объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна





Р17-81-445

В.Л.Аксенов, А.Ю.Дидык, В.Ю.Юшанхай

# ДИНАМИКА ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА СМЕЩЕНИЯ

Направлено в журнал "Физика низких температур"

1981

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время наблюдался значительный интерес к системам, испытывающим структурные фазовые переходы, динамическое поведение которых не описывается классической теорией мягкой фононной моды /см. обзоры [1,2] и цитируемую там литературу/. Было показано, что в системах типа смещения в критической области возможно появление кластеров, предшествующих возникновению несимметричной /низкотемпературной/ фазы. В результате, подобно системам типа "порядок-беспорядок", идеальные /бездефектные/ системы типа смещения характеризуются двумя видами движений: "быстрыми" - колебаниями частиц относительно квазиравновесных положений внутри кластеров и "медленными" - движениями стенок кластеров. Критическое замедление обеспечивается релаксационной динамикой последних, приводящей к центральному пику в спектральной функции. Возможное поведение мягкой моды следует из расчета методом молекулярной динамики, проведенного в работе [3] для двухмерной модели. При уменьшении температуры $\theta$ в парафазе частота мягкой моды уменьшается до некоторого минимального значения при $\theta=\theta_0(>\theta_c)$, а затем начинает возрастать и остается конечной при $\theta=\theta_c$. Однако имеющиеся в литературе [1,2] обсуждения температурного поведения мягкой моды и центрального пика при наличии кластеров носят качественный характер или основаны на результатах расчетов методом молекулярной динамики. Детального количественного исследования проведено не было.

В настоящей работе эта задача рассмотрена для одномерной модели, когда нелинейные эффекты допускают аналитическое описание.

Одномерная модель является специфической в том смысле, что в ней нет упорядоченной фазы. В то же время $\theta=0$ можно рассматривать как критическую температуру, а область $\theta>0$ - как область парафазы.

## 2. ФОНОНЫ В НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ

Простейшей моделью структурного фазового перехода является система связанных ангармонических осцилляторов /решеточная модель "$\phi^4$" / с гамильтонианом [4]:

$$H = \sum_i \left[ \frac{m}{2}\dot\phi_i^2 - \frac{A}{2}\phi_i^2 + \frac{B}{4}\phi_i^4 \right] + \frac{1}{4}\sum_{ij} C_{ij}(\phi_i - \phi_j)^2, \qquad /1/$$

где $\phi_i$ - смещение $i$ -й частицы с массой $m$ относительно положения равновесия в симметричной /высокотемпературной/ фазе; $A, B > 0$ - параметры одночастичного потенциала с двумя минимумами с глубиной $V = A^2/4B$ и расстоянием между минимумами $|\phi_0| = \sqrt{A/B}$. Модель /1/ описывает фазовые переходы типа смещения, когда энергия связи между частицами $\phi_0^2 C_0 > V$ /или $C_0 = \sum_j C_{ij} > A$ /.

Имея в виду, что при низких температурах $\theta \geq 0$ в системе возникают кластеры разной поляризации [2-4], координату частицы $\phi_i(t)$ представим в виде квазиравновесных положений в кластере $s_i$ и малых /относительно $s_i$ / смещений $u_i$ :

$$\phi_i(t) = s_i(t) + u_i(t). \qquad /2/$$

Смещения $s_i(t)$ приводят к возбуждениям типа солитонных волн /доменная стенка или кинк/, а смещения $u_i(t)$ - к возбуждениям типа фононов [4,5]. Гамильтониан /1/ с учетом /2/ аппроксимируем суммой гамильтонианов для конфигурационной и фононной частей [6]:

$$H_0 = H_K + H_\Phi, \qquad /3/$$

$$H_K = \sum_i \left[ \frac{p_i^2}{2m} - a_i \frac{A}{2} s_i^2 + \frac{B}{4} s_i^4 \right] + \frac{1}{4}\sum_{ij} C_{ij}(s_i - s_j)^2, \qquad /3а/$$

$$H_\Phi = \sum_i \left[ -\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial u_i^2} - \Delta_i \frac{A}{2} u_i^2 \right] + \frac{1}{4}\sum_{ij} C_{ij}(u_i - u_j)^2. \qquad /3б/$$

Эта аппроксимация основывается на вариационном принципе Боголюбова для свободной энергии $F: F \leq F_1 = F_0 + \langle H - H_0 \rangle$, где $F_0$ - свободная энергия с гамильтонианом $H_0$. Вариационные параметры $a_i$ и $\Delta_i$, учитывающие взаимное влияние двух подсистем /кинк-фононное взаимодействие/, определяются из условия стационарности свободной энергии и имеют вид

$$a_i = 1 - 3\frac{B}{A}\langle u_i^2 \rangle, \qquad \Delta_i = 3\frac{B}{A}\langle s_i^2 \rangle - a_i. \qquad /4/$$

Статистические средние $\langle \ldots \rangle$ вычисляются с гамильтонианом $H_0$. Заметим, что переменные $s_i(t)$ и $u_i(t)$ имеют разный характерный масштаб времен, что позволяет провести разделение /3/.

Гамильтониан /3б/ содержит случайный одноузельный потенциал $\Delta_i$, обусловленный неупорядоченностью системы в результате разбиения ее на кластеры. Чтобы ввести фононы, необходимо предварительно выполнить структурное усреднение, то есть усреднение по распределению стенок кластеров. Ограничимся простейшим в теории неупорядоченных систем приближением "среднего" кристалла, в котором случайный одночастичный потенциал заменяется на средний потенциал возмущения в эффективной трансляционно-инвариантной решетке:



$$\bar a = 1 - 3\frac{B}{A}\overline{\langle u^2 \rangle}, \qquad \bar\Delta = 3\frac{B}{A}\overline{\langle s_i^2 \rangle} - \bar a. \qquad /5/$$

В /5/ черта сверху означает усреднение по конфигурациям. В этом случае гамильтониан /3б/ описывает колебания в эффективной /"средней"/ решетке в псевдогармоническом приближении, в котором взаимодействие между фононами учитывается в самосогласованном фононном поле [7], а частота колебаний и корреляционные функции "малых" смещений описываются следующими уравнениями:

$$h^2\bar\omega_q^2 = \frac{A}{m}(\bar\Delta + f_0 - f_q), \quad f_q = \frac{C_q}{A} = \frac{1}{AN}\sum_{i \neq j} C_{ij} e^{iq(R_i - R_j)}; \qquad /6/$$

$$\overline{\langle u^2 \rangle} = \frac{1}{mN}\sum_q \frac{1}{2\bar\omega_q}\coth\frac{\bar\omega_q}{2\theta}. \qquad /7/$$

Итак, мы получили самосогласованную систему уравнений /5/-/7/ для описания температурного поведения фононов /мягкой моды/ в решетке при наличии кластеров с различной поляризацией квазиравновесных положений частиц. Для того чтобы замкнуть эту систему уравнений, необходимо вычислить средние квадратичные значения квазиравновесных положений $\langle s_i^2 \rangle$ по распределению стенок кластеров.

## 3. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ КВАЗИСОЛИТОНОВ

Рассмотрим гамильтониан /3а/. При сильной связи $(C_0/A \gg 1)$ возможно лишь плавное изменение координаты $s_i$, что позволяет перейти к континуальному пределу [4]: $s_i = s(x_i)$, $x_i = i\ell \equiv x$, где $\ell$ - постоянная решетки. Гамильтониан /3а/ в континуальном пределе отличается от обычно используемого $\phi^4$- гамильтониана наличием температурнозависящего множителя $\bar a$, учитывающего влияние фононных флуктуаций на медленную подсистему. Уравнения Лагранжа-Эйлера для гамильтониана /3а/ в непрерывном пределе имеют солитоноподобное частное решение [4,5]. В пределе малой плотности кластеров ($|x_1 - x_2| \gg \delta$ - ширины стенки) приближенное частное решение при наличии в системе $N_k$ стенок имеет вид

$$s_{N_k}(x,t;\{x_{0i}\},\{v_i\}) = \sqrt{\frac{A}{B}\bar{a}}\ \prod_{i=1}^{N_k} \operatorname{th} \frac{x - x_{0i} \pm v_i t}{\sqrt{2}\,\xi / \bar{a}^{1/2}}\ , \qquad /8/$$

где $\xi = \sqrt{\frac{m}{A}(c_0^2 - v^2)}$ - ширина стенки без учета фононной перенормировки; $c_0^2 = C_0 \ell^2 / 2m$ - скорость звука, а также предельная скорость квазисолитона в системе. Подставляя выражение /8/ при $N_k = 1$ в /3a/ и проводя интегрирование в пределе $v \ll c_0$, получаем для энергии и массы квазисолитона следующие выражения:

$$E = E_0 + \frac{m^* v^2}{2};\ E_0 = \frac{A^2}{B}\ \frac{\sqrt{2}\,\xi_0}{\ell}(\bar{a}^{1/2} - \bar{a}^{3/2});\ m^* = \frac{4}{3}\ \frac{m\sqrt{2}\,A\,\bar{a}^{3/2}}{\ell B \xi_0}, \qquad /9/$$

где $\xi_0 = c_0\sqrt{m/A}$.

Учет фононных флуктуаций приводит к уменьшению высоты стенки кластера и увеличению ее ширины $\delta_0^2 = 2\xi_0^2/\bar{a} > 2\xi_0^2$, а также к уменьшению ее энергии, что качественно согласуется с результатами работы [8]. В отличие от работы [8], в нашем подходе учтены фононные флуктуации также при $\theta \neq 0$ с помощью уравнения /7/ /см. также [9] /.

Для того чтобы вычислить корреляционные функции квазисолитонов, воспользуемся феноменологической статистической механикой "идеального" газа квазисолитонов [4,5], которая может быть применена к модели /1/ в области температур $\theta \ll E_0$. Статистическую сумму газа квазисолитонов в большом каноническом ансамбле представим в виде [4,5,10]

$$Z_k = \sum_{N_k}^{\infty} e^{\frac{\mu N_k}{\theta}}\ L_{N_k},\quad L_{N_k} = \frac{1}{N_k!}\Big[\iint \frac{dv\, dx_0}{\tilde{B}}\, e^{-\frac{2E_0 + m^* v^2}{2\theta}}\Big]^{N_k}, \qquad /10/$$

где $\tilde{B}$ - нормировочный множитель в фазовом пространстве значений $x_0$ и $v$, или после интегрирования:

$$Z_k = \exp\Big\{ L\Big(\frac{2\pi\theta}{m^* \tilde{B}^2}\Big)^{1/2} e^{\frac{\mu - E_0}{\theta}} \Big\}. \qquad /11/$$

Используя выражение /11/, получаем плотность стенок кластеров в виде

$$\bar{n}_k = \frac{\bar{N}_k}{L} = \frac{\theta}{L}\ \frac{\partial}{\partial\mu}\ \ell n\, Z_k = \Big(\frac{2\pi\theta}{m^* \tilde{B}^2}\Big)\quad e^{-E_0/\theta}. \qquad /12/$$

Это выражение отличается от соответствующего в работе [4] предэкспоненциальным множителем и совпадает с полученным в работе [5] при $\tilde{B} = 2h/m^*$ /$h$ - постоянная Планка/.



Среднее значение квазиравновесного положения $\langle \overline{s(x,0)} \rangle$ в точке $x$ в произвольный фиксированный момент времени $t$ получим, усредняя решение /8/ по положениям стенок кластеров $x_{0i}$ и скоростям $v_i$ с распределением /10/. Начальное условие зададим таким образом, что при $\theta = 0$ образец поляризован так, что существует один домен с $s(x,0) = \sqrt{A\bar{a}/B}$. При температурах, отличных от нуля, в системе начинают появляться кластеры, тогда

$$\langle \overline{s(x,0)} \rangle = Z_k^{-1}\Big\{ \sqrt{\frac{A}{B}\bar{a}} + \iint \frac{dv\, dx_0}{\tilde{B}}\, s_1(x,0;x_0,v)\, e^{-\frac{2E_0 + m^* v^2}{2\theta}} + \frac{1}{2!}\iint \frac{dv_1\, dx_{01}}{\tilde{B}} \iint \frac{dv_2\, dx_{02}}{\tilde{B}}\, s_2(x,0;x_{01},x_{02},v_1,v_2)\, e^{-\frac{4E_0 + m^*(v_1^2 + v_2^2)}{2\theta}} + \ldots \Big\}. \qquad /13/$$

В термодинамическом пределе $(L \to \infty)$ вклады в /13/ состояний с одной, двумя и большим числом стенок в среднем равны нулю, так как

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx_0\, \operatorname{th}\frac{x - x_0}{\delta} = \delta\, \ell n \frac{\operatorname{ch}(\frac{L}{2} + x)/\delta}{\operatorname{ch}(\frac{L}{2} - x)/\delta} \xrightarrow[L \to \infty]{} 0\ .$$

Поэтому

$$\sqrt{\frac{B}{A}} \langle \overline{s(x,0)} \rangle = Z_k^{-1}\sqrt{\bar{a}} = \begin{cases} \sqrt{\bar{a}} & \text{при } \theta = 0; \\ 0 & \text{при } \theta > 0,\ L \to \infty. \end{cases} \qquad /14/$$

Таким образом, среднее значение /термодинамическое и конфигурационное/ положения равновесия частицы в модели /3/ равно нулю при любой отличной от нуля температуре.

Среднеквадратичные значения квазиравновесных положений вычисляются таким же образом: в выражения типа /13/ нужно подставлять квадраты решений /8/. Используя то, что для любого конечного $x$

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx_0\, \operatorname{th}^2\Big(\frac{x - x_0}{\delta}\Big) = \int_{-L/2}^{L/2} dx_0\Big[1 - \frac{1}{\operatorname{ch}^2\frac{x - x_0}{\delta}}\Big] = L - 2\delta + 0(e^{-L/\delta}),$$

получаем

$$\langle \overline{s^2(x,0)} \rangle = \frac{A}{B}\,\bar{a}\, \exp(-2\bar{n}_k \delta_0). \qquad /15/$$

Использованная процедура конфигурационного усреднения позволяет также получить динамическую корреляционную функцию. При этом появляются интегралы вида

$$\int\limits_{-L/2}^{L/2} dx_0 \, \mathrm{th}\,\frac{x_0 - x + vt}{\delta}\,\mathrm{th}\,\frac{x_0}{\delta} = L - 2(x - vt)\,\mathrm{cth}\,\frac{x - vt}{\delta} ,$$

и в результате

$$\overline{\langle s(x,t)\; s(0,0)\rangle} = \frac{A}{B}\,\bar{a}\,\exp\{-2e^{-\frac{E_0}{\theta}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dv}{\tilde{B}}(x - vt)\,\mathrm{cth}\,\frac{x - vt}{\delta}\, e^{-\frac{m^* v^2}{2\theta}}\}. \qquad /16/$$

Заметим, что это выражение справедливо при следующих ограничениях: $x < 1/\bar{n}_k$ ; $t < 1/\bar{v}\bar{n}_k$ ; $\bar{v}$ - средняя скорость кинка.

Статическая корреляционная функция, которая получается из /16/ при $t = 0$, после интегрирования по скоростям имеет вид

$$\overline{\langle s(x,0)\; s(0,0)\rangle} = \frac{A}{B}\,\bar{a}\,\exp\{-2\bar{n}_k\, x\;\mathrm{cth}\,\frac{x}{\delta_0}\}. \qquad /17/$$

Это выражение при $x \to 0$ совпадает с /15/, а при $x \gg \delta_0$ принимает вид

$$\overline{\langle s(x,0)\; s(0,0)\rangle} = \frac{A}{B}\,\bar{a}\,\exp\{-x/\zeta_c\}, \qquad /18/$$

где $\zeta_c = 1/2n_k(\theta)$ - корреляционная длина. При $\theta \to \theta_c\,(=0)$ $\zeta_c \to \infty$. Выражение вида /18/ с множителем $\bar{a} = 1$ было получено в работе /4/ на основе точных вычислений методом матрицы перехода.

## 4. ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОВЕДЕНИЕ СПЕКТРА ВОЗБУЖДЕНИЙ

В экспериментах по рассеянию нейтронов или света измеряется функция рассеяния, которая описывает динамические свойства системы и выражается через корреляционную функцию:

$$S(q,\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2}\iint\limits_{-\infty}^{\infty} dx\, dt\, e^{i(qx - \omega t)}\langle\phi(x,t)\;\phi(0,0)\rangle. \qquad /19/$$

В приближении /3/ функция рассеяния /19/ состоит из трех разделенных пиков - двух $\delta$ -образных боковых при энергиях фононов /6/ и центрального при $\omega = 0$, обусловленного динамикой стенок кластеров.

В дальнейшем будем рассматривать фазовый переход ферродисторского типа, когда максимум фурье-образа потенциала взаимодействия $C_q$ достигается при $q = 0$. Введем безразмерные переменные:

$$\Omega_q^2 = \frac{\bar{\omega}_q^2}{A/m};\; T = \frac{\theta}{A^2/B};\; \epsilon_0 = \frac{E_0}{A^2/B};\; M^* = \frac{m^* c_0^2}{A^2/B};\; f_0 = \frac{C_0}{A};\; \lambda = \frac{h\sqrt{A/m}}{A^2/B}. \qquad /20/$$



В переменных /20/ свойства модели определяются двумя параметрами: относительной силой связи между частицами $f_0$ и $\lambda$ -параметром квантовости. При переходах типа смещения $f_0 > 1$. Параметр $\lambda$ играет такую же роль, как и температура. Если $\lambda > \lambda_c$, то есть если энергия нулевых колебаний больше глубины потенциального минимума, то смещенного состояния не возникает даже при нулевой температуре. Верхней оценкой для $\lambda_c$ является $\lambda_c = 1$.

Использованная в данной работе статистическая механика газа квазисолитонов может быть применена при температурах $T \ll \epsilon_0$. Для модели /1/ имеется еще одна характерная температура. Как показывает численное моделирование /см. обзор /11/ /, характер взаимодействия квазисолитонов в модели /1/ зависит от их скорости, а следовательно, от температуры /11/: при $\theta < \theta_1 = m^* v_{kp}^2$ / $v_{kp} = 0{,}2\, c_0$ / возникают связанные состояния квазисолитонов, которые могут давать основной вклад в статистику. Следовательно, статистическая механика газа квазисолитонов справедлива при $\theta > \theta_1$. Оценку для температуры $T_1 = \theta_1/(A^2/B)$, используя /9/, получаем в виде $T_1 \simeq 0{,}05\sqrt{f_0}$. Таким образом, область применимости используемых в данной работе приближений ограничена следующими значениями параметров модели и температуры:

$$f_0 > 1;\quad \lambda_0 \ll 1;\quad 0{,}05\sqrt{f_0} < T \ll \epsilon_0. \qquad /21/$$

Заметим, что вариационный характер подхода сохраняет физический смысл результатов /в интерполяционном смысле/ и на границе данных оценок.

### 4.1. Мягкая фононная мода

Температурное поведение энергии фононов определяется самосогласованной системой уравнений /5/-/7/, /15/. На рис. 1 представлены результаты решения этой системы уравнений для частоты мягкой моды при $q = 0$ /щель в спектре мягких фононов/ при значениях параметров $f_0 = 10$, $\lambda = 0{,}1$. На рис. 1 показана также зависимость энергии и массы квазисолитона от температуры, крестиками обозначены точки, в которых нарушается условие самосогласования /7/. При выполнении расчетов нормировочный множитель $\tilde{B}$ полагается равным $c_0\delta_0$. Суммирование по $q$ в /7/ проводилось в пределах $-\pi/\ell \le q \le \pi/\ell$, где $\ell$ - постоянная решетки. Разрывное поведение физических величин означает фазовый переход первого рода и является следствием псевдогармонического приближения для фононов. Как видно из рис. 1, при $T < T_0 (\approx 0{,}7)$ мягкая мода ведет себя как в классической теории. При $T \approx T_0$ "высокотемпературные" фононы становятся неустойчивыми, что связано с появлением кластеров /квазисолитонов/. Фононы при наличии кластеров ведут себя аналогично "низкотемпературным" фононам /фононам в феррофазе/. Отметим, что при $T \to T_c$ / $T_c = 0$ в нашем случае/ час-

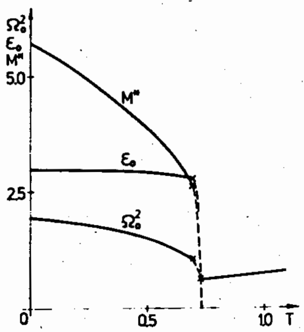


Рис.1. Зависимость частоты мягкой моды, энергии и массы квазисолитонов от температуры при значениях параметров модели $f_0 = 10$, $\lambda = 0{,}1$ /в безразмерных переменных /20//.

тота мягкой моды не убывает, как в классической теории, а возрастает. Этот результат подтверждает качественную картину [2] и согласуется с результатами численного моделирования для двухмерной модели [3].

Зависимость энергии квазисолитонов от температуры показывает, что область $T < T_0$ лежит в пределах /21/ применимости используемых в данной работе приближений. В области $T < T_1$ $/\simeq 0{,}16/$, вообще говоря, необходимо учитывать связанные состояния квазисолитонов. Можно ожидать, что на поведении фононов детали динамики стенок кластеров сказываются несущественно, хотя этот вопрос требует более детального рассмотрения.

### 4.2 Центральный пик

Функция рассеяния на квазисолитонах с учетом выражения для динамической корреляционной функции /16/ имеет вид

$$S_k(q,\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint\limits_{-\infty}^{\infty} dx\,dt\, e^{i(qx-\omega t)} \frac{A}{B} \bar{a} \times$$
$$\times \exp\left\{ -2e^{-E_0/\theta} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{\tilde{B}} e^{-\frac{m^* v^2}{2\theta}} (x - vt) \operatorname{cth} \frac{x - vt}{\sqrt{2}\xi/\bar{a}^{1/2}} \right\}. \qquad /22/$$

Возможны два предельных режима поведения газа квазисолитонов [12]: бесстолкновительный и диффузионный. Диффузионный режим соответствует асимптотике $t \to \infty$ в /22/. Полагая, что в пределах корреляционной длины $\zeta_c$ корреляционная функция не зависит от координаты [4]: $\langle s(x,t)\, s(0,0) \rangle \simeq \langle s(0,t)\, s(0,0) \rangle$, и проводя интегрирование в /22/, получаем

$$S_k(q,\omega) \simeq \frac{A}{B} a \frac{\sigma_\lambda(q)}{\pi} \frac{\gamma}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad \gamma = \frac{4\theta}{m^* \tilde{B}} e^{-E_0/\theta}, \qquad /23/$$

где $\sigma_\lambda(q)$ - приближенное пространственное преобразование в пределах корреляционной длины. Таким образом, в случае простой диффузии стенок кластеров в сечении рассеяния должен наблюдаться центральный пик лоренцевской формы с полушириной/шириной на половине высоты/ $\omega_0 \sim \gamma$ $(\omega_0 \sim \bar{v}/\zeta$, где $\bar{v}$ - средняя скорость стенок; $\zeta$ - среднее расстояние между ними/. При уменьшении температуры высота центрального пика увеличивается, а полуширина уменьшается. В пределе $\theta \to 0$ $S_k(q,\omega)$ /23/ переходит в $\delta$-функцию. Выражение /23/ с точностью до обозначений и нормировки $\bar{a}$ совпадает с соответствующим в работе [4]. Недостатком формулы /23/ является то, что она не отражает явной зависимости от волнового вектора $q$ /импульса передачи при рассеянии/. Зависимость от $q$ имеет значение при изучении критического рассеяния при $T \to T_c$, которое в силу возрастания корреляционной длины /18/ происходит при $q = 0$, то есть является квазиупругим.

Бесстолкновительный режим - свободное движение квазисолитонов соответствует линейному по плотности $(\bar{n}_k \ll 1/\delta)$ приближению в /22/. Используя замену переменных $y = (x - vt)/\delta$, получаем в этом случае

$$S_k(q,\omega) \simeq \bar{a}\,\delta(q)\,\delta(\omega) + \bar{n}_k \frac{A}{B} \frac{\xi_0}{2} \left(\frac{\pi m^*}{2\theta}\right)^{1/2} \frac{1}{|q|} \frac{e^{-\frac{m^*}{2\theta}\left(\frac{\omega}{q}\right)^2}}{\operatorname{sh}^2 \frac{\pi q \xi_0}{2\bar{a}^{1/2}}}. \qquad /24/$$

Первое слагаемое в /24/ отвечает чисто упругому рассеянию и при $T \to T_c$ соответствует критическому рассеянию на одном кластере макроскопических размеров $(\zeta_c \to \infty)$. Второе слагаемое, имеющее гауссовскую форму, при $q \to 0$ описывает квазиупругое рассеяние на свободно движущихся стенках кластеров. При $T \to 0$ интенсивность этого рассеяния уменьшается до нуля. Мерой интенсивности рассеяния служит структурный фактор, который для квазиупругого рассеяния в /24/ получаем в виде

$$S_k(q) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\, S_k(q,\omega) = \bar{n}_k\, \bar{a} \frac{\pi}{2\operatorname{sh}^2 \frac{\pi q \xi_0}{2\bar{a}^{1/2}}}. \qquad /25/$$

Как видно из этого выражения, максимум рассеяния достигается при $q \to 0$.

На рис. 2 и 3 представлены результаты вычисления функции $S_k(q,\omega)$ в зависимости от температуры, полученные численным интегрированием выражения /22/ при значениях параметров модели $f_0 = 10$, $\lambda_0 = 0{,}1$. При $q \neq 0$ / $q/\ell = 0{,}016$, рис. 2/ интенсивность центрального пика при уменьшении $T$ от $T_0$ сначала увеличивается, а затем начинает уменьшаться при $T \to 0$. Полуширина уменьшается при уменьшении температуры. При $q = 0$ центральный пик имеет такую же форму, как на рис. 2, но интенсивность его при $T \to T_c$ / $= 0$/ возрастает, а полуширина уменьшается. На рис. 3 показана температурная зависимость интенсивности и полуширины в этом

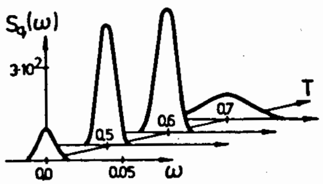


Рис.2. Температурное поведение центрального пика при $q = 0{,}016$ / $f_0 = 10$, $\lambda = 0{,}1$/.

случае. Сделанные в данном разделе приближения не позволяют оценить вклада диффузии квазисолитонов в функцию рассеяния /ср. с /12//, что, однако, не меняет главного результата. Из проведенного рассмотрения следует, что в идеальной /бездефектной/ решетке в парафазе вклад движущихся стенок кластеров в центральный пик уменьшается при $T \to T_c$/=0/. При $T \to 0$ интенсивность пика при $q \neq 0$ будет стремиться к нулю и при учете связанных состояний квазисолитонов, наиболее устойчивыми из которых являются бионы /11/. Исходя из характера поведения бионов, известного из численного моделирования /11/, можно предположить, что при $T<T_1$ /$\simeq 0{,}16$ для выбранных параметров модели/ структура центрального пика изменится: он распадается на два пика с максимумами при $\omega$, близкими к $\omega = 0$ и соответствующими энергии бионов. С уменьшением температуры эти пики будут двигаться в сторону $\omega \to \sqrt{2a}$ и при $T \to 0$ сольются с фононными. Похожая картина наблюдалась при численном моделировании в одномерной модели /1/, проведенном в работе /13/, где соответствующие возбуждения были названы кластерными волнами.

В заключение коротко обсудим вопрос, в какой степени результаты, полученные для одномерной модели, могут быть применены к реальным системам. В случае сильноанизотропных квазиодномерных систем обобщение полученных результатов возможно в духе работы /14/. Для систем с размерностью $d>1$ распространение кластерной феноменологии затруднено, поскольку в этом случае решения соответствующих уравнений Лагранжа-Эйлера типа кластерных стенок являются неустойчивыми /11/. Однако даже такие формально неустойчивые образования могут приводить к поведению системы, аналогичному случаю $d = 1$, если время их жизни достаточно велико /2/. С другой стороны, как показывает численное моделирование /11/, в системах с $d = 2,3$ образуются устойчивые нелинейные возбуждения, соответствующие связанным состояниям. Формализм рассмотрения фононных возбуждений, развитый в данной работе, не ограничен одномерными системами и, в принципе, позволяет описывать поведение мягкой моды, если известны среднеквадратичные квазиравновесные положения $\langle s_1^2 \rangle$ в /5/ /см., например, /6/ /. На современном уровне теории эта задача может быть решена только при комбинировании предложенного метода описания фононов и численного описания нелинейных возбуждений.

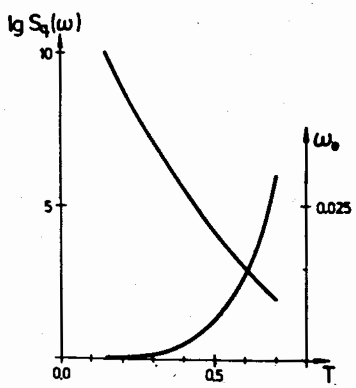


Рис.3. Зависимость от температуры интенсивности и полуширины $\omega_0$ центрального пика при $q = 0$ / $f_0 = 10$, $\lambda = 0{,}1$/.

Авторы выражают благодарность В.Г.Маханькову и Н.М.Плакиде за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гинзбург В.Л., Леванюк А.П., Собянин А.А. Phys.Rep.1980, 57, №3, p. 151-240; УФН, 1980, 130, №4, с. 615-673.
2. Bruce A.D., Cowley R.A. Adv. Phys., 1980, 29, No. 1, p. 219-321.
3. Schneider T., Stoll E. Phys.Rev.B, 1976, 13, No. 3, p. 1216-1237.
4. Krumhansl J.A., Schrieffer J.R. Phys.Rev. B, 1975, 11, No. 9, p. 3535-3545.
5. Currie J.F. et al. Phys.Rev.B, 1980, 22, No.2, p.477-496.
6. Аксенов В.Л. и др. ФТТ, 1976, 18, №10, с. 2920-2926.
7. Аксенов В.Л., Плакида Н.М. ТМФ, 1978, 34, №3, с. 353-363; 1978, 35, №1, с. 104-112.
8. Bishop A.R., Domany E., Krumhansl J.A. Phys.Rev.B, 1976, v. 14, No.7, p. 2966-2971.
9. Аксенов В.Л. и др. ОИЯИ, Р17-80-576, Дубна, 1980, с. 9; Fizika, 1980, 12, Suppl., No.1, p. 332-338.
10. Федянин В.К., Юшанхай В.Ю. ФНТ, 1981, 7, №2, с. 176-180.
11. Makhankov V. Comp.Phys.Commun., 1980, 21, p. 1-49.
12. Theodorakopoulos N. Z.Phys.B, 1979, 33, No. 4, p. 385-390.
13. Schneider T., Stoll E. Phys. Rev. Lett., 1975, 35, No. 5, p. 296-299.
14. Bishop A.R., Krumhansl I.A. Phys.Rev.B, 1975, 12, No. 7, p. 2824-2831.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 июля 1981 года.