

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

5428/82

15/41-82

P17-82-498

И.М.Рангелов

ПРОЯВЛЕНИЕ МЯГКОЙ МОДЫ
ПРИ ПАЙЕРЛСОВСКОМ СТРУКТУРНОМ ПЕРЕХОДЕ

1982

Равновесное состояние системы, содержащее одну или несколько макроскопически-гомогенных областей, называется фазой. Равновесные состояния описываются с помощью термодинамической функции, зависящей частично от конечного числа параметров. Сингулярность соответствует изменению в фазе структуры при фазовом переходе /ФП/. Чтобы понять физическую основу универсальности ФП, необходимо выявить источники сингулярности величин в критической области. Тогда все явления, происходящие при ФП, могут быть описаны в одних и тех же терминах. ФП обычно сопровождаются изменением симметрии. При ФП I рода никаких требований на симметрии не накладывается, необходимо только равенство свободных энергий обеих фаз в точке T_c . Все ФП II рода связаны с изменением симметрии системы. Так как симметрия является качественной характеристикой, то новый элемент симметрии, возникающий в точке T_c ФП, может появиться при бесконечно малом изменении системы. Поэтому ФП II рода возникают при определенных значениях термодинамических параметров.

Для математического описания и количественного исследования ФП Ландау предложил ввести параметр порядка /ПП/, принимающий различные значения в соответствующих фазах. ПП позволяет судить о различии в конфигурациях менее симметричной фазы по сравнению с конфигурациями в симметричной фазе. В отсутствие внешнего поля ПП η в более симметричной фазе принимает нулевые значения, а в менее симметричной фазе - положительные или отрицательные.

Изменение симметрии при ФП сопровождается изменением термодинамического потенциала. В силу непрерывности ФП II рода ПП η должен принимать сколь угодно малые значения вблизи T_c . Рассматривая окрестность T_c ФП II рода, Ландау разложил термодинамический потенциал в ряд по степеням ПП:

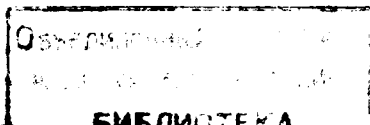
$$\Phi(P, T, \eta) = \Phi(P, T) + A(P, T)\eta^2/2 + B(P, T)\eta^4/4. \quad /1/$$

Предполагается^{/1/}, что функция $A(P, T)$ не имеет особенностей в T_c и поэтому вблизи нее разложима по целым степеням расстояния $T - T_c$:

$$A(P, T) = \tilde{A}(P, T_c)(T - T_c). \quad /2/$$

Коэффициент $B(P, T)$ заменяется на $B(P) = B(P, T_c) > 0$. Поэтому имеем

$$\Phi(P, T, \eta) = \Phi(P, T) + \tilde{A}(P, T_c)(T - T_c)\eta^2/2 + B(P, T_c)\eta^4/4. \quad /3/$$



Равновесное значение η_0 определяется из условия

$$\frac{\delta\Phi(P, T, \eta)}{\delta\eta} = 0. \quad /4/$$

До сих пор пренебрегали зависимостью η от координаты \mathbf{x} . Однако η является флуктуирующей величиной и изменяется от точки к точке. Вблизи T_c возникают кластеры объемом намного больше размера элементарной ячейки, в которых $\eta(\mathbf{x})$ имеет различное значение. Поэтому вместо /3/ имеет место представление Гинзбурга-Ландау

$$\Phi(P, T, \eta) = \int [\Phi(P, T) + \frac{\tilde{A}}{2}(T - T_c)\eta^2 + \frac{B}{4}\eta^4 + \frac{\kappa a^2}{2}(\frac{\partial\eta}{\partial\mathbf{x}})^2] \frac{d\mathbf{x}}{a}. \quad /5/$$

Минимум термодинамического потенциала /5/ обеспечивается вариационным уравнением Эйлера:

$$\frac{\delta\Phi(P, T, \eta)}{\delta\eta} = -\kappa a^2 \frac{\partial^2\eta}{\partial\mathbf{x}^2}. \quad /6/$$

Вероятность $\tilde{W}(\eta)$ заданной конфигурации поля $\eta(\mathbf{x})$ при заданных P и T в общей теории термодинамических флуктуаций описывается выражением

$$\tilde{W}(\eta) = Z^{-1} \exp(-\frac{\Phi(\eta)}{k_0 T}). \quad /7/$$

Здесь $\Phi(\eta)$ - термодинамический потенциал флуктуирующего поля $\eta(\mathbf{x})$, а Z - статистическая сумма:

$$Z = \sum_{\eta} \exp(-\frac{\Phi(\eta)}{k_0 T}). \quad /8/$$

Согласно /7/ наиболее вероятное значение $\eta_0(\mathbf{x})$ определяется условием $\Phi(P, T, \eta_0) = \min$, т.е. равенствами /4/ и /6/. Предполагается, что вблизи T_c релаксация η является самым медленным процессом. Поэтому все быстрые процессы проходят в степени свободы успевают прийти в равновесие за время, в течение которого η практически не изменяется. Поэтому имеет смысл говорить о заданном поле η , не заботясь о других координатах системы. Экспериментально известно, что для перехода системы из неравновесного состояния в равновесное, при приближении к T_c требуется все больше и больше времени. В термодинамической теории критического затухания сопряженная η термодинамическая сила $F(\eta)$, приводящая к его равновесному значению η_0 , определяется равенством /3-7/

$$F(\eta) = -\frac{\delta\Phi(\eta)}{\delta\eta}. \quad /9/$$

В термодинамике необратимых процессов скорость изменения η со временем дается формулой /7-9/

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = -L_0 \frac{\delta\Phi(\eta)}{\delta\eta}, \quad /10/$$

где L_0 - кинетический коэффициент Онзагера. С помощью /6/ и /10/ имеем /10/:

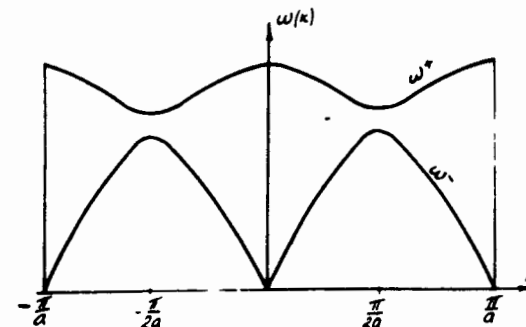
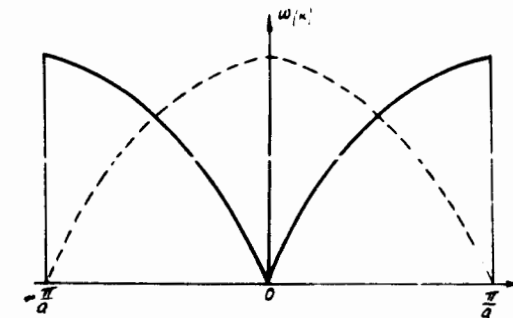
$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = L_0 \kappa a^2 \frac{\partial^2\eta}{\partial\mathbf{x}^2} - L_0 \tilde{A}(T - T_c)\eta - L_0 B\eta^3. \quad /11/$$

Если добавим флуктуирующую силу $\phi(\mathbf{x}, t)$ к правой части уравнения движения /11/, то получим уравнение Ланжевена для η . Когда флуктуирующие силы $\phi(\mathbf{x}, t)$ гауссовы и марковские с равными нулю средними значениями $\langle\phi(\mathbf{x}, t)\rangle$, а

$$\langle\phi(\mathbf{x}, t)\phi(\mathbf{x}', t')\rangle = Q\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t'), \quad /12/$$

тогда уравнение Ланжевена эквивалентно уравнениям Фокера-Планка.

Известно /11/, что при пайерлсовском структурном ФП /ПСФП/ решетка искажается /рис.1/. Понижение симметрии кристаллического потенциала, в котором движутся КВЭ, изменяет их энергетический спектр /рис.2/.



А изменение расстояний и сил взаимодействия между ближайшими соседями изменяет энергетический спектр фононов /рис.3/. До сих пор /12-20/ ПСФП связывался с мягкой модой при $q=2 K_F$. Однако такая теоретическая интерпретация не всегда удовлетворительна. Поэтому необходимо понять, откуда появляется и как проявляется мягкая мода при ПСФП, чтобы правильно описать физику происходящих при нем явлений.

При искажении удвоением периода кристаллической решетки потенциал, в котором движутся КВЭ, и их

Рис.1. Искажение решетки при ПСФП.

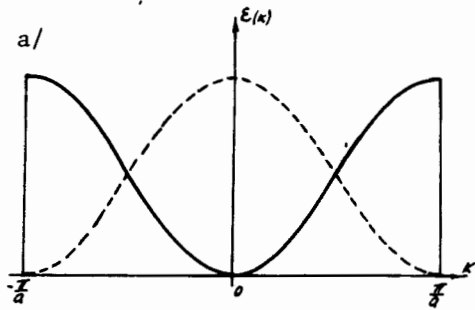


Рис.2. Изменение энергетического спектра КВЭ при ПСФП.

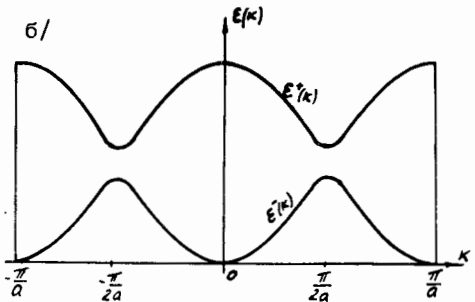
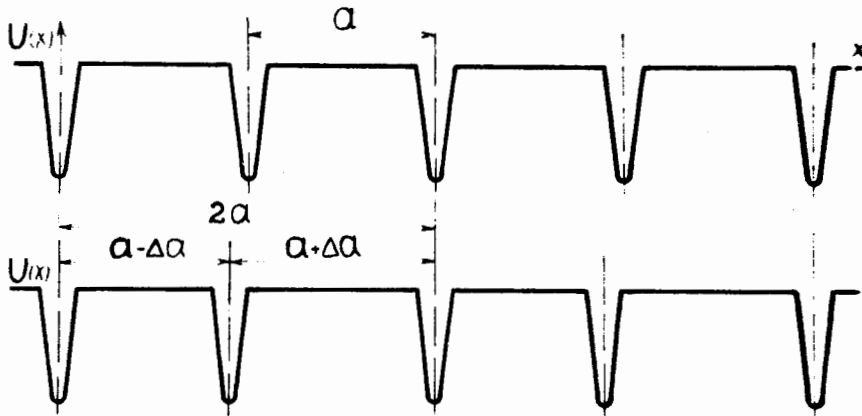


Рис.3. Изменение энергетического спектра фононов при ПСФП.



энергетический спектр $\epsilon(k)$ изменяются. Например, в двухзонном приближении вместо $\epsilon(k)$ имеем

$$E(k) = \frac{(\epsilon(k) + \epsilon(k+q))}{2} \pm \sqrt{\frac{(\epsilon(k) - \epsilon(k+q))^2}{4} + \eta^2 |W|^2}. \quad /13/$$

В случае удвоения периода решетки самое большое изменение энергетического спектра КВЭ происходит в середине зоны при $K = q/2$. В одновалентном металле зона проводимости занята КВЭ наполовину. Так как полуширины запрещенной щели $V = \eta W$ намного меньше полуширины зоны проводимости J , то область существенного изменения энергетического спектра КВЭ при ПСФП намного меньше зоны проводимости. Поэтому с достаточной точностью при вычислении изменения термодинамического потенциала КВЭ ради упрощения математических выкладок можно пользоваться разложением их энергетического спектра /13/ и пренебрегать изменением их плотности состояний $N(\epsilon)$. Таким образом, получаем

$$\Omega(\eta, T) - \Omega(T) = - (k_0 T)^2 N(\epsilon_F) \left[\int_0^{X_0} \ln \left(\frac{1+e^{\sqrt{x^2+\sigma^2}}}{1+e^x} \right) dx + \int_0^{X_0} \ln \left(\frac{1+e^{-\sqrt{x^2+\sigma^2}}}{1+e^{-x}} \right) dx \right], \quad /14/$$

где $X_0 = J/k_0 T$, а $\sigma = \eta W/k_0 T$. После интегрирования по частям имеем:

$$\Omega(\eta, T) - \Omega(T) = -JN(\epsilon_F) k_0 T \left[\ln \left(\frac{1+e^{\sqrt{X_0^2+\sigma^2}}}{1+e^{X_0}} \right) + \ln \left(\frac{1+e^{-\sqrt{X_0^2+\sigma^2}}}{1+e^{-X_0}} \right) \right] + N(\epsilon_F) (k_0 T)^2 \int_0^{X_0} \left[\frac{x^2}{\sqrt{x^2+\sigma^2}} \operatorname{th} \left(\frac{\sqrt{x^2+\sigma^2}}{2} \right) - \frac{x^2}{x} \operatorname{th} \left(\frac{x}{2} \right) \right] dx. \quad /15/$$

Последний член в /15/ можно преобразовать с помощью равенства /22/:

$$\frac{1}{x} \operatorname{th} \left(\frac{x}{2} \right) = 4 \sum_{n=0}^{\infty} [\pi^2 (2n+1)^2 + x^2]^{-1}. \quad /16/$$

Действительно, с помощью /16/ получаем равенство

$$\int_0^{X_0} \left[\frac{x^2}{\sqrt{x^2+\sigma^2}} \operatorname{th} \left(\frac{\sqrt{x^2+\sigma^2}}{2} \right) - x \operatorname{th} \left(\frac{x}{2} \right) \right] dx = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{X_0} \left(\frac{4x^2}{\pi^2 (2n+1)^2 + x^2 + \sigma^2} - \frac{4x^2}{\pi^2 (2n+1)^2 + x^2} \right) dx. \quad /17/$$

В критической области, где $k_0 T \gg \eta W$, имеет место неравенство $\sigma \ll \pi$. Поэтому в /17/ можно сделать разложение по степеням $\frac{\sigma^2}{\pi^2 (2n+1)^2 + x^2}$. Тогда с точностью до σ^4 из /17/ можно получить соотношение

$$[17] = -4\sigma^2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{X_0} \frac{x^2 dx}{(\pi^2 (2n+1)^2 + x^2)^2} + 4\sigma^4 \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{X_0} \frac{x^2 dx}{(\pi^2 (2n+1)^2 + x^2)^3} \quad /18a/$$

которое после интегрирования и суммирования принимает вид

$$[17] = -\frac{\sigma^2}{2} - \frac{\sigma^2}{2} \ln\left(\frac{2\gamma X_0}{\pi}\right) - \frac{\sigma^4}{8X_0^2} + \frac{7\xi(3)\sigma^4}{32\pi^2 X_0^2}. \quad /186/$$

Здесь $\ln \gamma = C_0 = 0,5772$ - постоянная Эйлера, а $\xi(3) = 1,202$ - дзета функция Римана. После подстановки /18/ в /15/ получаем:

$$\Omega(T, \eta) - \Omega(T) = -\frac{N(\epsilon_F) W^2 \eta^2}{2} \ln\left(\frac{2\gamma J}{\pi k_0 T}\right) + \frac{N(\epsilon_F) 7\xi(3) W^4 \eta^4}{32\pi^2 J^2}. \quad /19/$$

Согласно /19/ с понижением температуры энергетическая выгода искажения удвоением периода решетки в одновалентном металле из-за изменения энергетического спектра КВЭ увеличивается. Увеличение упругой энергии решетки при ее статическом искажении

$$\Delta E = NM\omega_0^2 \eta^2 / 2 \quad /20/$$

должно компенсироваться уменьшением термодинамического потенциала КВЭ /19/. Поэтому температура ПСФП T_c должна определяться равенством

$$NM\omega_0^2 = N(\epsilon_F) W^2 \ln\left(\frac{2\gamma J}{\pi k_0 T_c}\right). \quad /21/$$

С помощью /21/ логарифмический член в /19/ принимает следующий вид:

$$N(\epsilon_F) W^2 \eta^2 \ln\left(\frac{2\gamma J}{\pi k_0 T}\right) = NM\omega_0^2 \eta^2 + N(\epsilon_F) W^2 \eta^2 \ln\left(\frac{T_c}{T}\right). \quad /22/$$

Сумма выражений /19/ и /20/ благодаря /22/ показывает, что полное изменение термодинамического потенциала КВЭ и упругой энергии решетки при искажении удвоением ее периода определяется формулой

$$\Omega(\eta, T) - \Omega(T) + \Delta E = \frac{N(\epsilon_F) W^2 \eta^2}{2} \ln\left(\frac{T_c}{T}\right) + \frac{7\xi(3) N(\epsilon_F) W^4 \eta^4}{32\pi^2 J^2}. \quad /23/$$

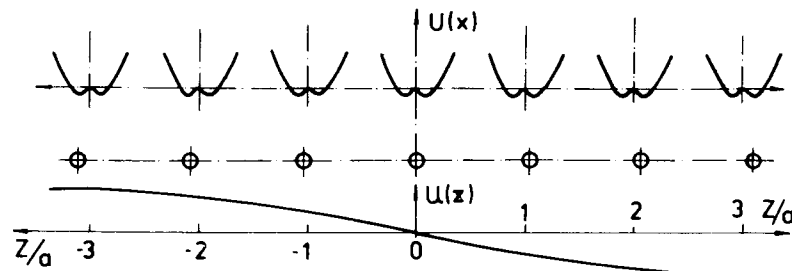


Рис.4. Цепочка локальных потенциалов и искажение решетки возбуждением доменной стенки /кинка/ при $T < T_c$.

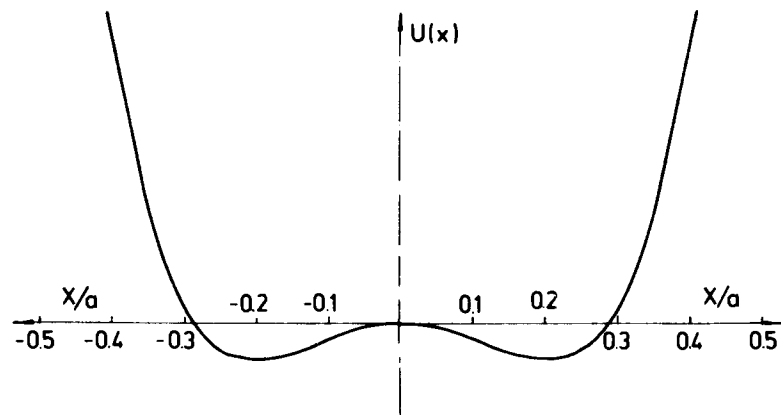


Рис.5. Двухямный локальный потенциал пружинок, связывающих каждый ион с его равновесным положением в симметричной фазе при $T < T_c$.

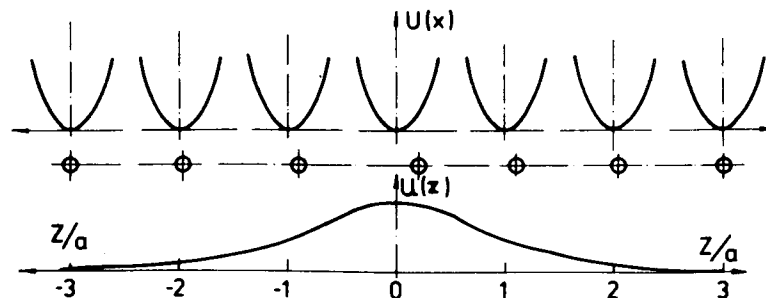


Рис.6. Цепочка локальных потенциалов и искажение решетки колоколообразным возбуждением при $T > T_c$.

Выражение /23/ можно интерпретировать как локальный /закрепляющий, захватывающий/ потенциал, в котором движутся связанные между собой пружинками ионы /рис.4/. Из /23/ следует, что при $T < T_c$ локальный потенциал имеет двухминимумный вид /рис.5/. А при $T > T_c$ связанные между собой ионы движутся в одноямных потенциалах /рис.6/. Двухямный локальный потенциал отражает инвариантность /23/ относительно смены знака Π на $-\eta$, т.е. относительно возможности уменьшения расстояния между n -ым и $(n+1)$ -ым ионами и увеличения расстояния между n -ым и $(n-1)$ -ым ионами и, наоборот, уменьшения расстояния между n -ым и $(n-1)$ -ым ионами и увеличения расстояния между n -ым и $(n+1)$ -ым ионами. Поэтому рис.5 можно получить из рис.7, описывающего $\Delta\Omega + \Delta E$ /23/ при $T < T_c$, зеркальным отображением.

Мы собираемся описать нарушение /дефекты или флуктуацию/ η . Для этой цели мы должны учесть упругую энергию связывающих соседних ионов пружинки:

$$\Delta E'_{\text{уп.}} = \sum_{i=1}^N \frac{M\omega_0^2}{2} (\eta_{i+1} - \eta_i)^2 \quad /24/$$

Нельзя забывать и кинетическую энергию флуктуирующих ионов:

$$E_{\text{кин.}} = \sum_{i=1}^N \frac{M}{2} \left(\frac{\partial \eta_i}{\partial t} \right)^2 \quad /25/$$

Тогда полное изменение термодинамического потенциала //23/+ /24/+ /25// для флуктуирующего Π η в одновалентном металле имеет вид

$$\Delta\Phi_n = \sum_{i=1}^N \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\partial \eta_i}{\partial t} \right)^2 + \frac{M\omega_0^2}{2} (\eta_{i+1} - \eta_i)^2 + \frac{A(T)}{2} \eta_i^2 + \frac{B}{4} \eta_i^4 \right] \quad /26/$$

В /26/ приняты следующие обозначения:

$$A(T) = \frac{N(\epsilon_F)W^2}{2} \ln\left(\frac{T}{T_c}\right); \quad B = \frac{7\xi(3)N(\epsilon_F)W^4}{8\pi^2 N J^2} \quad /27a, б/$$

По определению Π η является макроскопической величиной, и поэтому характерный размер, на котором он изменяется существенно, должен быть велик по сравнению с расстоянием между соседними ионами. Так как переменная η_i слабо меняется на протяжении одного звена $(x_{i+1} - x_i)$, то в /26/ можно перейти к континуальному пределу, положив

$$\sum \rightarrow \int \frac{dx}{a} \quad \text{и} \quad (\eta_{i+1} - \eta_i)^2 \rightarrow a^2 \left(\frac{\partial \eta_i}{\partial x} \right)^2 \quad /28a, б/$$

Тогда вместо /26/ получаем:

$$\Delta\Phi_n = \int_0^L \left[M \left(\frac{\partial \eta}{\partial t} \right)^2 + M\omega_0^2 a^2 \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + A(T)\eta^2 + B\eta^4/2 \right] \frac{dx}{2a} \quad /29/$$

В этом пределе уравнение движения Эйлера-Лагранжа имеет вид

$$M \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = M\omega_0^2 a^2 \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} - A(T)\eta - B\eta^3 \quad /30/$$

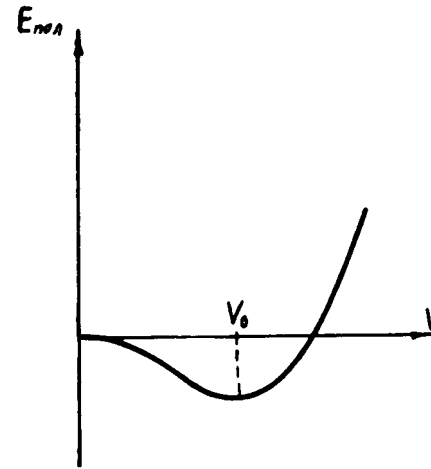


Рис.7. Зависимость полной энергии КВЭ и фононов от искажения решетки.

Сравнение равенств /5/ и /29/ обнаруживает поразительное сходство между ними. Только в /5/ отсутствует член кинетической энергии /25/. А сравнение /6/ с /30/ показывает, что в релаксационной теории с левой стороны уравнения движения /6/ Π η стоит первая производная по времени $\frac{\partial \eta}{\partial t}$, а в настоящей теории мягкой моды с левой стороны уравнения движения /30/ стоит вторая производная по времени $\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2}$.

Это означает, что в классической термодинамической теории релаксации флуктуация Π η затухает, а в теории мягкой моды изменение Π η происходит в виде нелинейных уединенных волн. Из /27/ видно, что в зависимости от температурной области коэффициент $A(T)$ имеет различные знаки. Поэтому в различных температурных областях изменение Π η в пространстве и времени происходит по-разному.

Начнем исследования /30/ с области $T > T_c$, где оно имеет вид

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = s^2 \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} - a s^2 \eta - \beta s^2 \eta^3 \quad /31a/$$

Хотя уравнение /31a/ уже исследовалось в работе /23/ и в работах /24-31/ других авторов, мы представим здесь некоторые результаты. Начнем с предположения, что зависимость Π η от x и t имеет вид бегущей волны:

$$\eta(x, t) = \eta(x - vt) = \eta(z) \quad /32/$$

При этом предположении для $\eta(z)$ уравнение /31a/ принимает вид

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} = a\rho^2 \eta + \beta \rho^2 \eta^3 \quad /33a/$$

где $\rho^{-2} = (1 - \frac{v^2}{s^2}) = \tilde{\omega}_0^2 / (\tilde{\omega}_0^2 + (sq)^2)$.

После умножения

/33a/ на $\frac{\partial \eta}{\partial z}$ и интегрирования получаем один первый интеграл:

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial z} \right)^2 = C_1 + a\rho^2 \eta^2 + \beta \rho^2 \eta^4 / 2 \quad /34a/$$

Так как флуктуация Π η в области $T > T_c$ на бесконечности должна исчезать / $\eta(\pm\infty) = 0$ / , то условие $\left(\frac{\partial \eta}{\partial z} \right)_{\pm\infty} = 0$ требует

граничного условия $C_1=0$. Поэтому после интегрирования /34а/ получается равенство

$$\int \frac{\eta_0 d\eta}{\eta \sqrt{1+\delta^2\eta^2}} = \sqrt{a} \rho z. \quad /35а/$$

Замена переменной $\eta \approx 1/n$ дает нам возможность получить решение

$$\int \frac{dn}{n_0 \sqrt{n^2 + \delta^2}} = \text{Arsh}\left(\frac{n}{\delta}\right) - \text{Arsh}\left(\frac{n_0}{\delta}\right) = \sqrt{a} \rho z. \quad /36а/$$

В /35а/ и /36а/ использовалось обозначение $\delta^2 = \beta/2a$. С помощью формулы

$$\text{Arsh}(x) - \text{Arsh}(y) = \text{Arsh}(x \sqrt{1+y^2} - y \sqrt{1+x^2}) \quad /37/$$

равенство /36а/ принимает следующий вид:

$$n \sqrt{n_0^2 + \delta^2} - n_0 \sqrt{n^2 + \delta^2} = \delta^2 \text{sh}(\sqrt{a} \rho z). \quad /38а/$$

Если вернемся к старой переменной $\eta = 1/n$, то получим:

$$\sqrt{1 + \delta^2 \eta_0^2} - \sqrt{1 + \delta^2 \eta^2} = \eta \eta_0 \delta^2 \text{sh}(\sqrt{a} \rho z). \quad /39а/$$

После несложных преобразований из /39а/ получается формула

$$\eta = \eta_0 [\text{ch}(\sqrt{a} \rho z) \pm \sqrt{1 + \delta^2 \eta_0^2} \text{sh}(\sqrt{a} \rho z)]^{-1}. \quad /40а/$$

Знаки \pm соответствуют знаку z , а η_0 — это значение η в точке $z=0$. Выражение /40а/ определяет влияние ангармонизма.

Далеко от критической точки T_c , когда $\beta \eta_0^2 \ll 2a \left(\frac{W^2 \eta_0^2}{J^2} \ll \frac{16\pi^2 \ln(\frac{T}{T_c})}{7 \xi(3)}\right)$,

после разложения $\sqrt{1 + \delta^2 \eta_0^2} = 1 + \frac{\delta^2 \eta_0^2}{2}$ получаем:

$$\eta = 2\eta_0 [(e^{\sqrt{a}\rho z} + e^{-\sqrt{a}\rho z}) \pm (e^{\sqrt{a}\rho z} - e^{-\sqrt{a}\rho z}) \pm \delta^2 \eta_0^2 \text{sh}(\sqrt{a} \rho z)]^{-1}. \quad /41/$$

Из /41/ видно, что при $z > 0$ знаменатель принимает вид

$$\left[2e^{\sqrt{a}\rho z} + \frac{\delta^2 \eta_0^2}{2} (e^{\sqrt{a}\rho z} - e^{-\sqrt{a}\rho z}) \right] = \quad /42а/$$

$$= 2e^{\sqrt{a}\rho z} \left[\left(1 + \left(\frac{\delta \eta_0}{2}\right)^2\right) - \left(\frac{\delta \eta_0}{2}\right)^2 e^{-2\sqrt{a}\rho z} \right].$$

А при $z < 0$ из /41/ получается для знаменателя

$$\left[2e^{-\sqrt{a}\rho z} - \frac{\delta^2 \eta_0^2}{2} (e^{\sqrt{a}\rho z} - e^{-\sqrt{a}\rho z}) \right] = \quad /42б/$$

$$= 2e^{-\sqrt{a}\rho z} \left[\left(1 + \left(\frac{\delta \eta_0}{2}\right)^2\right) - \left(\frac{\delta \eta_0}{2}\right)^2 e^{2\sqrt{a}\rho z} \right].$$

Из /42/ видно, что вдали от критической области ангармонизм очень слабо изменяет форму колоколообразного решения в гармоническом приближении

$$\bar{\eta} = \eta_0 e^{-\sqrt{a}\rho |z|}. \quad /43/$$

Однако в критической области, где $\beta \eta_0^2 \gg 2a \left(\frac{W^2 \eta_0^2}{J^2}\right) \gg$

$$\gg \frac{16\pi^2}{7 \xi(3)} \ln\left(\frac{T}{T_c}\right), \quad \text{из /40а/ получаем:} \quad /44/$$

$$\eta = \sqrt{2a} \eta_0 \left[\sqrt{2a} \text{ch}(\sqrt{a} \rho z) \pm \sqrt{\beta} \eta_0 \text{sh}(\sqrt{a} \rho z) \right]^{-1}.$$

Как видно из /44/, вблизи T_c максимум флуктуации III η определяется тоже η_0 . С приближением T к T_c длина затухания /радиус корреляции/

$$\xi = (\sqrt{a} \rho)^{-1} = a \sqrt{1 - v^2/s^2} \left[\frac{N(\epsilon_F) W^2 a^2}{N M s^2} \ln\left(\frac{T}{T_c}\right) \right]^{-1/2} = \quad /45/$$

$$= a \frac{\omega_0}{\sqrt{\omega_0^2 + (sq)^2}} \left[\frac{N(\epsilon_F) W^2}{N \kappa} \ln\left(\frac{T}{T_c}\right) \right]^{-1/2}$$

сильно увеличивается. Поэтому горб колоколообразной кривой /43/ /рис.6/ выпрямляется и III η слабее затухает с расстоянием.

Далеко от центра флуктуации III, где $\delta \eta_0 \text{th}(\sqrt{a} \rho z) \gg 1$, амплитуда $\eta(z)$ уменьшается до значения $\sqrt{2a/\beta} = 1/\delta$, которое тоже зависит от расстояния (T/T_c).

Вернемся к рассмотрению поведения III η ниже точки ИСФП, т.е. при $T < T_c$. Из /27/ следует, что в этой области коэффициент $A(T) < 0$, и поэтому вместо /31а/ имеем:

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = s^2 \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + a s^2 \eta - \beta s^2 \eta^3. \quad /31б/$$

И в этой области остается в силе предположение, что зависимость III η от x и t имеет вид /32/. Тогда в области $T < T_c$ вместо уравнения движения /33а/ имеем:

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2} = -a \rho^2 \eta + \beta \rho^2 \eta^3. \quad /33б/$$

После умножения /33б/ на $\frac{\partial \eta}{\partial z}$ и интегрирования получаем:

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial z}\right)^2 = C_2 - a \rho^2 \eta^2 + \beta \rho^2 \eta^4/2. \quad /34б/$$

Здесь выбор константы интегрирования C_2 уже другой. Так как минимумы локального потенциала /рис.5/ находятся уже не в центре, то на бесконечности III не аннулируется, а принимает свое

максимальное значение $\eta(\pm \infty) = \pm \sqrt{\frac{a}{\beta}}$. А чтобы для $z \rightarrow \pm \infty$

Сравнение /456/ с /55/ дает нам следующую связь:

$$(\eta_q^\circ)^2 = \frac{k_0 T}{\kappa a^2} a \xi_q. \quad /56/$$

Таким образом, используя /52/ и /54/, получаем, что энергия /51a/ одного колоколообразного возбуждения III /40a/ равна энергии температурной флуктуации $k_0 T$. Оказывается, однако, что это не имеет места в области $T < T_c$, где $\eta_0^2 = a/\beta$. Действительно, число возбуждений доменных стенок при $T < T_c$, когда $\hbar\omega(q) \ll k_0 T$, определяется равенством

$$(n_q + \frac{1}{2}) = \frac{1}{2} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega(q)}{2k_0 T} \right) = \frac{k_0 T}{\hbar\omega(q)}. \quad /57/$$

Энергия всех возбуждений доменных стенок равна произведению /57/ на /51b/:

$$E_n = \frac{2\sqrt{2}}{3} \kappa \eta_0^2 \frac{k_0 T}{\hbar\omega_0} = \frac{16\sqrt{2} \pi^2}{21 \xi(3)} \cdot \frac{\kappa a^2 k_0 T J^2}{\hbar\omega_0 W^2 a^2} \ln \left(\frac{T_c}{T} \right). \quad /58/$$

Формула /58/ показывает, что хотя число возбужденных доменных стенок согласно /57/ растет неограниченно при $T \rightarrow T_c$, однако малость их амплитуды η_0 компенсирует эту расходимость. Поэтому их полная энергия /58/ стремится к 0. Это является следствием того, что здесь переход происходит между двумя областями одной фазы, а не между двумя фазами. Именно поэтому амплитуда доменной стенки, связывающей две области одной фазы, ограничена равновесным значением III η_0 в этой фазе.

Итак, мы получили, что изменение III η со временем происходит в виде распространения колоколообразного возбуждения или возбуждения доменной стенки. Это вполне соответствует старой теории, где важнейшей характеристикой статистических свойств поля III является корреляционная функция /10/

$$\langle \eta(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}') \rangle = \langle \eta^2 \rangle \exp \left(-\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{\xi} \right). \quad /59/$$

Понятие "корреляционная" функция означает, что если в точке \mathbf{x} III имеет значение $\eta(\mathbf{x})$, то в точке \mathbf{x}' он может иметь такое же значение $\eta(\mathbf{x}')$ с вероятностью $\langle \eta(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}') \rangle / \langle \eta^2 \rangle$. Но это и есть колоколообразная волна. Поэтому экспоненциальная зависимость III /43/ в линейном приближении совпадает с экспоненциальным затуханием корреляционной функции /59/. Радиус корреляции ξ можно рассматривать как ширину $\Delta \mathbf{x}$ пакета плоских волн $\Delta \mathbf{q}$ колоколообразного возбуждения /43/ и /59/. Так как $\Delta \mathbf{x} \cdot \Delta \mathbf{q} = 1$, то $\Delta \mathbf{q} \sim 1/\Delta \mathbf{x}$ означает, что при $T \rightarrow T_c$, когда $\Delta \mathbf{x} = \xi \rightarrow \infty$, $\Delta \mathbf{q} \sim \frac{1}{\xi} \rightarrow 0$. Поэтому при $T \rightarrow T_c$ начинает возбуждаться только одна мода с $q=0$, т.е. пакет становится все шире и шире. Корреляционная длина ξ в теории Ландау совпадает с корреляционной длиной /45/ в нашей модели. Кроме того, среднее значение от η^2

$$\langle \eta^2 \rangle = (k_0 T a \xi) (2\kappa a^2)^{-1}, \quad /60/$$

вычисленное для стационарного распределения, совпадает с $(\eta_q^\circ)^2$ из формулы /56/ с точностью до множителя 1/2, как и должно быть в гауссовском приближении. Фурье-компоненту корреляционной функции

$$\mathcal{G}(q) = \frac{1}{N\Omega_0} \int e^{iq(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \langle \eta(\mathbf{x}_1) \eta(\mathbf{x}_2) \rangle d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \quad /61/$$

в одномерном случае можно вычислить с помощью /59/. Тогда получаем:

$$\mathcal{G}(q) = \langle \eta^2 \rangle \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{|x|}{\xi}} e^{iqx} dx = \frac{2\langle \eta^2 \rangle \xi}{1 + (q\xi)^2}. \quad /62/$$

Подстановка $\langle \eta^2 \rangle$ из /60/ в /62/ дает нам:

$$\mathcal{G}(q) = (k_0 T a \xi^2) (\kappa a^2)^{-1} (1 + (\xi q)^2)^{-1}. \quad /63/$$

Тогда для восприимчивости $\chi(T)$ получаем следующее выражение:

$$\chi(T) = k_0 T \mathcal{G}(0) = (k_0 T)^2 (a \xi)^2 (\kappa a^2)^{-1}. \quad /64/$$

Наконец, подстановка ξ из /45/ в /64/ дает:

$$\chi(T) = \left(\frac{k_0 T}{W a} \right)^2 \frac{N}{J N(\epsilon_F)} \frac{J a^3}{\ln(T/T_c)}. \quad /65/$$

Известно /32/, что во многих случаях вклады различных нелинейных нормальных мод в гамильтониан и в другие интегралы движения полностью разделяются. Поэтому для построения статистической механики в присутствии линейных фононов и нелинейных возбуждений III η в первом приближении можно пользоваться моделью идеального газа, пренебрегая всеми взаимодействиями. Однако в нелинейной системе суперпозиция невозможна, и поэтому нелинейные возбуждения III и линейные фононы нельзя считать независимыми. Можно только допустить, что нелинейные возбуждения III из-за малости плотности и экспоненциального затухания не взаимодействуют между собой. Однако необходимо учесть поправку к свободной энергии линейных фононов вследствие сдвига их фаз в присутствии нелинейных возбуждений III. Действительно, так как кинк дает чисто безотражательный потенциал взаимодействия с линейными фононами, то он не меняет их дисперсии. Однако это взаимодействие приводит к асимптотическому сдвигу фазы фонона, что, со своей стороны, вызывает изменение плотности фононных состояний, не затрагивая при этом плотности самих кинков. Но по мере приближения T к T_c число и размеры нелинейных возбуждений III растут, что приводит к появлению сильного взаимодействия между ними. Именно это лишает теоретика возможности рассматривать нелинейные возбуждения III в узкой области вблизи T_c как идеальный газ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д. ЖЭТФ, 1937, 7, №1, с. 19.
2. Ландау Л.Д., Гинзбург В.Л. ЖЭТФ, 1950, 20, №12, с. 1064.
3. Van Hove L. Phys.Rev., 1954, 95, No.6, p. 1374.
4. Ландау Л.Д., Халатников И.М. ДАН СССР, 1954, 96, №6, с. 469.
5. Debye P. Phys.Rev.Lett., 1965, 14, No.6, p. 783.
6. Де Гроот С., Мазур Р. Неравновесная термодинамика. "Мир", М., 1964.
7. Ма Ш. Современная теория критических явлений. "Мир", М., 1980.
8. Кавасаки К. В сб.: Квантовая теория поля и физика фазовых переходов. "Мир", М., 1975, с. 101-148.
9. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов, "Мир", М., 1975.
10. Хакен Г. Синергетика, "Мир", М., 1980.
11. Пайерлс Р. Квантовая теория твердых тел. ИЛ, М., 1956.
12. Афанасьев А.М., Каган Ю. ЖЭТФ, 1962, 43, №4, с. 1456.
13. Овчинников А.А. ФТТ, 1965, 7, №4, с. 832.
14. Булаевский Л.Н. УФН, 1975, 115, №2, с. 263.
15. Walker M.B. Can.Jour.Physics, 1978, 56, No.1, p. 127.
16. Schulz M.J. Phys.Rev., 1978, B18, No.10, p. 5756.
17. Giuliani G., Tosatti E. Nuovo Cimento, 1978, B47, No.2, p.135.
18. Bjelic A., Saub R., Barisic S. Nuovo Cimento, 1974, B23, No.1, p. 101.
19. Tombs G.A. Physical Reports, 1978, 40, No.3, p. 108.
20. Friend R.H., Jerome J. Jour.Physics, 1979, C12, No.8, p.1441.
21. Архипов Р.Г., Рангелов Й.М. ФТТ, 1970, 12, №12, с. 3414.
22. Рыжик И.М., Градштейн И.С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Физматгиз, М., 1963.
23. Рангелов Й.М. ОИЯИ, P17-12594, Дубна, 1979.
24. Krumhansl J.A. Schriffer J.R. Phys.Rev., 1975, B11, No.9, p. 3535.
25. Bishop A.R., Krumhansl J.A. Phys.Rev., 1975, B12, No.7, p.2824.
26. Collins M.A. et al. Phys.Rev., 1979, B19, No.7, p. 3638.
27. Takayama H., Maki K. Phys.Rev., 1979, B20, No.12, p. 5009.
28. Bishop A.R. Physica Scripta, 1979, 20, No.3/4, p. 409.
29. Bishop A.R., Krumhansl J.A., Trullinger S.E. Physica, 1980, B1, N=1, p. 1.
30. Currie J.F. et al. Phys.Rev., 1980, B22, No.2, p. 477.
31. Wada Y., Schriffer J.R. Phys.Rev., 1978, B18, No.8, p.3897.
32. Бишоп А.Р. В сб.: Солитоны в действии, ред. Скотт Э., Лонгренс М. "Мир", М., 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 августа 1982 года.

Рангелов Й.М. Проявление мягкой моды при пайерлсовском структурном переходе P17-82-498

Рассмотрена модель, в которой соседние ионы связаны между собой упругими пружинками, а влияние коллективизированных валентных электронов при пайерлсовском структурном переходе учитывается с помощью локальных пружин, связывающих каждый ион с его равновесным положением в симметричной фазе. Таким образом, получено уравнение движения для параметра порядка /ПП/ η типа ϕ^4 . Предполагается, что колебание ПП в области вблизи T_c /критической точки/ есть проявление мягкой моды при пайерлсовском структурном переходе. Поэтому исследованы решения уравнений движения для ПП η в обеих областях. Найдены энергетические спектры элементарных возбуждений и температурные зависимости их параметров /числа, амплитуды и голдстоунские частоты/. Представлены физические и математические связи и соответствия между предложенной моделью и классической термодинамической релаксационной моделью.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Rangelov J.M. Manifestation of the Soft Mode During the Peierls Structural Transition P17-82-498

The model is considered, in which the neighbouring ions are connected by springs. The influence of the collectivized valence electrons during the peierls structural transition on the ion motion are considered by means of other springs, which connected every ion with equilibrium position in the symmetrical phase. Thus an equation of motion for order parameter η from type ϕ^4 is obtained. It is presented that fluctuations of the order parameter η in a region near the critical point T_c is manifestation of the soft mode during the peierls structural transition. For that reasons the solution of the motion equation for order parameter η is investigated in both regions. The energy spectrum and the temperature dependence of other parameters (number, amplitude and goldstoun frequency) of the elementary excitations are obtained. Physical and mathematical relations and correspondences between presented model and classical thermodynamical relaxation model are considered.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.