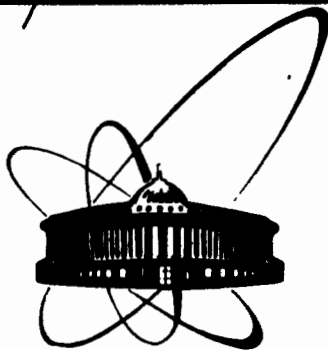


4447/82

20/IX-82



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P17-82-438

Х.Конвент, Н.М.Плакида

СТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ
КРИСТАЛЛА KMnF_3

Направлено в журнал "Acta Physica Polonica"

1982

1. ВВЕДЕНИЕ. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА

В работе ^{1/} нами была сформулирована микроскопическая модель для описания структурных и магнитных фазовых переходов /ФП/ в кристалле фторида калия-марганца (KMnF_3), а в работе ^{2/} - вычислена свободная энергия и получены уравнения для равновесных значений параметров порядка, описывающих структурные переходы, обусловленные модами R_{25} и M_3 , и антиферромагнитный переход. Полный анализ полученной системы уравнений представляет значительные вычислительные трудности и может быть проведен лишь численным образом с привлечением дополнительных упрощающих предположений. Наиболее сложным является решение уравнения самосогласования для фононной подсистемы, которое определяет корреляционную функцию флуктуаций /см. /28/ в ^{2/} /:

$$D_{\lambda\mu}^{(\kappa)}(T) = \frac{1}{N} \sum_q \gamma_{\kappa}(q) D_{\lambda\mu}(q) = \frac{1}{N} \sum_q \gamma_{\kappa}(q) \sum_a e_{\lambda}^a(q) e_{\mu}^a(q) \frac{1}{2\Omega_a(q)} \text{cth} \frac{\Omega_a(q)}{2T}, \quad /1/$$

где $\gamma_{\kappa}(q) = (1/2)(1 - \cos q_{\kappa} a)$, $e_{\lambda}^a(q)$ и $\Omega_a(q)$ - векторы поляризации и частота фононов /см. /19/, /27/ в ^{2/} /. В работах ^{3-5/}, посвященных анализу ФП, индуцированного модой R_{25} в SrTiO_3 и LaAlO_3 , при вычислении /1/ было принято приближение молекулярного поля:

$$D_{\lambda\mu}^{(\kappa)}(T) = \delta_{\lambda\mu} \cdot \frac{1}{2\omega_{\lambda}} \text{cth} \frac{\omega_{\lambda}}{2T}, \quad /2/$$

где частота ω_{λ} вычислялась без учета дисперсии моды $\Omega_a(q)$ в /1/. При описании ФП в KMnF_3 , имеющего аномально анизотропный фононный спектр для мод R_{25} и M_3 , приближение /2/ слишком грубо: оно не учитывает, например, квазидвухмерного характера флуктуаций в широкой области температур при переходе в точке R . Поэтому в нашей работе мы воспользуемся другим приближением, отражающим критическое поведение корреляций вблизи точки R ($\vec{q}_R = (\pi/a)(1, 1, 1)$):

$$D_{\lambda\mu}^{(\kappa)}(T) = \frac{1}{N} \sum_{qR} \gamma_{\kappa}(q_R) e_{\lambda}^a(q_R) e_{\mu}^a(q_R) \frac{1}{2\Omega_a(q)} \text{cth} \frac{\Omega_a(q)}{2T} = \delta_{\lambda\mu} \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{2\Omega_{\lambda}(k)} \text{cth} \frac{\Omega_{\lambda}(k)}{2T} \equiv \delta_{\lambda\mu} D_{\lambda}(T) \quad /3/$$

где $\vec{k} = \vec{q} - \vec{q}_R$, а для частоты мягкой моды $\Omega_\lambda(k)$ примем представление:

$$\Omega_\lambda^2(k) = \Omega_\lambda^2(q_R) + s_2 k^2 + (s_1 - s_2) k_\lambda^2, \quad /4/$$

которое часто используется при анализе спектра вблизи $\vec{q} = \vec{q}_R$. Как показывают теоретические оценки ^{/6/} и измерение с помощью рассеяния нейтронов ^{/7,8/}, $s_1/s_2 \sim 10^{-2}$ и незначительно зависит от температуры. Поэтому в дальнейшем s_1 и s_2 мы будем считать постоянными параметрами модели. В этом приближении система уравнений для параметров порядка, полученная в ^{/2/}, значительно упрощается и принимает вид:

а/ уравнение ^{/31/} в ^{/2/} для параметра порядка A_λ , связанного с конденсацией моды R_{25} / $A_\lambda \neq 0$ в фазе R /:

$$\begin{aligned} & A_\lambda \{ \omega_R^2 + 2\Gamma_1 [A_\lambda^2 + 3C_\lambda^2 + 3D_\lambda(T)] + \\ & + 2\Gamma_2 \cdot \sum_{\mu \neq \lambda} [A_\mu^2 + C_\mu^2 + D_\mu(T)] + \\ & + 2[(a + 4\beta)e_{\lambda\lambda} + 2k_{12} B_\lambda^2] + 2 \sum_{\mu \neq \lambda} [(a - 2\beta)e_{\mu\mu} + (k_{11} + k_{13}) B_\mu^2] \} - \\ & - 2 \sum_{\mu \neq \lambda} A_\mu [g_{66} e_{\lambda\mu} + 2k_{66} B_\lambda B_\mu] = 0, \end{aligned} \quad /5/$$

б/ уравнение ^{/32/} в ^{/2/} для параметра порядка C_λ , связанного с конденсацией моды M_3 / $C_\lambda \neq 0$ в фазе M /:

$$\begin{aligned} & C_\lambda \{ \omega_M^2 + 2\Gamma_1 [3A_\lambda^2 + C_\lambda^2 + 3D_\lambda(T)] + \\ & + 2\Gamma_2 \sum_{\mu \neq \lambda} [C_\mu^2 + A_\mu^2 + D_\mu(T)] + 2[(a + 4\beta)e_{\lambda\lambda} + 2k_{12} B_\lambda^2] + \\ & + 2 \sum_{\mu \neq \lambda} [(a - 2\beta)e_{\mu\mu} + (k_{11} + k_{13}) B_\mu^2] \} = 0, \end{aligned} \quad /6/$$

в/ уравнение для равновесной деформации:

$$\begin{aligned} e_{\lambda\lambda} = & \frac{b_1}{c_t} [2B_\lambda^2 - \sum_{\mu \neq \lambda} B_\mu^2] - \left(\frac{a}{c_f} + \frac{4\beta}{c_t} \right) [A_\lambda^2 + C_\lambda^2 + D_\lambda(T)] - \\ & - \left(\frac{a}{c_f} - \frac{2\beta}{c_t} \right) \sum_{\mu \neq \lambda} [A_\mu^2 + C_\mu^2 + D_\mu(T)], \end{aligned} \quad /7/$$

$$e_{\lambda \neq \mu} = \frac{g_{66}}{c_{44}} A_\lambda A_\mu + \frac{1}{4c_{44}} b_2 B_\lambda B_\mu, \quad /8/$$

где $c_f = c_{11} + 2c_{12}$, $c_t = c_{11} - c_{12}$.

г/ уравнение ^{/29/} в ^{/2/} для параметра порядка B_λ , определяющего вектор антиферромагнетизма /АФ/ при $T < T_N$ - температуры АФ перехода:

$$B_\lambda = - \frac{h_\lambda}{h} \cdot S \beta_S \left(\frac{S \cdot h}{T} \right), \quad /9/$$

где молекулярное поле h_λ ^{/26/} в ^{/2/}:

$$\begin{aligned} h_\lambda = & B_\lambda \{ f(q_R) - b_1 [2e_{\lambda\lambda} - \sum_{\mu \neq \lambda} e_{\mu\mu}] + \\ & + 4k_{12} [A_\lambda^2 + C_\lambda^2 + D_\lambda(T)] + \\ & + 2(k_{11} + k_{13}) \sum_{\mu \neq \lambda} [A_\mu^2 + C_\mu^2 + D_\mu(T)] \} - \sum_{\mu \neq \lambda} B_\mu [b_2 e_{\lambda\mu} + 4k_{66} A_\lambda A_\mu]. \end{aligned} \quad /10/$$

Помимо обозначений, принятых в работе ^{/2/}, здесь использованы еще более удобные в дальнейшем коэффициенты:

$$\begin{aligned} 3\alpha = & 2(g_{12} + g_{11} + g_{13}), \\ 3\beta = & g_{12} - \frac{1}{2}(g_{11} + g_{13}). \end{aligned} \quad /11/$$

Для частоты мягкой моды R_{25} ^{/36/} в ^{/2/} получаем:

$$\begin{aligned} \Omega_\lambda^2(q_R) \equiv \Omega_{\lambda R}^2 = & -|\omega_R^2| + 2[(a + 4\beta)e_{\lambda\lambda} + 2k_{12} B_\lambda^2] + \\ & + 2 \sum_{\mu \neq \lambda} [(a - 2\beta)e_{\mu\mu} + (k_{11} + k_{13}) B_\mu^2] + \\ & + 6\Gamma_1 [A_\lambda^2 + C_\lambda^2 + D_\lambda(T)] + 2\Gamma_2 \sum_{\mu \neq \lambda} [A_\mu^2 + C_\mu^2 + D_\mu(T)]. \end{aligned} \quad /12/$$

Частота моды M_3 ^{/37/} в ^{/2/} может быть записана как

$$\Omega_\lambda^2(\vec{q}_M^\lambda) = \Omega_{\lambda R}^2 + |\omega_R^2| - |\omega_M^2| \equiv \Omega_{\lambda M}^2. \quad /13/$$

Рассмотрим далее эту самосогласованную систему уравнений в частных случаях: в следующем разделе обсудим первый структурный переход в тетрагональную фазу с конденсацией моды R_{25} , в разделе 3 - структурный переход при конденсации моды M_3 . В разделе 4 получено разложение свободной энергии по параметру порядка A_λ при $T \geq T_R$, на основе которого обсуждаются

флуктуационные эффекты при первом структурном переходе и проводится сравнение с феноменологической теорией.

2. СТРУКТУРНЫЙ ПЕРЕХОД В ТОЧКЕ R

Выше температуры структурных переходов, при $T > T_R$, система находится в кубической фазе, где корреляционные функции $D_\lambda(T)$ /3/ одинаковы для всех компонент λ , а частота моды $\Omega_{\lambda R}^2$ /13/ трехкратно вырождена:

$$\begin{aligned} \Omega_{\lambda R}^2(T > T_R) &= -|\omega_R^2| + 2\Gamma D_\lambda(T) + 6\alpha \cdot e_{\lambda\lambda} = \\ &= -|\omega_R^2| + 2\left(\Gamma - \frac{3\alpha^2}{c_\ell}\right) D_\lambda(T), \end{aligned} \quad /14/$$

где введено $\Gamma = (3\Gamma_1 + 2\Gamma_2)$ и использовано уравнение /7/ для изотропной деформации

$$e_{\lambda\lambda}(T) = -\frac{3\alpha}{c_\ell} \cdot D_\lambda(T), \quad /15/$$

описывающей тепловое расширение кристалла. Температура T_R для ФП 2-го рода определяется из уравнения:

$$\Omega_{\lambda R}^2(T_R) = -|\omega_R^2| + 2\left(\Gamma - \frac{3\alpha^2}{c_\ell}\right) D_\lambda(T_R) = 0. \quad /16/$$

Такое же условие, очевидно, получаем из уравнения /5/ для параметра порядка $A_\lambda \rightarrow 0$ при $C_\lambda = 0$, $B_\lambda = 0$ с учетом кубической симметрии при $T = T_R$.

Оценим температуру ФП T_R в /16/, пользуясь приближениями /3/ и /4/ для вычисления корреляционной функции:

$$\begin{aligned} D_\lambda(T_R) &= \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{2\Omega_\lambda(q)} \operatorname{cth} \frac{\Omega_\lambda(q)}{2T_R} = \frac{T_R}{N} \sum_k \frac{1}{\Omega_\lambda^2(k)} = \\ &= T_R \cdot \frac{a^3 k_0}{(2\pi)^2} \cdot \frac{1}{s_2 \sqrt{s_2 - s_1}} \cdot \ln \left(\frac{1 + \sqrt{1 - s_1/s_2}}{1 - \sqrt{1 - s_1/s_2}} \right) = T_R \frac{1}{\Omega_0^2}, \end{aligned} \quad /17/$$

где предельный импульс k_0 определяется соотношениями $k_0 a^3 = 6\pi^2$ или $k_0^2 s_2 = \omega_D^2$, где ω_D - характеристическая "дебаевская" частота для моды R_{25} . В случае $s_1/s_2 \sim 10^{-2}$ для средней по анизотропному спектру частоты Ω_0 получаем оценку:

$$\Omega_0^2 = \frac{2}{3} \omega_D^2 \left[\ln \frac{4s_2}{s_1} \right]^{-1} \approx 0,1 \omega_D^2. \quad /18/$$

В этом приближении температура T_R определяется соотношением:

$$T_R = \frac{1}{2\Gamma} |\omega_R^2| \cdot \Omega_0^2. \quad /19/$$

Эта формула может быть использована для оценки константы ангармонизма $\tilde{\Gamma} = (\Gamma - 3\alpha^2/c_\ell)$ по известным значениям $|\omega_R^2|$ и Ω_0^2 /18/. При $T > T_R$ для частоты мягкой моды /14/ находим:

$$\Omega_{\lambda R}^2(T \geq T_R) = |\omega_R^2| [D_\lambda(T)/D_\lambda(T_R) - 1] = |\omega_R^2| (T/T_R - 1). \quad /20/$$

Из сопоставления этой формулы с экспериментом можно найти, например, параметр модели $|\omega_R^2|$.

Рассмотрим далее тетрагональную фазу, когда только одна из компонент A_λ , например, A_1 , не равна нулю $A_1 \neq 0$ при $T < T_R$. Уравнение для равновесного значения A_1 находится из соотношения /5/ с учетом /7/ в виде:

$$2\left(\Gamma_1 - \frac{3\alpha^2}{c_\ell} - \frac{24\beta^2}{c_t}\right) A_1^2 = |\omega_R^2| - 6\tilde{\Gamma}_1 D_1(T) - 4\tilde{\Gamma}_2 D_2(T), \quad /21/$$

где введены эффективные константы ангармонизма

$$\tilde{\Gamma}_1 = \Gamma_1 - \frac{\alpha^2}{c_\ell} - \frac{8\beta^2}{c_t}, \quad \tilde{\Gamma}_2 = \Gamma_2 - \frac{3\alpha^2}{c_\ell} + \frac{12\beta^2}{c_t} \quad /22/$$

после исключения из /5/ равновесных деформаций e_{11} и $e_{22} = e_{33}$. Последние определяются соотношениями:

$$\begin{aligned} e_{11} + 2e_{22} &= -\frac{\alpha}{c_\ell} \cdot [A_1^2 + D_1(T) + 2D_2(T)], \\ e_{11} - e_{22} &= -\frac{6\beta}{c_t} [A_1^2 + D_1(T) - D_2(T)]. \end{aligned} \quad /23/$$

Второе уравнение дает величину тетрагональной деформации, равной $e/a - 1 = e_{11} - e_{22}$. При выводе /21/ и /23/ мы учли также симметрию корреляционных функций в тетрагональной фазе: $D_1 \neq D_2 = D_3$. Для самосогласованного их вычисления соответственно формулам /3/, /4/ необходимо найти выражение для частоты мягкой моды /12/. В тетрагональной фазе вырождение $\Omega_{\lambda R}^2$ снимается лишь частично: возникает невырожденная мода Ω_{1R} и двукратно вырожденные моды $\Omega_{2R} = \Omega_{3R}$:

$$\Omega_{1R}^2(T) = 4\Gamma_1 A_1^2(T),$$

$$\Omega_{2,3R}^2(T) = 2A_1^2(T) \left(\Gamma_2 - \Gamma_1 + \frac{36\beta^2}{c_t} \right) + 2[D_2(T) - D_1(T)] \left(3\Gamma_1 - \Gamma_2 - \frac{36\beta^2}{c_t} \right). \quad /25/$$

Видно, что при $T \rightarrow T_R$, $\Omega_{1R}(T) \rightarrow 0$ и $\Omega_{2,3}(T) \rightarrow 0$. Полное решение самосогласованной системы уравнений /21/-/25/ с учетом выражения для корреляционной функции /3/, /4/ позволяет исследовать температурную зависимость соответствующих термодинамических величин. Отметим, что подобная же система уравнений ранее исследована в работах /3-5/, в которых было использовано приближение /2/ типа молекулярного поля, для вычисления корреляционных функций. При этом получено достаточно хорошее согласие с экспериментальными данными для SrTiO_3 при подгонке всего нескольких микроскопических параметров. Как отмечено в этих работах, взаимодействие моды R_{25} с однородной деформацией в случае SrTiO_3 важно и приводит к значительной перенормировке констант ангармонизма /22/.

3. СТРУКТУРНЫЙ ПЕРЕХОД В ТОЧКЕ M

При исследовании второго структурного перехода с конденсацией моды M_3 и появлением ненулевых значений параметра C_λ в уравнении /6/ следует различать два случая: переход в фазу $R+M$, когда $A_\lambda \neq 0$ и $C_\lambda \neq 0$, переход в "чистую" фазу M , когда ниже температуры перехода T_M : $A_\lambda = 0$, а $C_\lambda \neq 0$. В частности, при $A_1 \neq 0$ и $C_1 \neq 0$ и равных нулю остальных компонентах A_λ, C_λ , получаем тетрагональную фазу $R+M$, соответствующую сложению углов поворотов октаэдров в моде R_{25} и M_3 вдоль оси $[1,0,0]$. При всех $A_\lambda = 0$ и $C_1 \neq 0$, но $C_2 = C_3 = 0$, имеем "чистую" тетрагональную фазу M , соответствующую конденсации только моды M_3 для луча $\vec{q}^{(1)}$. Как показывает эксперимент /9/, в KMnF_3 , по-видимому, реализуется тетрагональная фаза $R+M$ / $(\Delta, 0, 0)$ - в обозначениях /10/ /, но при этом возникает дополнительное смещение ионов К вдоль оси поворота октаэдров в противоположные стороны в соседних плоскостях, которые, аналогично /2/ в /2/, можно описать формулой:

$$\langle u_\lambda(\vec{r}) \rangle = X_\lambda \exp(i\vec{q}_X^{(\lambda)} \vec{r}), \quad /26/$$

где $\vec{q}_X^{(\lambda)}$ - трехлучевая звезда волнового вектора в точке X зоны Бриллюэна / $\vec{q}_X^{(1)} = (1/2, 0, 0)$ и т.д./ . Для учета этих смещений необходимо расширить модель, вводя дополнительное

взаимодействие параметров порядка A_λ, C_λ и смещения X_λ в виде:

$$H_3 = \Gamma_3 \sum_\lambda A_\lambda C_\lambda X_\lambda. \quad /27/$$

Это обобщение модели будет рассмотрено в отдельной работе - здесь же мы ограничимся анализом результатов для исходной модели /1/.

Как уже отмечалось в /2/, переход в фазу $R+M$ /или M / в данной модели должен быть переходом 1-го рода. Действительно, при $A_1 \neq 0$ уравнение /6/ для равновесного значения параметра порядка C_λ с учетом /5/ дает соотношения

$$C_\lambda^2 = A_1^2 + \frac{1}{4\Gamma_1} (|\omega_R^2| - |\omega_M^2|) > A_1^2 \quad /28/$$

и уравнение /13/ для частоты моды M_3 : $\Omega_{\lambda M}^2 > \Omega_{\lambda R}^2$. Поэтому параметр C_λ и частота $\Omega_{\lambda M}^2$ не равны нулю при температуре перехода T_M . Если же $A_1 = 0$ при $T < T_M$, то уравнение /6/ для $C_1 \neq 0$ может быть записано в виде

$$2\left(\Gamma_1 - \frac{3\alpha^2}{c_\ell} - \frac{24\beta^2}{c_t}\right)C_1^2 = |\omega_M^2| - 6\tilde{\Gamma}_1 D_1(T) - 4\tilde{\Gamma}_2 D_2(T), \quad /29/$$

где введены перенормированные ангармонические константы взаимодействия /22/ после исключения равновесных деформаций:

$$e_{11} + 2e_{22} = -\frac{\tilde{\alpha}}{c_\ell} [A_1^2 + C_1^2 + D_1(T) + 2D_2(T)], \quad /30/$$

$$e_{11} - e_{22} = \frac{6\beta}{c_t} [A_1^2 + C_1^2 + D_1(T) - D_2(T)].$$

Уравнение /29/ совпадает с /21/, если в последнем $|\omega_M^2|$ заменить на $|\omega_R^2|$. Учитывая, что в кристалле KMnF_3 $|\omega_R^2| - |\omega_M^2| \ll |\omega_R^2|$, приходим к выводу о том, что равновесные значения параметров порядка при $T \sim T_M$ близки друг другу: $C_1(T_M^-) \approx A_1(T_M^+)$, где $T_M^\pm = T_M \pm \delta$, $\delta > 0$. В случае перехода в фазу $R+M$ это непосредственно следует из уравнения /28/, а в случае $A_1(T_M^-) = 0$ решение уравнения /29/ с учетом /21/ дает:

$$C_1^2(T_M^-) = A_1^2(T_M^+) \cdot \frac{|\omega_M^2|}{|\omega_R^2|} = A_1^2(T_M^+). \quad /31/$$

Поскольку для кристалла KMnF_3 $T_M \approx (1/2)T_M$, то

$$A_1(T_M) = A_1(T=0) = |\omega_R^2|/2 \left[\Gamma_1 - (3\alpha^2/c_\ell) - (24\beta^2/c_t) \right]$$

и параметр $C_1(T_M^-)$ испытывает значительный скачок. Более точные результаты о характере фазового перехода в точке M можно получить, лишь проводя численный расчет свободной энергии системы и анализируя ее поведение для различных фаз при $T = T_M$. Поскольку равновесные деформации /30/ в тетрагональной фазе M определяются такими же формулами, что и /23/, если в последних заменить A_1^2 на $A_1^2 + C_1^2$, то при переходе в чистую фазу $M (A_1 = 0)$ они не должны существенно меняться при учете равенства /31/. Частоты мягких мод R_{25} и M_3 определяются в тетрагональной фазе M формулами:

$$\Omega_1^2(q_M^{(1)}) = 4\Gamma_1 C_1^2 = \Omega_1^2(q_R) + |\omega_R^2| - |\omega_M^2|, \quad /32a/$$

$$\Omega_{2,3}^2(q_R) = -|\omega_R^2| + 2\tilde{\Gamma}_2 [A_1^2 + C_1^2 + D_1(T) + D_2(T)] + 6\tilde{\Gamma}_1 D_2(T), \quad /32b/$$

$$\Omega_2^2(q_M^{(2)}) = \Omega_3^2(q_M^{(3)}) = \Omega_{2,3}^2(q_R) + |\omega_R^2| - |\omega_M^2|. \quad /32b/$$

Сравнивая эти уравнения с /24/, /25/, находим, что при переходе из фазы R в чистую фазу M частоты $\Omega_\lambda(q_R)$ и $\Omega_\lambda(q_M^{(\lambda)})$ также меняются незначительно: $\Omega_\lambda(q_R, T_M^+) \approx \Omega_\lambda(q_R, T_M^-)$ в силу уравнения /31/.

С помощью общих формул /5/-/8/, /12/, /13/ можно также исследовать переход в фазу M с параметрами $C_1 = 0$, $C_2 \neq 0$ и /или/ $C_3 \neq 0$ при $A_1 \neq 0$ или $A_1 = 0$. В этом случае система уравнений принимает более сложный вид и здесь не приводится.

4. ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ И РАЗЛОЖЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

Для сопоставления полученных результатов с феноменологической теорией рассмотрим разложение свободной энергии по параметру A_λ вблизи первого структурного перехода при $T \geq T_R$. Это позволит нам обсудить также флуктуационные эффекты в приближении метода самосогласованных фононов. Более последовательное исследование критических явлений на основе метода ренормгруппы или суммирования скелетных диаграмм для упрощенной модели содержится в работах /11,12/.

Учитывая общее представление для свободной энергии /17/ в /2/, запишем разложение ее по параметру порядка A_λ в виде:

$$\frac{1}{N} F_1(T, A_\lambda) = f_0(T, A_\lambda = 0) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} V_{\lambda\mu}(T) A_\lambda A_\mu + \quad /33/$$

$$+ \frac{1}{4!} \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} V_{\lambda\mu\nu\sigma} A_\lambda A_\mu A_\nu A_\sigma.$$

Для первого коэффициента $V_{\lambda\mu}$, учитывая условие стационарности /18/ в /2/ свободной энергии при вариации по параметру $\phi_{\lambda\mu}(q)$ и неявную зависимость частот самосогласованных фононов $\Omega_\lambda(q)$ от A_λ через корреляционную функцию /3/ /см. /12//, получаем простое выражение:

$$V_{\lambda\mu} = \frac{1}{N} \frac{d^2}{dA_\lambda dA_\mu} F_1(T, A_\lambda) = \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial A_\lambda \partial A_\mu} \langle H \rangle_0 = \phi_{\lambda\mu}(q_R, A_\lambda = 0). \quad /34/$$

Значение пробной гармонической матрицы $\phi_{\lambda\mu}(q_R)$ определяется формулой /27/ в /2/, согласно которой $\phi_{\lambda\lambda}(q_R) = \Omega_\lambda^2(q_R)$ в формуле /12/, а

$$\phi_{\lambda \neq \mu}(q_R) = 4\Gamma_2 [A_\lambda A_\mu + D_{\lambda \neq \mu}^{(\delta)}(T)] - 4g_{\delta\delta} e_{\lambda\mu} - 4k_{\delta\delta} B_\lambda B_\mu. \quad /35/$$

Полагая $A_\lambda = 0$ в $\phi_{\lambda\mu}(q_R, A_\lambda)$, находим первый коэффициент в разложении /33/. Очевидно, что определение температуры перехода в тетрагональную фазу в /33/ совпадает с полученным ранее в /16/ $V_{\lambda\lambda}(T_R) = \Omega_\lambda^2(q_R, T_R) = 0$.

При определении второго коэффициента в /33/ удобно воспользоваться представлением:

$$V_{\lambda\mu\nu\sigma} = \frac{1}{N} \frac{d^4}{dA_\lambda dA_\mu dA_\nu dA_\sigma} F_1(T, A_\lambda) = \frac{d^2}{dA_\nu dA_\sigma} \phi_{\lambda\mu}(q_R, A_\lambda) \equiv V_{\lambda\mu\nu\sigma}^{(0)} + V_{\lambda\mu\nu\sigma}^{(1)}, \quad /36/$$

где первый член $V^{(0)}$ определяется явной зависимостью $\phi_{\lambda\mu}(q_R)$ от параметра A_λ , а второй - $V^{(1)}$ - неявной зависимостью через корреляционные функции. Учитывая /12/ и /35/, для первого члена получаем соотношение:

$$\frac{1}{4!} \sum_{\lambda\mu\nu\sigma} V_{\lambda\mu\nu\sigma}^{(0)} A_\lambda A_\mu A_\nu A_\sigma = \frac{\Gamma_1}{2} \sum_{\lambda} A_\lambda^2 + \frac{\Gamma_2}{2} \sum_{\lambda \neq \mu} A_\lambda^2 A_\mu^2, \quad /37/$$

которое можно было бы получить и непосредственно из статической части свободной энергии E_0 в /15/ в /2/. При вычислении флуктуационных поправок $V^{(1)}$ в /36/ воспользуемся приближением /3/ для корреляционных функций, согласно которому недиагональные члены /35/ вклада не дают, а для диагональной компоненты $\phi_{\lambda\lambda}(q_R) = \Omega_\lambda^2(q_R)$ на основании формулы /12/ получаем:

$$V_{\lambda\mu\nu\sigma}^{(1)} = \delta_{\lambda\mu} \cdot \frac{d^2}{dA_\nu dA_\sigma} [8\Gamma_1 D_\lambda(T) + 2\Gamma_2 \sum_{\lambda' \neq \lambda} D_{\lambda'}(T)]. \quad /38/$$

Вычисление производной от корреляционной функции в приближении /3/ дает уравнение

$$\frac{d^2}{dA_\nu dA_\sigma} D_\lambda(T) = -Q_\lambda(T) \cdot \frac{d^2}{dA_\nu dA_\sigma} \Omega_\lambda^2(q_R) = -2Q_\lambda(T) \{ 2\delta_{\nu\sigma} \Gamma_{\lambda\nu} + \sum_{\lambda' \neq \lambda} \frac{d^2}{dA_{\nu'} dA_\sigma} D_{\lambda'}(T) \}, \quad /39/$$

где вершина $\Gamma_{\lambda\nu} = 3\Gamma_1 \delta_{\lambda\nu} + \Gamma_2(1 - \delta_{\lambda\nu})$ и введена функция

$$Q_\lambda(T) = -\frac{1}{N} \sum_k \frac{d}{d\Omega_\lambda^2(k)} \left(\frac{1}{2\Omega_\lambda(k)} \operatorname{cth} \frac{\Omega_\lambda(k)}{2T} \right) = \frac{T}{N} \sum_k \frac{1}{\Omega_\lambda^4(k)}. \quad /40/$$

Алгебраическая система уравнений /39/ если не использовать приближения /3/, то получается система интегральных уравнений/ соответствует суммированию всех расходящихся при $T \rightarrow T_R$ петлевых диаграмм, описываемых функцией /40/, появление которых характерно для приближения самосогласованных фононов /см. /13/. В результате этого суммирования члены четвертого порядка в /33/, определяемые полной вершиной /36/, имеют конечное значение при $T \rightarrow T_R$ и после решения уравнения /39/ с учетом /38/ принимают вид:

$$\frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} u(T) A_\lambda^2 A_\mu^2 + \frac{1}{2} \sum v(T) A_\lambda^4. \quad /41/$$

Здесь введены эффективные вершины изотропного $v(T)$ и анизотропного $u(T)$ взаимодействий:

$$u(T) = \Gamma_2 - \frac{2}{3} \Gamma_2 Q_\lambda(T) \left\{ \frac{3\Gamma_1 - \Gamma_2}{1 + 2Q_\lambda(T) [3\Gamma_1 - \Gamma_2]} + \frac{3\Gamma_1 + 2\Gamma_2}{[1 + 2Q_\lambda(T) (3\Gamma_1 - \Gamma_2)] [1 + 2Q_\lambda(T) (3\Gamma_1 + 2\Gamma_2)]} \right\}, \quad /42/$$

$$v(T) = \Gamma_1 - \Gamma_2 - \frac{2}{3} Q_\lambda(T) \cdot \frac{(3\Gamma_1 - \Gamma_2)^2}{1 + 2Q_\lambda(T) [3\Gamma_1 - \Gamma_2]}. \quad /43/$$

Рассмотрим более подробно функцию $Q_\lambda(T)$ /40/ в приближении /4/ для спектра фононов. Интегрирование в /40/ дает следующую оценку для расходящегося при $r = (T/T_R - 1) \rightarrow 0$ члена:

$$Q_\lambda(T) = \frac{T a^3}{(2\pi)^2} \int \frac{dx}{[s_2 - (s_2 - s_1)x^2]^{3/2}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{r}} \operatorname{arctg} \frac{k_0 \sqrt{s_2 - (s_2 - s_1)x^2}}{\sqrt{r}} \quad /44/$$

где $r = |\omega_R^2| r$. Для дальнейшей оценки интеграла по угловой переменной $x = \cos \theta$ рассмотрим две области температур /14/:

а/ $T \sim T_{2D}$, где $s_1 k_0^2 < |\omega_R^2| r \ll s_2 k_0^2$,

б/ $T \sim T_{3D}$, где $|\omega_R^2| r \ll s_1 k_0^2$.

В первой области для оценки можно положить $\operatorname{arctg}(z/\sqrt{r}) \approx (z/\sqrt{r})$, а во второй: $\operatorname{arctg}(z/\sqrt{r}) \approx \pi/2$. Подставляя $T \approx T_R$ из /19/, для корреляционного параметра в области квазидвухмерных корреляций $T \sim T_{2D}$ получаем:

$$\xi_2(r) \approx \tilde{\Gamma} Q_\lambda(T) \approx \frac{\tilde{\Gamma} T_R}{\Omega_0^2} \cdot \frac{1}{2r} \approx \frac{1}{4r}. \quad /45/$$

В области трехмерных корреляций, $T \sim T_{2D}$, находим:

$$\xi_3(r) = \tilde{\Gamma} Q_\lambda(T) = \frac{\tilde{\Gamma} T_R}{8\pi \omega_D^2 |\omega_R^2|} \cdot \frac{1}{R_2^2 R_1 \sqrt{r}}. \quad /46/$$

где введены безразмерные радиусы взаимодействия R_1 и R_2 : $s_2^2 = \omega_D^2 a^2 R_2^2$, $R_1/R_2 = \sqrt{s_1/s_2}$. Следовательно, область сильных корреляционных эффектов $\xi(T) \sim 1$, в случае анизотропного спектра $s_1 \ll s_2$, состоит из области квазидвухмерных корреляций, согласно /45/ $r_{2D} \leq 0,2$, и узкой области трехмерных корреляций, согласно /46/ $r_{3D} \leq 10^{-8}$. Область квазидвухмерных корреляций хорошо наблюдается в KMnF_3 по рассеянию рентгеновских лучей при $T - T_R \leq 40 \text{ K}$ /15/. Область трехмерных корреляционных эффектов в KMnF_3 не достигается, т.к. происходит ФП первого рода: $T_0 - T_R \approx 0,5 \text{ K}$.

Полученные оценки для $Q_\lambda(T)$ позволяют рассмотреть предельное поведение членов четвертого порядка в /41/. Поскольку при $T \rightarrow T_R$ согласно /44/, $Q_\lambda(T) \rightarrow \infty$, то вершины /42/ и /43/ имеют предельное значение

$$u(T \rightarrow T_R) = \Gamma_2 - \frac{1}{3} \Gamma_2 = \frac{2}{3} \cdot \Gamma_2, \quad /47/$$

$$v(T \rightarrow T_R) = \Gamma_1 - \Gamma_2 - \frac{1}{3} \cdot (3\Gamma_1 - \Gamma_2) = -\frac{2}{3} \Gamma_2.$$

Поэтому в принятом приближении самосогласованных фононов ФП при $T \rightarrow T_R$ оказывается переходом 1-го рода: $u + v \rightarrow 0$ ($u + v < 0$) с устойчивой тетрагональной фазой, $v < 0$. Интересно отметить, что если затравочное изотропное взаимодействие $u_0 = \Gamma_2 = 0$ в /42/, то и $u(T) = 0$, в то время как при $v_0 = \Gamma_1 - \Gamma_2 = 0$ получаем из /40/ $v(T) < 0$.

Более подробно критическое поведение систем с анизотропным спектром фононов при структурных ФП исследуется в работе /12/, где учитываются также более сложные, чем в приближении самосогласованных фононов, скелетные диаграммы. Полученные же в этом разделе результаты качественно согласуются с работой /12/ и показывают, что приближение самосогласованных фононов при вычислении свободной энергии дает более точную картину ФП в кристаллах с анизотропным спектром мягкой моды, чем приближение молекулярного поля типа /2/.

Разложение для свободной энергии /33/ позволяет также провести сравнение микроскопической теории с феноменологическим подходом, принятым в ряде работ при описании структурных и магнитных ФП в KMnF_3 /см. /10,16,17/. Считая в разложении /33/ параметры C_λ , B_λ и $e_{\alpha\beta}$ независимыми переменными, на основе формул /34/ и /37/ получаем:

$$\begin{aligned} f(T, A_\lambda, C_\lambda, B_\lambda, e_{\alpha\beta}) = & f_0(T, A_\lambda=0, C_\lambda, B_\lambda, e_{\alpha\beta}) + \\ & + \frac{1}{2} |\omega_R^2| \left(\frac{T}{T_0} - 1 \right) \sum_\lambda A_\lambda^2 + (\alpha + 4\beta) \sum_\lambda e_{\lambda\lambda} A_\lambda^2 + \\ & + (\alpha - 2\beta) \sum_{\lambda \neq \mu} A_\lambda^2 e_{\lambda\mu} + 2k_{12} \sum_\lambda A_\lambda^2 B_\lambda^2 + \\ & + (k_{11} + k_{13}) \sum_{\lambda \neq \mu} A_\lambda^2 B_\mu^2 - \sum_{\lambda \neq \mu} A_\lambda A_\mu (2g_{66} e_{\lambda\mu} + 2k_{66} B_\lambda B_\mu) + \\ & + \frac{\Gamma_1}{2} \sum_\lambda A_\lambda^4 + \frac{\Gamma_2}{2} \sum_{\lambda \neq \mu} A_\lambda^2 A_\mu^2 + 3\Gamma_1 \sum_\lambda A_\lambda^2 C_\lambda^2 + \\ & + \Gamma_2 \sum_{\lambda \neq \mu} A_\lambda^2 C_\mu^2. \end{aligned} \quad /48/$$

Здесь мы опустили флуктуационные поправки $Q_\lambda(T)$ в /41/ и ввели, согласно /16/, /20/, температуру перехода T_R^0 без учета деформации /15/: $D(T_R^0) = |\omega_R^2| / (8\Gamma_1 + 4\Gamma_2)$. Очевидно, что при $T=0$ в классическом приближении разложение /48/ совпадает с выражением E_0 /15/ в /12/ для статической части энергии системы, зависящей от параметров порядка A_λ , C_λ , B_λ и деформации $e_{\alpha\beta}$. Сопоставляя /48/, а также E_0 /15/ в /2/ с разложением свободной энергии, полученным при феноменологическом подходе в работах /16,17/ и др., мы можем определить подгоночные параметры феноменологической теории и сделать более определенные предсказания о характере фазовых переходов. В то же время необходимо подчеркнуть, что феноменологическое разложение свободной энергии по параметру порядка может быть оправдано лишь вблизи одного из последовательности фазовых переходов /т.е. вблизи определенной температуры: T_R , T_M или

T_N /, для нескольких параметров порядка во всей области температур оно представляется малообоснованным. Прямой расчет свободной энергии на основе микроскопической модели, проведенный в /2/, в этом случае обеспечивает более точное описание фазовых переходов.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

В настоящей работе на основе приближенного вычисления корреляционной функции /3/ рассмотрена самосогласованная система уравнений для параметров порядка A_λ и C_λ , описывающих структурные переходы в точках R и M соответственно.

Для первого структурного перехода в точке R получена оценка температуры перехода T_R /16/ /или /19// и исследованы флуктуационные эффекты при $T \rightarrow T_R$ на основе разложения /33/ свободной энергии по параметру порядка A_λ . В отличие от феноменологического подхода /16/ и приближения среднего поля /2/ для корреляционных функций, принятого в работах /3-5/, метод самосогласованных фононов позволяет оценить критическую область температур для квазидвухмерных /45/ и трехмерных /46/ корреляций, которые важны в кристалле KMnF_3 .

При исследовании второго структурного перехода в точке M показано, что согласно /26/, /27/ ФП должен быть переходом 1-го рода со скачком параметра порядка C_λ . Определение температуры этого перехода T_M возможно лишь при вычислении свободных энергий фаз R и M и в настоящей работе не приводится. Наблюдаемая в эксперименте /9/ фаза R+M в KMnF_3 , возможно, обусловлена наличием дополнительного взаимодействия мод R_{25} и M_3 со смещением ионов K вдоль оси вращения октаэдров MnF_6 , которое в данной модели не рассматривается.

Одним из наиболее важных результатов развитой микроскопической теории является возможность вычисления свободной энергии системы при небольшом числе микроскопических параметров, что позволяет, в частности, приближенно определить подгоночные параметры в феноменологической теории /см. /16,17/. Проведение численных расчетов на основе развитой теории и обобщение ее при учете взаимодействия мод R_{25} и M_3 с другими модами позволит в дальнейшем дать более детальное описание последовательности структурных переходов. Магнитные переходы и их взаимодействие со структурными ФП рассмотрены в следующей работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Конвент Х., Плакида Н.М. ОИЯИ, P17-82-219, Дубна, 1982.
2. Конвент Х., Плакида Н.М. ОИЯИ, P17-82-220, Дубна, 1982.
3. Pytte E., Feder J. Phys.Rev., 1969, 187, p.1077.
4. Feder J., Pytte E. Phys.Rev.B, 1970, 1, p.4803.
5. Feder J. In: Structural Phase Transitions and Soft Modes (eds. E.J.Samuelsen, E.Anderson, J.Feder), Universiteitsforlaget, Oslo, 1971, p.171.
6. Rousseau M., Nouet J., Almairac R. J.Physique, 1977, 38, p.1423.
7. Gesi K., Axe J.D., Shirane G., Lenz A. Phys.Rev. B, 1972, 5, p.1933.
8. Shapiro S.M., Axe J.D., Shirane G., Riste T. Phys.Rev. B, 1972, 6, p.4332.
9. Hidaka M. J.Phys.Soc.Japan, 1975, 39, p.180.
10. Александров К.С., и др. Фазовые переходы в кристаллах галоидных соединений АВХ₃, Наука, Новосибирск, 1981.
11. Aharony A., Ferroelectrics 1980, 24, p.313.
12. Nattermann T. J.Phys.C: Solid State Phys., 1976, 9, p.3337.
13. Plakida N.M., Siklòs T. Acta Phys.Hung., 1978, 45, p.37.
14. Schwabl F. Z.Physik, 1972, 254, p.57; Phys.Rev. B, 1973, 7, p.2039.
15. Comès R., Denoyer F., Deschamps L., Lambert M. Phys.Lett. A, 1971, 34, p.65.
16. Зиненко В.И. ФТТ, 1975, 17, с.1064.
17. Изюмов Ю.А., Кассан-оглы Ф.А., Найш В.Е. ФММ, 1981, 51, с.500.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 июня 1982 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

D13-11182	Труды IX Международного симпозиума по ядерной электронике. Варна, 1977.	5 р. 00 к.
D17-11490	Труды Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1977.	6 р. 00 к.
D6-11574	Сборник аннотаций XV совещания по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1978.	2 р. 50 к.
D3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
D13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
D1,2-12036	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
D1,2-12450	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
D1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
D11-80-13	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
D4-80-2/1	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D4-80-385	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
D4-81-543	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
D1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Конвент Х., Плакида Н.М. Структурные фазовые переходы в микроскопической модели кристалла KMnF_3 P17-82-438

На основе микроскопической теории, развитой ранее авторами, исследованы структурные фазовые переходы, обусловленные модами симметрии R_{25} и M_3 , в кристалле KMnF_3 . Для перехода в точке R получено разложение свободной энергии, найдена температура перехода T_R и исследованы флуктуационные /двух- и трехмерные/ эффекты в области $T \geq T_R$. Показано, что в рамках принятой модели переход в точке M при температуре $T_M < T_R$ должен быть первого рода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Konwent H., Plakida N.M. Structural Phase Transitions in a Microscopic Model of KMnF_3 Crystal P17-82-438

In the framework of the theory, recently developed by the authors, the structural phase transitions induced by the normal mode of R_{25} and M_3 symmetries in KMnF_3 crystal are investigated. For the transition at the R-point of BZ, the Landau expansion for the free energy is obtained. The temperature of phase transition T_R is estimated and the critical fluctuations (two and three dimensional) at $T \geq T_R$ are considered. It is indicated that transition from the R-phase to the M- or R+M phases at $T_M < T_R$ should be of the first order.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.