качестве исходного приближения можно использовать приближение разделения координаты /2/. Вдали от критической точки такое приближение позволяет описать как фононные возбуждения с малой амплитудой колебаний, так и возбуждения, описывающие движение границы кластеров /7-9/. Однако в критической области амплитуда колебаний частиц становится сравнимой с амплитудой внутриямных перескоков и единое описание обоих этих типов возбуждений становится проблематичным.

В настоящей работе для d-мерной модели исследуется возможность образования кластеров и их влияние на фононы при структурном переходе. Анализ условий термодинамического равновесия показывает, что в системе типа смещения в результате ее нелинейных свойств, возможно возникновение неустойчивости по отношению к образованию кластеров различной поляризации. Помимо обычных фононов, характеризующих быстрые движения, частицы, возникают нелинейные возбуждения солитонного типа, характеризующие медленные движения. Учет флуктуаций фононов приводит к уменьшению амплитуды солитона и увеличению его ширины. Исследование функции распределения равновесных положений частицы методом ренормализационной группы показывает, что она в критической точке при $d<4$ имеет негауссовский характер. При этом резонансная динамика подавляется и мягкая мода не обращается в ноль в точке перехода, а в спектре возбуждений появляется центральный пик, обусловленный релаксационной динамикой кластеров. Такое критическое поведение системы указывает на справедливость приближения /2/ во всей области температур. Полученная картина фазового перехода, по-видимому, соответствует экспериментальной в $SrTiO_3$ [4].

2. РАВНОВЕСНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ И ФОНОНЫ

Равновесные положения $\vec{r}_i$, относительно которых происходят малые колебания с амплитудой $\vec{u}_i$, определим как среднее по колебаниям решетки /фононам/:

$$\vec{r}_i \equiv \langle \vec{s}_i \rangle = \mathrm{Sp}\,\{\vec{u}_i\}(e^{-H/T}\vec{s}_i)\,/\,\mathrm{Sp}\,\{\vec{u}_i\}(e^{-H/T}).$$

Уравнение для $\vec{r}_i$ можно получить исходя из условия термодинамического равновесия – условия минимума свободной энергии, вычисленной для заданной конфигурации $\{\vec{r}_i\}$:

$$F(\{\vec{r}_i\}) = -T\ln \mathrm{Sp}\,\{\vec{u}_i\}(e^{-H/T}); \quad \frac{\partial F(\{\vec{r}_i\})}{\partial \vec{r}_i} = 0. \qquad /3/$$

В наиболее простом и обычно используемом [2-6] случае симметричного потенциала с двумя минимумами: $U(s_i) = -\frac{A}{2}s_i^2 + \frac{B}{4}s_i^4$, используя /3/, получаем

$$\eta_i(\eta_i^2 - \alpha_i(T)) + \sum_j f_{ij}(\eta_i - \eta_j) = 0, \qquad /4/$$

где введены безразмерные переменные

$$\eta_i = r_i\sqrt{B/A}, \quad f_{ij} = \frac{1}{A}\left.\frac{|\partial^2 V(s_i - s_j)|}{\partial s_i\,\partial s_j}\right|_{\{s_i\}=0}, \qquad /5/$$

$$\alpha_i(T) = 1 - 3\frac{B}{A}\left(\langle u_i^2\rangle + \frac{1}{3r_i}\langle u_i^3\rangle\right).$$

При слабой связи, $f_0 = \sum_j f_{ij} \ll 1$, возможен переход типа порядок-беспорядок, который описывается моделью Изинга [1,9], с помощью замены

$$\eta_i = \sigma\sqrt{\alpha}, \quad \sigma_i = \pm 1, \qquad /6/$$

поскольку в этом случае роль флуктуаций мала [9]: $\frac{\langle u^2\rangle}{A/B} \sim \frac{T}{A^2/B} \ll 1$ при $T \sim T_c \sim f_0(A^2/B) \ll A^2/B$ $(V \ll U)$, и поэтому $\alpha \approx 1$.

При сильной связи $f_0 \gg 1$ возможно лишь плавное изменение координаты η_i в /4/: $|\eta_i - \eta_j| \sim 1/f_0 \ll 1$, что позволяет перейти к континуальному пределу [7] $\eta_i = \eta(\vec{x}_i)$:

$$\eta(\vec{x})[\eta^2(\vec{x}) - \alpha(\vec{x}, T)] + \sum_{\alpha,\beta} c_{\alpha\beta}\frac{\partial^2\eta(\vec{x})}{\partial x_\alpha\,\partial x_\beta} = 0, \qquad /7/$$

где

$$c_{\alpha\beta} = \sum f_{ij}\,\frac{1}{2}(x_i^\alpha - x_j^\alpha)(x_i^\beta - x_j^\beta) \qquad /8/$$

– модуль упругости. Уравнение /7/ представляет собой нелинейное уравнение для равновесных положений с учетом перенормировки в фононном поле. Строго говоря, фононы можно определить лишь при условии $\frac{d\eta(x)}{dx} = 0$. Приближенно будем считать, что область изменения $\eta(x)$ невелика. Тогда можно ввести однородные равновесные положения: $\eta_0 = \eta(x \to \pm\infty)$, в которых существуют обычные фононные возбуждения. В общем случае необходимо решать задачу о фононах в неоднородной среде. Уравнение /7/ при размерности $d > 1$ решить в аналитическом виде не представляется возможным, поэтому для его анализа рассмотрим квазиодномерный случай. Для квазиодномерных систем уравнение /7/ принимает вид [7]

$$c\frac{d^2\eta(x)}{dx^2} + \eta^3(x) - \alpha(x, T)\,\eta(x) = 0. \qquad /9/$$

Функция $\alpha(x,T)$ /5/, определяемая корреляционными функциями малых смещений $\langle u^2\rangle$ и $\langle u^3\rangle$, вообще говоря, зависит от $\eta(x)$. Так, в приближении среднего поля, в котором $\langle u^3\rangle = 0$, получаем

$$y(x,T) \equiv \frac{B}{A}\langle u^2\rangle = \frac{\lambda}{2\sqrt{\Delta(x) + f_0}}\,\mathrm{cth}\,\frac{\lambda\sqrt{\Delta(x) + f_0}}{2\tau}, \qquad /10/$$

где щель в фононном спектре

$$\Delta(x) = 3(\eta^2(x) + y(x)) - 1 = 3\eta^2(x) - \alpha(x) \qquad /11/$$

и введены обозначения $\lambda = h\sqrt{A/m}/(A^2/B)$ - квантовый параметр и $\tau = T/(A^2/B)$ - безразмерная температура. Система уравнений /9/-/11/ отличается от соответствующих уравнений в работе [10] учетом не только квантовых флуктуаций, но и тепловых. Для перехода типа смещения $f_0 \gg 1$, и поэтому $f_0 \gg |\Delta(x)| \sim 1$. В этом случае можно воспользоваться приближением $a(x,T) \approx a(T)$, и тогда уравнение /9/ имеет решение

$$\eta(x) \approx \sqrt{a(T)}\,\mathrm{th}\frac{x}{\xi\sqrt{2}}, \quad \xi = \frac{\sqrt{c}}{\sqrt{a(T)}}. \qquad /12/$$

Таким образом, учет фононных флуктуаций приводит к уменьшению амплитуды солитона, $\eta^2 = a(T) < 1$, и увеличению его ширины $\xi^2/a(T) > \xi_0^2 = c$. Изменения $a(x)$ в области доменной стенки $x < \xi$, которые можно рассмотреть аналогично [10] с помощью итерационного расчета, существенно не меняют вида решения /12/.

В случае однородного решения величина $\eta(x) = \eta$ играет роль параметра порядка в системе и согласно /9/ $\eta^2 = a(T)$. Температура фазового перехода, при которой обращается в ноль параметр порядка и частота мягкой моды, определяется из условия

$$a(T_c^\circ, \eta = 0) = 0. \qquad /13/$$

При $f_0 \gg 1$ для T_c° получаем оценку: $T_c^\circ \sim (f_0/3)\cdot(A^2/B)\,(y \sim T\cdot B/\phi_0 A)$. Неоднородное решение /12/ показывает, что возможен другой тип фазового перехода, соответствующий неустойчивости всей системы по отношению к образованию кластеров различной поляризации $\eta(x) = \pm\sqrt{a}$. Фазовый переход в этом случае носит характер перехода типа порядок-беспорядок, при котором при $T = T_c < T_c^\circ$

$$\eta = \langle\eta(x)\rangle_c = 0, \quad \langle\eta^2(x)\rangle_c \approx a(T_c) \neq 0, \qquad /14/$$

где $\langle\ldots\rangle_c$ означает усреднение по всем кластерам. Этот вывод обусловлен нелинейными свойствами модели /1/ и, как показывают исследования методом полекулярной динамики [6], справедлив не только для одномерных систем. Для изучения этого вопроса рассмотрим поведение функции распределения равновесных положений при $T \to T_c$.

3. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАВНОВЕСНЫХ ПОЛОЖЕНИЙ И МЯГКАЯ МОДА В КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКЕ

Рассмотрим разложение свободной энергии /3/ по координатам η_i.

$$F(\eta_i) = F(0) + \frac{1}{2}\sum_{ij} a_{ij}\eta_i\eta_j + \frac{1}{4}\sum_{ijk\ell} b_{ijk\ell}\,\eta_i\eta_j\eta_k\eta_\ell, \qquad /15/$$

где коэффициенты разложения $a_{ij} = (\partial^2 F/\partial\eta_i\partial\eta_j)_{\eta_i,\eta_j=0}$, $b_{ijk\ell} = (\partial^4 F/\partial\eta_i\partial\eta_j\partial\eta_k\partial\eta_\ell)_{\{\eta_i\}=0}$. В однородном случае, $\eta_i = \eta$, разложение /15/ эквивалентно разложению Ландау по параметру порядка η. В неоднородном случае введем пространственное фурье-представление

$$\eta_i = \frac{1}{N}\sum e^{i\vec{q}\vec{\ell}_i}\,\eta_q, \qquad /16/$$

где ℓ_i - узлы решетки. Тогда разложение /15/ перепишется в виде

$$F(\{\eta_q\}) = F(0) + \frac{1}{2}\sum_q a(q)\,\eta_q\eta_{-q} + \frac{1}{4}\sum_{q_1q_2q_3q_4} b(q_i)\,\eta_{q_1}\eta_{q_2}\eta_{q_3}\eta_{q_4}. \qquad /17/$$

В континуальном пределе $\eta_i = \eta(x)$ в суммах по q в /17/ достаточно учесть лишь длинноволновые компоненты, тогда коэффициенты разложения можно представить в виде

$$a(q) = \frac{1}{N}\sum e^{i\vec{q}(\vec{\ell}_i - \vec{\ell}_j)}\,a_{ij} \approx a(0) + sq^2,$$
$$b(\{q_i\}) \approx b(\{q_i = 0\}) = b. \qquad /18/$$

В критической точке переход к континуальному пределу вполне оправдан, поскольку в этой точке поведение системы соответствует большим медленно меняющимся пространственным флуктуациям параметра η_i. То, что наша система определена на решетке, приводит к обрезанию импульса, например, $\{\eta_{|q|\le 1}\}$. Используя /17/, /18/, видим, что распределение вероятностей случайного поля $\{\eta(x)\}$ описывается в критической области стандартным гамильтонианом Ландау-Вильсона /см., например, [11]/

$$H(\eta) = \beta U(\eta) = \frac{1}{2}\int d^dx\{r\eta^2(x) + [\nabla\eta(x)]^2\} + u\int d^dx[\eta^2(x)]^2, \qquad /19/$$

где

$$\beta = T/s, \quad r = a(0)/s, \quad u = b/4s,$$

а функция распределения имеет вид

$$P_{r,u}[\eta] = Z^{-1} e^{-H[\eta]}. \qquad /20/$$

Как известно [11], в критической точке случайное поле $\{\eta(x)\}$ /соответственно и его распределение/ является автомодельным /масштабно-инвариантным/, то есть соответствует кластерам, характерные размеры которых бесконечны. Автомодельное распределение /20/ определяется некоторыми значениями параметров r^*, u^*. Поскольку автомодельные распределения кластеров больших размеров являются неподвижными точками преобразования ренормализационной группы, то для нахождения вида распределения /20/, т.е. значений параметров r^*, u^*, необходимо решить задачу

$$R P_{r^*,u^*}\{\eta\} = P_{r^*,u^*}\{\eta\}, \qquad /21/$$

где R - стандартное ренормгрупповое преобразование [11]. Проводя вычисления по теории возмущений в первом порядке по $\epsilon=4-d>0$, получаем

$$r^* = -\frac{n+2}{n+8}\epsilon + o(\epsilon^2), \qquad /22/$$
$$u^* = \frac{8\pi^2}{n+8}\epsilon + o(\epsilon^2),$$

где n - число компонент параметра порядка $\eta^2(x) = \sum_{\alpha=1}^{n}[\eta_\alpha(x)]^2$. Для $d>4$ автомодельное распределение является гауссовским:

$$r^* = 0, \quad u^* = 0. \qquad /23/$$

Таким образом, при $d\le 3$ распределение равновесных положений $\{\eta_i\}$ в критической точке T_c является негауссовским и при этом $a^* = a(0,T_c) > 0$.

Отметим, что введенная нами функция распределения равновесных положений $P(\{\eta_i\})$ /20/ отличается от функции распределения координат кластеров ("block coordinates"), использованной в работе [5]. В нашем подходе, основанном на разделении координаты /2/, все флуктуации фононного типа, в том числе длинноволновые, $q\to 0$, уже учтены при определении конфигурационной свободной энергии; они приводят к температурной зависимости коэффициентов $a(T)$, $b(T)$ в разложении /15/. Поэтому негауссовский характер распределения /22/ в критической точке, определяемой /21/ при $d<4$, обусловлен только релаксационной динамикой равновесных положений η_i.

Обычно фазовый переход - обращение в ноль коэффициента $a(0)$ в системах типа смещения - связывают с обращением в ноль частоты мягкой моды. Действительно, коэффициент a_{ij} в /15/ определяет обратную изотермическую восприимчивость и имеет вид:

$$a_{ij} = (\Lambda_i + f_0)\delta_{ij} - f_{ij} + M_{ij}(0), \qquad /24/$$

где

$$\Lambda = 3\langle u_i^2\rangle\left(\frac{B}{A}\right) - 1, \qquad /25/$$
$$M_{ij}(0) = \left(\frac{B}{A}\right)^{3/2}\langle\langle u_i^3/u_j^3\rangle\rangle_{\omega=0} \; -$$

статическое значение массового оператора функции Грина фононов [12]:

$$G_{ij}(\omega) = \frac{B}{A}\langle\langle u_i/u_j\rangle\rangle_\omega = \qquad /26/$$
$$= \left\{\frac{m}{A}\omega^2\delta_{ij} - [(\Lambda_i + f_0)\delta_{ij} - f_{ij} + M_{ij}(\omega)]\right\}^{-1}.$$

Сравнивая /24/ и /26/ и учитывая /18/, видим, что частота мягкой моды $(\Omega_q^2\to 0)$, определяемая полюсами функции /26/, совпадает с обратной изотермической восприимчивостью

$$\Omega_q^2 = a(q) \approx a(0) + sq^2. \qquad /27/$$

В однородном случае $a(0,T_c^\circ) = 0$ и $\Omega^2_{q=0}(T_c^\circ) = 0$. В общем же случае, при учете нелинейных эффектов, согласно /22/ при $d<4$ возможно, что $\Omega^2_{q=0} = a(0,T_c) \sim r^* \neq 0$. Следовательно, в критической точке T_c мягкая мода не обращается в ноль, а фазовый переход происходит как переход порядок-беспорядок и определяется релаксационной динамикой кластеров. Этот вывод согласуется с результатами исследований модели /1/ методом молекулярной динамики [6].

4. ДИНАМИКА КЛАСТЕРОВ

Для определения релаксационной динамики кластеров в окрестности критической точки воспользуемся феноменологическим уравнением Ландау-Халатникова /см., например, [13]/:

$$\partial_t \eta_q^\alpha = -\Gamma\frac{\delta\beta U[\eta]}{\delta\eta_q^\alpha} = \qquad /28/$$
$$= -\Gamma\{(r+q^2)\eta_q^\alpha + 4u\int d\vec q_1\,\eta^\alpha_{q_1}\int d\vec q_2\,\eta^\beta_{\vec q_2}\,\eta^\beta_{-q-\vec q_1-\vec q_2},$$

где Γ - феноменологический параметр. В координатном пространстве уравнение /28/ имеет вид

$$\partial_\tau \eta - \Delta\eta + r\eta + 4u\eta^3 = 0, \qquad /29/$$

где $\tau = \Gamma t$. Нетрудно видеть, что для $d=1$ уравнение /29/ имеет ограниченные решения: $\eta = f(x - v\tau, \tau)$ для случая $|v| \gg 1$ или $|\Delta\eta| \ll 1$, тогда

$$f^2(\xi,\tau) = \frac{-r}{4u + \exp(-2\tau\xi/v)}, \quad \xi = x - v\tau. \qquad /30/$$

В частном случае $v=1$ уравнение /29/ имеет ограниченное решение вида $\eta = f(x-\tau, \tau)$, если

$$f^2(\xi,\tau) = \frac{-2r}{4u + e^{-\tau\xi}}. \qquad /31/$$

Решения /30/, /31/ описывают релаксационное разрушение кластеров, которые флуктуационно возникают в окрестности критической точки, поскольку для фиксированного x имеем при больших τ:
$f^2(x,\tau) \sim -re^{-\tau^2}$.

Для исследования отклика системы $\{\eta_q\}$ на внешнее поле рассмотрим флуктуации поля $\{\eta(x)\}$ относительно равновесных значений. Если $u=0$ /см. /19/ и /28/,/29//, тогда спектральная плотность

$$I_q(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-i\omega t} \langle \eta_q(0)\, \eta_{-q}(t) \rangle =$$

$$= \frac{T}{r+q^2} \; \frac{2\tau_q}{1+(\omega\tau_q)^2} = \frac{2T\Gamma}{\tau_q^{-2} + \omega^2}, \qquad /32/$$

где

$\tau_q = [\Gamma(r+q^2)]^{-1}$ и $r \sim a \sim a\cdot(T - T_c^\circ)$.

Учет нелинейных поправок ($u \neq 0$) можно провести методом, предложенным в /13/. Тогда асимптотика спектральной плотности в критической точке, т.е. $q \to 0$, $\omega \ll 1$, $T = T_c$, имеет вид

$$I(q=0,\omega) \sim \frac{T_c\Gamma}{\pi} \; \frac{1}{\omega^{1+(2-\eta)/\Delta\omega}}. \qquad /33/$$

Критический индекс η и динамический индекс Δ_ω можно определить с помощью ϵ-разложения. Их комбинация, стоящая в /33/, выражается через параметры неподвижной точки (r^*, u^*), а именно:

$$\frac{2-\eta}{\Lambda_\omega} = 1 - \frac{(u^*)^2}{64\pi^4} 9 \ln\frac{4}{3} = 1 - \frac{\epsilon^2}{2(n+8)} \ln\frac{4}{3}. \qquad /34/$$

Следовательно, в критической точке

$$I(q=0,\omega) \sim \omega^{-\lambda}, \quad \lambda < 2, \qquad /35/$$

т.е. отклик имеет вид центрального пика и описывает медленную релаксацию кластеров /ср. /32//.

Итак, в рассматриваемой нами системе разделение динамических переменных на "быстрые" и "медленные" /2/ сохраняет смысл и в критической области, поскольку система испытывает фазовый переход типа порядок-беспорядок по "медленной" переменной $\{r_i\}$ без полного смягчения фононов $\{u_i\}$: $\Omega_0^2 = a^* > 0$. При этом появляется центральный пик в функции отклика $I(0,\omega) \sim \omega^{-(2-c\epsilon^2)}$, где $\epsilon = 4 - d$, $c = \ln\frac{4}{3} \cdot 2(n+8)$.

Авторы признательны В.Б.Приезжеву и В.Ю.Юшанхаю за обсуждение затронутых в работе вопросов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вакс В.Г., Ларкин А.И. ЖЭТФ, 1965, 41, с.975.
2. Соколов А.И. ЖЭТФ, 1975, 68, с.1137.
3. Bruce A.D. In: Solitons and Condensed Matter Physics, eds.A.R.Bishop, T.Schneider. Springer, 1978, p.116.
4. Müller K.A. Lect.Notes in Phys., 1979, 104, p.210.
5. Bruce A.D., Schneider T., Stoll E. Phys.Rev.Lett., 1979, 43, p.1284.
6. Schneider T., Stoll E. Ferroelectrics, 1980, 24, p.67.
7. Krumhansl I.A., Schrieffer J.R. Phys.Rev.B, 1975, 11,p.3535.
8. Beck H. J.Phys.C., 1976, 9, p.33.
9. Стаменкович С. и др. ОИЯИ, Р17-9226, Дубна, 1975; Phys. Rev.B, 1976, 14, p.5080; Ferroelectrics, 1980, 24, p.255.
10. Bishop A.R., Domany E., Krumhansl J.A. Phys.Rev., B., 1976, 14, p.2966.
11. Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и ϵ-разложение. "Мир", М., 1975.
12. Аксенов В.Л., Плакида Н.М. ТМФ, 1978, 34, с.363; 35, с.104.
13. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. "Наука", М., 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел
20 августа 1980 года.