84-406

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-84-406

В.Л.Аксенов, А.Ю.Дидык

МЯГКАЯ МОДА И ЦЕНТРАЛЬНЫЙ ПИК В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ

1984

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время благодаря развитию нелинейной физики существенное развитие получила классическая теория мягкой моды при структурных фазовых переходах /ФП/. Согласно современным представлениям, универсальность структурных ФП второго рода обусловлена появлением в окрестности точки перехода кластеров ближнего порядка, предшествующих упорядоченному состоянию [1]. Критическое поведение системы определяется релаксационной динамикой виртуальных доменных стенок - областей, разделяющих кластеры с разной ориентацией параметра порядка. В то же время ближний порядок стабилизирует мягкую фононную моду, в результате чего ее частота остается конечной при температуре фазового перехода T_c. Такая картина ФП получила подтверждение в ряде экспериментов [2]. Самосогласованное описание температурного поведения мягкой фононной моды и центрального пика было дано в одномерном (1D) случае на основе солитонного формализма [3].

Изучение 1D -моделей имеет важное значение для получения качественных закономерностей, однако их недостатком является то, что для них $T_c = 0$. Простейшим случаем, когда $T_c \neq 0$ и возможно аналитическое описание нелинейной динамики, являются квази-1D -системы. Среди последних в настоящее время большое внимание уделяется квазиодномерным сегнетоэлектрикам, обладающим целым рядом особенностей. Так, исследования распространения ультразвука в кристаллах дигидрофосфата цезия показали отсутствие обычного для одноосных сегнетоэлектриков подавления флуктуаций диполь-дипольным дальнодействующим взаимодействием [4,5].

В данной работе на основе метода оператора перехода [6–8] и метода самосогласованных фононов [9] развита самосогласованная теория динамики решетки в квазиодномерных системах вблизи точки ФП. С учетом диполь-дипольного взаимодействия получены температурные зависимости одночастичной функции распределения, параметра порядка, частоты мягкой фононной моды и центрального пика.

2. МОДЕЛЬ

Квазиодномерные сегнетоэлектрики характеризуются тем, что в них имеется сильная связь атомов вдоль цепочек и слабая связь между цепочками. Модельный гамильтониан можно записать в виде [8]:

$$H = H_0 + H', \qquad /1a/$$

$$H_0 = \sum_{i\vec j} \left[\frac{p^2_{i\vec j}}{2m} + V(x_{i\vec j}) + \sum_\ell \frac{C_{i\ell,\vec j}}{2}(x_{i\vec j} - x_{\ell\vec j})^2 + \sum_k \frac{J_{i\vec j\vec k}}{2}(x_{i\vec j} - x_{i\vec k})^2\right], \qquad /1б/$$

$$V(x_{i\vec j}) = -\frac{A}{2}x^2_{i\vec j} + \frac{B}{4}x^4_{i\vec j}, \qquad /1в/$$

$$H'(x_{i\vec j}) = -\sum_{i\vec j} h_{i\vec j}(t)\, x_{i\vec j}, \qquad /1г/$$

здесь $x_{i\vec j}$ и $p_{i\vec j}$ - соответственно атомные смещения и сопряженные импульсы атома в $(i,\vec j)$ узле с массой m. Вектор $\vec j$ - двухкомпонентный вектор в плоскости, перпендикулярной оси цепочки. Константа взаимодействия $J_{i\vec j\vec k}$ описывает связь атомов различных цепочек. Данная модель сильно анизотропна: взаимодействие атомов внутри цепочки существенно больше, чем их взаимодействие с атомами из других цепочек: $C_{i\ell,\vec j} \gg J_{i\vec j\vec k}$. Мы будем рассматривать ФП типа смещения, для которых $C_{i\ell,\vec j} \gg A$. В /1г/ $h_{i\vec j}(t)$ - неоднородное внешнее поле.

Смещения $x_{i\vec j}$ представим в виде суммы квазиравновесных положений в двухъямном потенциале /1в/ и малых колебательных смещений относительно этих положений:

$$x_{i\vec j} = s_{i\vec j} + u_{i\vec j}. \qquad /2/$$

Заметим, что переменные $s_{i\vec j}$ и $u_{i\vec j}$ имеют разный характерный масштаб времен, что позволяет провести разделение /2/. С учетом /2/ гамильтониан /1/ аппроксимируем суммой двух гамильтонианов [3] $H \simeq H_s + H_{ph}$. Гамильтониан H_s может быть представлен как $H_s = H^0_s + H'_s$, где

$$H^0_s = \sum_{i\vec j}\left[\frac{p^2_{i\vec j}}{2m} - \frac{\tilde A}{2}s^2_{i\vec j} + \frac{B}{4}s^4_{i\vec j} + \sum_\ell \frac{C_{i\ell\vec j}}{2}(s_{i\vec j} - s_{\ell\vec j})^2 - \sum_k J_{i\vec j\vec k}\langle s_{i\vec k}\rangle_s\, s_{i\vec j}\right],$$

$$H'_s = -\sum_{i\vec j} h_{i\vec j}(t)\, s_{i\vec j}. \qquad /3а/$$

В свою очередь, H_{ph} имеет вид

$$H_{ph} = \sum_{i\vec j}\left[\frac{P^2_{i\vec j}}{2m} + \frac{A}{2}\Delta_{i\vec j}u^2_{i\vec j} + \sum_\ell \frac{C_{i\ell\vec j}}{2}(u_{i\vec j} - u_{\ell\vec j})^2 + \sum_k \frac{J_{i\vec j\vec k}}{2}(u_{i\vec j} - u_{i\vec k})^2 - h_{i\vec j}u_{i\vec j}\right]. \qquad /3б/$$

В /3/ введены обозначения

$$\tilde A = A\left(1 - 3\frac{B}{A}\langle u^2_{i\vec j}\rangle\right), \qquad \Delta_{i\vec j} = 3\frac{B}{A}\left(\langle s^2_{i\vec j}\rangle_s + \langle u^2_{i\vec j}\rangle\right) - 1. \qquad /4/$$

В гамильтониане /3а/ использовано приближение среднего поля для учета взаимодействия цепочек [6-8]. $\langle s_{i\vec k}\rangle_s$ - параметр порядка,

в общем случае зависящий от времени, так как зависит от времени приложенное внешнее поле. Скобки $\langle\ldots\rangle_s$ означают, что усреднение проводится с одночастичной функцией распределения $P(s,p,t)$ [8], которая будет получена в разделе 3:

$$\langle s\rangle_s \equiv \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} sP(s,p,t)\, ds\, dp. \qquad /5/$$

В /4/ $\langle u^2_{i\vec j}\rangle$ - корреляционная функция малых смещений. Из выражений /3/, /4/ видно, что параметры гамильтониана /3а/ через величину $\tilde A$ зависят от состояний фононной подсистемы /гамильтониан /3б//. В свою очередь, и фононная подсистема зависит от квазиравновесных положений, поскольку в одночастичную энергию $\Delta_{i\vec j}$ входят среднеквадратичные смещения $\langle s^2_{i\vec j}\rangle_s$.

Одночастичная функция распределения $P(s,p,t)$, входящая в /5/, может быть представлена через многочастичную функцию распределения в фазовом пространстве:

$$P(s_i, p_i, t) = \int \prod_{i\neq j} ds_j\, dp_j\, P(\{s_j\},\{p_j\},t), \qquad /6/$$

где $\{s_j\}$ и $\{p_j\}$ обозначают наборы $s_1, s_2, \ldots, s_N$ и $p_1, p_2, \ldots, p_N$ соответственно. Далее мы воспользуемся подходом, предложенным в [8], однако построим более правильную схему теории возмущений при решении получившихся уравнений. Для многочастичной функции распределения используем факторизацию, выделяя равновесную и неравновесную части:

$$P(\{s_j\},\{p_j\},t) = P_{eq}(\{s_j\},\{p_j\})\, Q(\{s_j\},\{p_j\},t), \qquad /7/$$

в /7/ $P_{eq}(\{s_j\},\{p_j\}) = \exp[-\beta H^0_s]$, а неравновесную часть многочастичной функции распределения в приближении типа среднего поля представим в виде

$$Q(\{s_j\},\{p_j\},t) = \prod_{j=1}^{N} Q(s_j, p_j, t). \qquad /8/$$

Введем функцию $W(s_j, p_j, t)$, используя соотношение

$$W(s_j, p_j, t) \equiv \frac{1}{\beta}\ln Q(s_j, p_j, t). \qquad /9/$$

Тогда в приближении /7/ после интегрирования уравнения Фоккера-Планка для $P(\{s_j\},\{p_j\},t)$ по всем $\{s_j\}$ и $\{p_j\}$, исключая s_i и p_i, находим уравнение для одночастичной функции распределения $P(s,p,t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(s,p,t) = \frac{\partial P_{eq}}{\partial p}\frac{\partial W}{\partial s} - \frac{\partial P_{eq}}{\partial s}\frac{\partial W}{\partial p} + \gamma m\frac{\partial}{\partial p}P_{eq}\frac{\partial W}{\partial p} - \frac{\beta p}{m}P_{eq}\frac{\partial H'_s}{\partial s}. \qquad /10/$$

С другой стороны, в термодинамическом пределе одночастичная функция распределения $P(s,p,t)$ может быть представлена с помощью собственной функции основного состояния интегрального уравнения оператора перехода/8/:

$$P(s,p,t) = P_0 \exp[\beta(V'(s) - W(s,p,t) - J_0 \langle s \rangle_s s)] \Phi_0^*(s,p,t)\, \Phi_0(s,p,t). \qquad /11/$$

В непрерывном пределе интегральное уравнение для оператора перехода имеет вид

$$\sqrt{\frac{\beta}{2\pi m}} \int dp_i \exp[-\frac{\beta}{4m}(p_i^2 + p_{i+1}^2)]\{-\frac{1}{\beta} - \frac{1}{4\beta^2 C}\frac{d^2}{ds^2} + V'(s) - W(s, p_{i+1}, t) -$$

$$- J_0 \langle s \rangle_s s\}\, \Phi_\nu(s, p_i, t) = [-\frac{1}{\beta} + \epsilon'_\nu]\, \Phi_\nu(s, p_{i+1}, t). \qquad /12/$$

В /11/, /12/ $V'(s) = -\tilde{A}/2s^2 + B/4s^4$. Уравнения /10/, /11/, /12/ позволяют получить выражения для функции распределения $P(s,p,t)$.

3. МЯГКАЯ ФОНОННАЯ МОДА

Рассмотрим вначале фононную подсистему, описываемую гамильтонианом /3б/. Видно, что в /3б/ входит случайный одноузельный потенциал $\Delta_{i\vec{j}}$, обусловленный неупорядоченностью системы в результате разбиения ее на кластеры. Чтобы ввести фононы, необходимо 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:

$$\bar{\bar{A}} = A(1 - 3\frac{B}{A}\overline{\langle u_{i\vec{j}}^2 \rangle}), \quad \Delta = 3\frac{B}{A}(\overline{\langle s_{i\vec{j}}^2 \rangle_s} + \overline{\langle u_{i\vec{j}}^2 \rangle}) - 1. \qquad /13/$$

В /13/ черта сверху означает усреднение по конфигурациям. Тогда для χ_{ph} получаем выражение:

$$\chi_{ph}(\omega, \vec{q}) = [-i\omega m(-i\omega + \gamma_{ph}) + \omega_{\vec{q}}^2]^{-1}. \qquad /14/$$

Здесь $\omega_{\vec{q}}^2$ - квадрат частоты фононов

$$\omega_{\vec{q}}^2 = A\bar{\Delta} + \lambda^2 \frac{q_\parallel}{|\vec{q}|} + (C_0 - C_{\vec{q}_\parallel}) + (J_0 - J_{\vec{q}_\perp}), \qquad /15/$$

а γ_{ph} - феноменологическая константа затухания. В /15/ добавлен член $\lambda^2 q_\parallel/|\vec{q}|$, описывающий дальнодействующее диполь-дипольное

взаимодействие. Величины $C_{\vec{q}_\parallel}$ и $J_{\vec{q}_\perp}$ - фурье-образы взаимодействия:

$$C_{\vec{q}_\parallel} = \frac{1}{N}\sum_\ell C_{i\ell\vec{j}} \exp[i\vec{q}_\parallel(\vec{R}_i - \vec{R}_\ell)],$$

$$J_{\vec{q}_\perp} = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} J_{i\vec{j}\vec{k}} \exp[i\vec{q}_\perp(\vec{R}_{\vec{j}} - \vec{R}_{\vec{k}})],$$

вектор $\vec{q}_\parallel$ направлен вдоль цепочки, вектор $\vec{q}_\perp$ - перпендикулярно. Корреляционные функции малых смещений выражаются стандартным образом:

$$\langle u^2 \rangle = \frac{1}{mN}\sum_{\vec{q}} \frac{1}{2\omega_{\vec{q}}} \operatorname{cth}\frac{\omega_{\vec{q}}}{2T}. \qquad /16/$$

Для того чтобы описать поведение мягкой фононной моды, необходимо вычислить средний квадрат квазиравновесных положений, который можно определить из соотношения $\overline{s^2} = \iint_{-\infty}^{\infty} s^2 P_{eq}(s,p)\, ds\, dp$. Для этого воспользуемся интегральным уравнением для оператора перехода, которое в стационарном случае в непрерывном пределе можно записать в виде

$$\sqrt{\frac{\beta}{2\pi m}} \int dp_i \exp[-\frac{\beta}{4m}(p_i^2 + p_{i+1}^2)]\{-\frac{1}{\beta} - \frac{1}{4\beta^2 C}\frac{d^2}{ds^2} + V'(s) -$$

$$-J_0 \bar{s} s\}\, \Phi_\nu(s, p_i, t) = [-\frac{1}{\beta} + \epsilon'_\nu]\, \Phi_\nu(s, p_{i+1}, t). \qquad /17/$$

Равновесная функция распределения $P_{eq}(s,p)$ может быть представлена через собственные функции основного состояния уравнения /17/:

$$P_{eq}(s,p) = P_0 \exp[\beta(V'(s) - J_0 \bar{s} s)]\, \Phi_0^*(s,p)\, \Phi_0(s,p). \qquad /18/$$

Собственными функциями интегрального уравнения для матрицы перехода являются

$$\Phi_\nu(s,p) = \Theta_0(p)\, \Psi_\nu(s). \qquad /19/$$

В /18/ P_0 - нормировочная константа, определяемая из условия $\int_{-\infty}^{\infty} P_{eq}(s,p)\, ds\, dp = 1$, а функции $\Theta_0(p)$ и $\Psi_\nu(s)$ удовлетворяют уравнениям

$$[-\frac{1}{4\beta^2 C}\frac{d^2}{ds^2} + V'(s) - J_0 \bar{s} s]\, \Psi_\nu(s) = \epsilon'_\nu \Psi_\nu(s), \qquad /20а/$$

$$[-\frac{2m}{\beta}\frac{d^2}{dp^2} + \frac{\beta}{2m}p^2]\, \Theta_n(p) = E_n \Theta_n(p). \qquad /20б/$$

Решение уравнения /20б/ имеет вид

$$\Theta_n(p) = (2^n n! \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}})^{-1/2} H_n(\sqrt{\frac{\beta}{2m}}\, p) \exp(-\frac{\beta p^2}{4m}), \quad E_n = 2n+1, \qquad /21/$$

здесь $H_n(z) \equiv (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}$ - полиномы Эрмита.

В качестве пробных функций уравнения /20а/ в парафазе, когда $\bar{s} = 0$, для $\nu = 0$ выберем комбинации функций левого /-/ и правого /+/ состояний гармонического осциллятора[10]:

$$\Psi_{0^s_a} = (\frac{a}{2\pi})^{1/4} [e^{-a(s-s_0)^2} \pm e^{-a(s+s_0)^2}](1 \pm e^{-2as_0^2})^{-1/2}, \qquad /22/$$

где $a = \beta\sqrt{AC}$, $s_0 = \sqrt{\tilde{A}/B}$.

Пользуясь функциями $\Psi_{0^s_a}(s)$ /22/, для приближенных собственных значений энергии $\epsilon_{0^s_a}$ получаем выражение

$$\epsilon_{0^s_a} = \frac{T}{2}\sqrt{\frac{\tilde{A}}{C}} - \frac{3\tilde{A}}{8a} - \frac{1 \pm 2e^{-2as_0^2}}{2(1 \pm e^{-2as_0^2})} \tilde{A} s_0^2 +$$

$$+ \frac{B}{4}[\frac{3}{16}\,\frac{1}{a^2} + \frac{s_0^4}{1 \pm e^{-2as_0^2}} + \frac{3}{2a}\,\frac{s_0^2}{1 \pm e^{-2as_0^2}}]. \qquad /23/$$

Для нахождения приближенных собственных функций полного уравнения /20а/, на основе которых вычисляется одночастичная равновесная функция распределения $P_{eq}(s, p)$, мы воспользуемся теорией возмущений, которая обычно применяется для расчетов двухуровневых систем с близкими энергиями[11]. В этом случае обычная теория возмущений неприменима, так как в знаменателях поправок к вычисляемым собственным функциям и собственным значениям появляются малые величины, и соответствующие ряды расходятся.

В нулевом приближении, используя пробные функции /22/, получаем собственные функции и соответствующие им собственные значения уравнения /20а/ в виде

$$\Psi'_{0s}(s) = c_1 \Psi_{0s}(s) + c_2 \Psi_{0a}(s), \quad \Psi'_{0a}(s) = -c_2 \Psi_{0s}(s) + c_1 \Psi_{0a}(s), \qquad /24/$$

$$\epsilon'_{0^s_a} = (\epsilon_{0a} + \epsilon_{0s})/2 \mp \sqrt{\delta^2 + (2J_0 \tilde{s}_0 \bar{s})^2}/2, \quad \delta \equiv \epsilon_{0a} - \epsilon_{0s}. \qquad /25/$$

В /24/ и /25/ введены обозначения

$$c^2_{1,2} = \frac{1}{2}[1 \pm \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + (2J_0 \tilde{s}_0 \bar{s})^2}}], \quad \tilde{s}_0 = \frac{s_0}{[1 - \exp(-4a s_0^2)]^{1/2}}. \qquad /26/$$

Отметим, что в парафазе, когда $\bar{s} = 0$, функции $\Psi'_{0^s_a}$ переходят в $\Psi_{0^s_a}$, а соответствующие им собственные значения $\epsilon'_{0^s_a}$ - в $\epsilon_{0^s_a}$.

В стационарном случае, подставляя /24/ в /19/ и используя /18/ и /5/, получаем уравнение

$$\bar{s} = [1 - \delta^2/(\delta^2 + (2J_0 \tilde{s}_0 \bar{s})^2)]^{1/2} \tilde{s}_0. \qquad /27/$$

Решая уравнение /27/ относительно $\bar{s}$, находим выражение для параметра порядка:

$$\bar{s}^2 = \begin{cases} \tilde{s}_0^2 [1 - \frac{\delta^2}{4J_0^2 \tilde{s}_0^4}], & T \le T_c \\ 0, & T > T_c. \end{cases} \qquad /28/$$

Отметим, что параметр порядка, полученный в[8], при изменении температуры ведет себя нефизически: вблизи нуля температуры он пренебрежимо мал, затем начинает возрастать при увеличении температуры и резко спадает при температуре ФП. Такое поведение связано с тем, что в[8] была некорректно использована теория возмущений при описании поведения системы ниже температуры фазового перехода /см. замечание после /23//. Выражение /28/ в точности совпадает с результатом в[7].

Для $\overline{s^2}$ находим

$$\langle s^2 \rangle_s \equiv \overline{s^2} = \iint_{-\infty}^{\infty} s^2 P_{eq}(s,p)\, ds\, dp = \begin{cases} \frac{1}{4a} + \tilde{s}_0^2 [1 - \frac{\delta}{2J_0 \tilde{s}_0^2} e^{-2as_0^2}], & T \le T_c \\ \frac{1}{4a} + \tilde{s}_0^2 [1 - e^{-2as_0^2}], & T > T_c. \end{cases} \qquad /29/$$

Вычислим статическую восприимчивость, используя результаты работы[6]. Для $\chi_s(\vec{q})$ можно получить выражение:

$$\chi_s(\vec{q}) = \chi_{1D}(q_\parallel)/[1 - 2\bar{J}_{q_\perp} \chi_{1D}(q_\parallel)], \qquad /30/$$

где $\bar{J}_{q_\perp}$ с учетом диполь-дипольных сил имеет вид[12]:

$$\bar{J}_{q_\perp} = J_{q_\perp} - \lambda^2 q_\parallel / |\vec{q}|. \qquad /31/$$

В /30/ $\chi_{1D}(q_\parallel)$ - статическая восприимчивость одномерной модели ФП, которую согласно[6] можно представить как

$$\chi_{1D}(q_\parallel) = \frac{1}{kT} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{iq_\parallel x} \langle s(x)\, s(0) \rangle. \qquad /32/$$

Корреляционная функция $\langle s(x)\, s(0) \rangle$ для модели /3/ в 1D-случае была вычислена в работе[3]:

$$\langle s(x)\ s(0)\rangle = \frac{\tilde{A}}{B}\exp[-2\bar{n}_k\, x\, \mathrm{cth}\frac{x}{\delta_0}]. \qquad /33/$$

Здесь $\bar{n}_k = (\frac{2\pi T}{m\tilde{B}^2})^{1/2} e^{-E_0/kT}$ - плотность стенок кластеров, $\delta_0 = \sqrt{C\ell^2/\tilde{A}}$ ширина доменной стенки, $E_0 = \frac{2}{3}\frac{\sqrt{\tilde{A}^3}\,C}{B}$ - энергия. Подставляя /33/ в /32/, находим окончательное выражение для статической восприимчивости χ_{1D}:

$$\chi_{1D}(q_{\parallel}) = \frac{1}{kT}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{iq_{\parallel}x}\frac{\tilde{A}}{B}\exp[-2\bar{n}_k\, x\, \mathrm{cth}\frac{x}{\delta_0}]. \qquad /34/$$

В случае, когда $x \gg \delta_0$, из /34/ находим

$$\chi_{1D}(q_{\parallel}) \simeq \frac{\tilde{A}}{B}\frac{1}{kT}\frac{2\zeta}{1+q_{\parallel}^2\zeta^2}. \qquad /35/$$

В /35/ $\zeta = 1/\bar{n}_k$, - корреляционная длина. Заметим, что /35/ совпадает с результатом, полученным в работе[6].

Дальнодействующее диполь-дипольное взаимодействие, которое учитывается в /30/ посредством соотношения /31/, приводит к существенно различному поведению статической восприимчивости в зависимости от направления квазиимпульса. Величина статической восприимчивости для векторов $\vec{q}$, направленных вдоль оси цепочки, будет значительно меньше аналогичной величины для векторов $\vec{q}$, направленных перпендикулярно цепочке.

Решение самосогласованной системы уравнений /13/, /15/, /16/, /28/, /29/ позволяет описать поведение мягкой фононной моды в квазиодномерных сегнетоэлектриках. Отметим, что фононная корреляционная функция вычислялась в высокотемпературном приближении с заменой суммирования по $\vec{q}$ интегрированием по d^3q согласно выражению

$$\langle u^2\rangle = \frac{v_c}{(2\pi)^3}\frac{T}{m}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_{-\pi/\ell}^{\pi/\ell}\frac{d(\cos\theta)\, d\Phi\, q^2dq}{A\bar{\Delta} + J_0q^2\sin^2\Theta + (C_0 + C_0q^2)\cos^2\Theta} =$$

$$= \frac{v_cT}{2\pi^2 m}\int_{-\pi/\ell}^{\pi/\ell}\frac{q^2dq}{\sqrt{(A\bar{\Delta}+J_0q^2)(\lambda^2+C_0q^2)}}\,\mathrm{arctg}\sqrt{\frac{\lambda^2+C_0q^2}{A\bar{\Delta}+J_0q^2}}. \qquad /16a/$$

В /16а/ v_c - объем элементарной ячейки, ℓ - постоянная решетки.

Результаты численного решения системы уравнений для безразмерных параметров модели $f_0 = C_0/A = 15$, $j_0 = J_0/A = 10^{-2}$, $\bar{\lambda} = \lambda^2/A = 2$ приведены на рис.1,2. На рис.1 показана температурная зависимость функции распределения квазиравновесных положений $P(s) = \int_{-\infty}^{\infty} P_{eq}(s,p)\,dp$. Видно, что при низких температурах $P(s)$

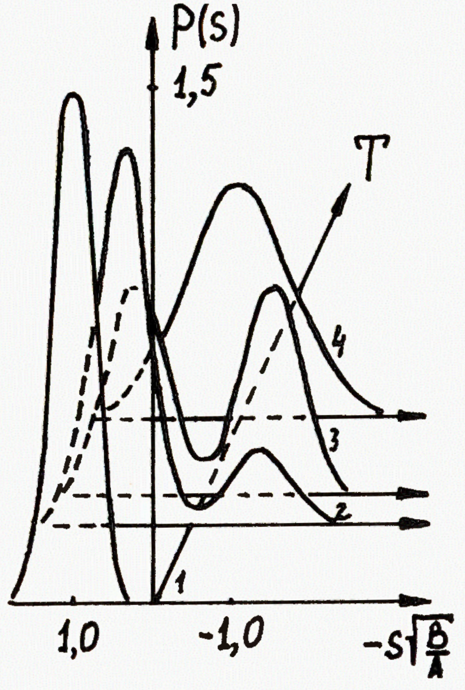


Рис.1. Температурная зависимость функции распределения квазиравновесных положений P(s); $T_c = 0{,}95$; 1,2,3,4 - $T = 0{,}4$; 0,9; 1,0; 1,4 соответственно.

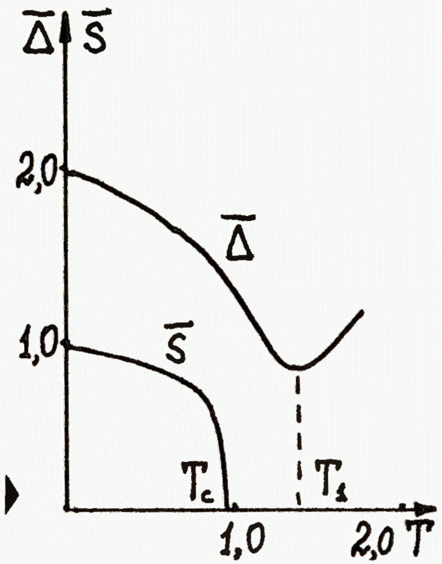


Рис.2. Температурная зависимость квадрата частоты мягкой фононной моды Δ^2 и параметра дальнего порядка $\bar{s}$.

представляет собой один пик, центрированный вблизи значений $\sqrt{\frac{B}{A}}\,s = 1$. Это означает, что все атомы одинаково смещены в двухъямном потенциале. По мере увеличения температуры становятся возможными смещения разных знаков, что означает появление кластеров ближнего порядка. Выше температуры $T > T_c$ распределение имеет один пик, центрированный в нуле, то есть уже все атомы находятся выше горба двухъямного потенциала. Такое поведение функции распределения согласуется с экспериментальными результатами[13] и теоретическими описаниями с помощью методов ренормгруппы и модекулярной динамики[14].

На рис.2 показано поведение мягкой фононной моды и параметра порядка в зависимости от температуры. Видно, что частота мягкой моды не обращается в нуль при температуре ФП /температура ФП определяется из условия обращения в нуль параметра порядка/, а остается конечной. Этот результат согласуется с результатами численного моделирования для двумерной модели[15] и теоретическими расчетами для одномерной модели ФП[3].

4. ДИНАМИКА СТЕНОК КЛАСТЕРОВ. ЦЕНТРАЛЬНЫЙ ПИК

Рассмотрим динамику стенок кластеров ближнего порядка. Получим восприимчивость квазиравновесных положений с помощью гамильтониана /3а/, для чего необходимо найти параметр порядка, зависящий от внешнего поля. Параметр порядка можно вычислить с использованием неравновесной функции распределения $P(s,p,t)$ /см. /5//, которая, в свою очередь, выражается через собственную функцию основного состояния интегрального уравнения для оператора перехода /12/.

В этом разделе мы воспользуемся предложенным в[8] подходом, но при вычислениях в сегнетоэлектрической фазе воспользуемся более корректной теорией возмущений /см. замечание после /23//.

Решение уравнения /12/ будем искать по теории возмущений. В сегнетоэлектрической фазе при $T < T_c$ получаем

$$\Phi_{0s}(s,p,t) = \Psi'_{0s}(s)\,\Theta_0(p) + \sum_{\xi}[K_{0s,\xi}(t)\,\Psi'_{0s}(s) + K_{0a,\xi}(t)\,\Psi'_{0a}(s)]\,\Theta_\xi(s). \qquad /36/$$

Здесь $\Psi'_{0{s \atop a}}$ удовлетворяют уравнению /20а/ и имеют вид /24/, $K_{0{s \atop a}}(t)$ - коэффициенты разложения. Подставляя /36/ в /12/, находим уравнение

$$[-1/\beta - 1/4\beta^2 C\frac{d^2}{ds^2} + V'(s)]\sum_{\xi}[K_{0s,\xi}(t)\,\Psi'_{0s} + K_{0a,\xi}(t)\Psi'_{0a}]\Theta_0\delta_{0,\xi} =$$

$$= [-1/\beta - 1/4\beta^2 C\frac{d^2}{ds^2} + V'(s) - J_0\langle s\rangle_t\, s - W(s,p,t)]\,\Psi'_{0s}\Theta_0 = \qquad /37/$$

$$= (-1/\beta + \epsilon'_{0s})\sum_{\xi}[K_{0s,\xi}(t)\Psi'_{0s} + K_{0a,\xi}(t)\Psi'_{0a}]\Theta_\xi + (-1/\beta + \epsilon'_{0s})\Psi'_{0s}\,\Theta_0 .$$

При выводе /37/ мы пренебрегли членами, квадратичными по J_0 и $W(s,p,t)$. При $t = 0$ уравнение /37/ принимает вид /20а/. Разлагая функцию $W(s,p,t)$ по собственным функциям уравнений /20а/ и /20б/, имеем

$$W(s,p,t)\,\Psi'_{0s}\,\Theta_0 = \sum_{\xi}[W_{0s,\xi}(t)\,\Psi'_{0s} + W_{0a,\xi}(t)\,\Psi'_{0a}]\Theta_\xi . \qquad /38/$$

После подстановки /38/ в /37/, умножения обеих частей уравнения /37/ на $\Psi'_{0{s \atop a}}\Theta_{\xi'}$ и интегрирования по s и p, в двухуровневом приближении получаем

$$[-\frac{1}{\beta} + \frac{\epsilon_{0s} + \epsilon_{0a}}{2} - \frac{\delta^2}{4J_0\bar{s}_0^2}]K_{0s,0}(t)\,\delta_{0,\xi} + \frac{\bar{s} - \langle s\rangle_t}{2\bar{s}_0}\,\delta\,K_{0a,0}(t)\,\delta_{0,\xi} =$$

$$= [(-\frac{1}{\beta} + \epsilon'_{0s})K_{0s,\xi}(t) + W_{0s,\xi}(t)] + J_0[\langle s\rangle_t - \bar{s}]\bar{s}\,\delta_{0,\xi}\,, \qquad /39а/$$

$$\frac{\bar{s} - \langle s\rangle_t}{2\bar{s}_0}\,\delta\,K_{0s,\xi}(t)\,\delta_{0,\xi} + [-\frac{1}{\beta} + \frac{\epsilon_{0s} + \epsilon_{0a}}{2} + \frac{\delta^2}{4J_0\bar{s}_0^2}]K_{0a,\xi}(t)\,\delta_{0,\xi} + \qquad /39б/$$

$$+ \frac{\bar{s} - \langle s\rangle_t}{2\bar{s}_0}\,\delta\cdot\delta_{0,\xi} = [(-\frac{1}{\beta} + \epsilon'_{0s})K_{0a,\xi}(t) + W_{0a,\xi}(t)].$$

Для того чтобы решить уравнения /39/, необходимо найти связь коэффициентов разложения $K_{0{s \atop a},\xi}(t)$ и $W_{0{s \atop a},\xi}(t)$. Для этого воспользуемся уравнением движения для неравновесной функции распределения /10/. Решение уравнения /10/ также будем искать по теории возмущений с точностью до членов первого порядка по J_0 и $W(s,p,t)$. Используя представление для функции распределения $P(s,p,t)$ в виде /11/ с учетом /36/, получаем

$$P(s,p,t) = P_{eq}(s,p) + P^{(1)}(s,p,t)\,, \qquad /40/$$

где $P_{eq}(s,p)$ имеет вид /18/, а

$$P^{(1)}(s,p,t) = P_0\,e^{\beta V(s)}[2\Psi'_{0s}\Theta_0\sum_{\xi}(K_{0s,\xi}(t)\Psi'_{0s} +$$

$$+ K_{0a,\xi}(t)\Psi'_{0a})\Theta_\xi - \beta W(s,p,t)\Psi'_{0s}\Theta_0]. \qquad /41/$$

Подставляя далее /40/ в уравнение /10/, находим уравнение для определения $K_{0{s \atop a}}(t)$:

$$2\Psi'_{0s}\Theta_0\sum_{\mu\xi'}\Psi'_\mu\,\Theta_{\xi'}\frac{\partial K_{\mu,\xi'}(t)}{\partial t} - \beta\Psi'^2_{0s}\Theta_0^2\frac{\partial W(s,p,t)}{\partial t} = \Psi'^2_{0s}\frac{\partial\Theta_0^2}{\partial p}\,\frac{\partial W(s,p,t)}{\partial s} -$$

$$- \frac{\partial\Psi'^2_{0s}}{\partial s}\Theta_0^2\frac{\partial W(s,p,t)}{\partial p} + m\gamma\frac{\partial}{\partial p}(\Psi'^2_{0s}\Theta_0^2)\frac{\partial W(s,p,t)}{\partial p} - \qquad /42/$$

$$- \frac{\beta p}{m}\Psi'^2_{0s}\Theta_0^2\frac{\partial H'_s}{\partial s} - \beta h\Psi'^2_{0s}\Theta_0^2\frac{\partial W(s,p,t)}{\partial p}\,.$$

Здесь индекс μ принимает два значения - 0s и 0a. Используя представление /38/ для $W(s,p,t)$, в /45/ после умножения обеих частей его на $\Psi'_{0s}\Theta_\xi$ и интегрирования по s и p, имеем уравнение:

$$2\frac{\partial K_{\mu,\xi}(t)}{\partial t} - \beta\frac{\partial W_{\mu,\xi}(t)}{\partial t} = \sum_{\mu'\xi'} \{2(\xi|\frac{\Theta_0'}{\Theta_0}|\xi')\langle\mu|\frac{\partial}{\partial s} - \frac{\Psi^*_{0s}}{\Psi_{0s}}|\mu'\rangle -$$
$$- 2\langle\mu|\frac{\Psi^*_{0s}}{\Psi_{0s}}|\mu'\rangle(\xi|\frac{\partial}{\partial p} - \frac{\Theta_0'}{\Theta_0}|\xi') - \gamma\beta\xi'\delta_{\xi,\xi'}\delta_{\mu,\mu'}\} W_{\mu'\xi'}(t) + \frac{\beta h}{m}(\xi|p|0)\delta_{\mu,0s}. \qquad /43/$$

Здесь введены обозначения

$$\Psi^* \equiv \frac{\partial}{\partial s}\Psi, \; (\xi|A(p)|\xi') \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Theta_\xi\, A(p)\, \Theta_{\xi'}\, dp, \; \langle\mu|B(s)|\mu'\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_\mu(s)\, B(s)\, \Psi_{\mu'}(s)\, ds.$$

Ограничиваясь при решении /43/ членами, линейными по приложенному полю, после фурье-преобразования по времени получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} -2i\omega K_{0a,0}(\omega) + i\omega\beta W_{0a,0}(\omega) = \sqrt{\frac{\beta}{m}}\, 2L W_{0s,1}(\omega) \\ -\beta W_{0s,1}(\omega)[i\omega g' - \gamma] + \sqrt{\frac{\beta}{m}}\, 2L W_{0a,0}(\omega) = \sqrt{\frac{\beta}{m}}\, h. \end{cases} \qquad /44/$$

В /44/ введены обозначения

$$g' \equiv [\frac{1+\beta\epsilon'_{0s}}{1-\beta\epsilon'_{0s}}], \; L \equiv \langle 0s|\frac{\Psi^*_{0s}}{\Psi_{0s}}|0a\rangle = 2a\tilde{s}_0 \exp[-2a\tilde{s}_0^2]. \qquad /45/$$

Выражения /44/ и /45/ получены с использованием функций /21/, /24/. Для того чтобы система уравнений, используемая при вычислении неравновесной функции распределения, была замкнутой, необходимо найти также связь между $K_{\mu\xi}(t)$ и зависящим от частоты параметром порядка $\langle s\rangle_\omega$. В тех же приближениях, что и при вычислении /44/, получаем

$$\langle s\rangle_\omega = \bar{s}\delta(\omega) + \frac{\delta}{J_0\tilde{s}_0} K_{0a,0}(\omega). \qquad /46/$$

Решение системы уравнений /39/, /44/ и /46/ позволяет найти параметр порядка $\langle s\rangle_\omega$ и, следовательно, получить динамическую восприимчивость в виде отклика на приложенное внешнее поле $(\chi_s(\omega) = \frac{\partial\langle s\rangle_\omega}{\partial h})$:

$$\chi_s(\omega) = \frac{2L\delta}{J_0\tilde{s}_0 m}[i\omega(i\omega g' - \gamma)(2 - \beta J_0\bar{s}^2) + \frac{4L^2}{m}J_0\bar{s}^2]^{-1}, \; T < T_c. \qquad /47/$$

Статическая восприимчивость /при $\omega = 0$/ может быть записана как

$$\chi_s(\omega = 0) = \delta/(2L\, J_0^2\tilde{s}_0\bar{s}^2), \quad T < T_c. \qquad /48/$$

Температуру ФП, определяемую из условия обращения в нуль обратной статической восприимчивости, определим из уравнения

$$\delta = 2J_0\tilde{s}_0^2. \qquad /49/$$

Сравнивая выражения /48/ и /28/, видим, что параметр порядка обращается в нуль при той же температуре, что и обратная статическая восприимчивость $\chi_s^{-1}(\omega = 0)$.

Заметим также, что условие для нахождения температуры ФП совпадает с результатом в [8] с точностью до множителей, нормирующих собственные функции уравнения /20а/.

Вблизи T_c статическую восприимчивость можно приближенно записать в виде

$$\chi_s(\omega = 0) \simeq \tilde{s}_0/[2L(2J_0\tilde{s}_0^2 - \delta)]. \qquad /50/$$

Вычислим теперь динамическую восприимчивость модели /3а/ в парафазе, когда $s = 0$. В этом случае $\Psi'_{0s} = \Psi_{0s}$ и $\Psi'_{0a} = \Psi_{0a}$, так как $c_1 = 1$, а $c_2 = 0$ в /24/. Тогда уравнение, следующее из метода оператора перехода, упрощается /см. /37// и принимает вид

$$\sum_{\mu\xi}[\xi_{0s} - \xi_\mu\delta_{0,\xi}]K_{\mu\xi}(t)\Psi_\mu\Theta_\xi = [J_0\langle s\rangle_t s + W(s,p,t)]\Psi_{0s}\Theta_0. \qquad /51/$$

Из /51/, используя те же процедуры, что и при вычислениях в сегнетоэлектрической фазе, находим:

$$K_{\mu\xi}(t) = \frac{W_{\mu\xi}(t)}{\xi_{0s} - \xi_\mu\delta_{0,\xi}} + \frac{J_0\langle s\rangle_t\tilde{s}_0}{\delta}\delta_{0,\xi}\,\delta_{\mu,0a}. \qquad /52/$$

В /52/ введено обозначение: $\xi_\mu = 1/\beta - \epsilon_\mu$, $\mu = 0a, 0s$. Связь между зависящим от частоты параметром порядка и $K_{0a,0}(\omega)$ можно записать как

$$\langle s\rangle_\omega = 2\tilde{s}_0 K_{0a,0}(\omega). \qquad /53/$$

Используя выражения /52/, /53/, /44/, получаем восприимчивость в параэлектрической фазе:

$$\chi_s(\omega) = \frac{\chi_{1D}(\omega)}{1 - 2J_0\tilde{s}_0 L\chi_{1D}(\omega)}. \qquad /54/$$

В /54/ введена динамическая восприимчивость в 1D -случае:

$$\chi_{1D}(\omega) = \frac{4L\tilde{s}_0/m}{i\omega(i\omega g - \gamma)(2 - \beta\delta) + 4L^2\delta/m}, \quad g = \frac{1+\beta\epsilon_{0s}}{1-\beta\epsilon_{0s}}. \qquad /55/$$

Тогда статическая восприимчивость при $T > T_c$ имеет вид

$$\chi_s(\omega = 0) = \tilde{s}_0 / [L\delta(1 - 2J_0 \tilde{s}_0^2/\delta)]. \qquad /56/$$

Из сравнения выражений /50/ и /56/ видно, что в приведенном расчете выполняется соотношение "двойки" Ландау, как и в приближении среднего поля.

Из выражений /47/ и /54/ находим динамический структурный фактор $S_s(\omega) = \dfrac{2}{\beta\omega} \operatorname{Im}\chi_s(\omega)$:

$$S_s(\omega) = \begin{cases} \dfrac{2}{\beta} \dfrac{\alpha_1 \gamma_1}{(\omega^2 - \Omega_1^2)^2 + \gamma_1^2 \omega^2}, & T > T_c \\[2ex] \dfrac{2}{\beta} \dfrac{\alpha_2 \gamma_2}{(\omega^2 - \Omega_2^2)^2 + \gamma_2^2 \omega^2}, & T < T_c. \end{cases} \qquad /57/$$

Здесь

$$\gamma_1 = \gamma_s/g, \quad \gamma_2 = \gamma_s/g', \quad \Omega_1^2 = \frac{4L^2}{m} \frac{\delta - 2J_0 \tilde{s}_0^2}{2 - \beta\delta}, \quad \Omega_2^2 = \frac{4L^2}{m} \frac{J_0 \bar{s}^2}{2 - \beta J_0 \bar{s}^2},$$

$$\alpha_1 = \frac{4L\tilde{s}_0}{mg} [2 - \beta\delta]^{-1}, \qquad \alpha_2 = \frac{2L\delta}{J_0 \tilde{s}_0 mg'} [2 - \beta J_0 \bar{s}^2]^{-1}.$$

При $\gamma_{1/2}^2 \gg 2\Omega_{1/2}^2$ интенсивность центрального пика имеет вид

$$I_{ц.п.} = \begin{cases} \dfrac{2}{\beta} \dfrac{\alpha_1 \gamma_1}{\Omega_1^4}, & T > T_c \\[2ex] \dfrac{2}{\beta} \dfrac{\alpha_2 \gamma_2}{\Omega_2^4}, & T < T_c, \end{cases} \qquad /58/$$

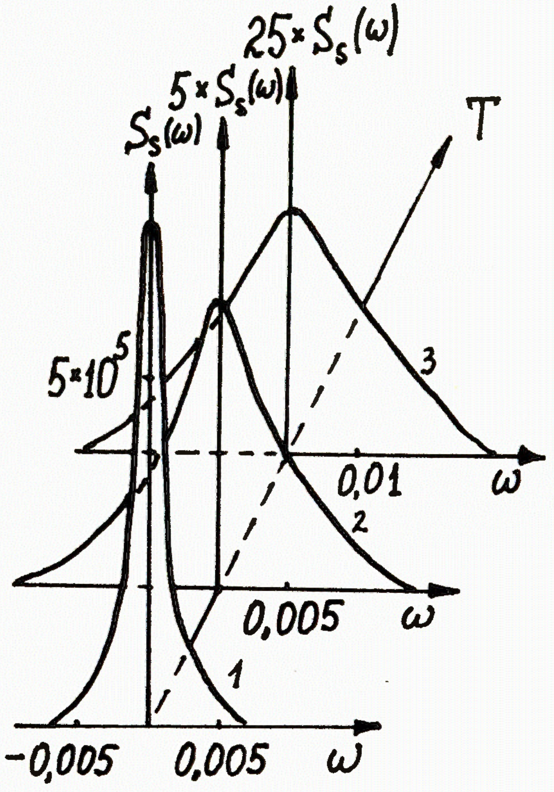
его ширина:

$$\omega_{ц.п.} = \begin{cases} \Omega_1^2/\gamma_1, & T > T_c \\ \Omega_2^2/\gamma_2, & T < T_c. \end{cases} \qquad /59/$$

Решая систему уравнений /13/, /15/, /16/, /28/, /29/, /57/-/59/, можно получить температурные зависимости динамического структурного фактора /его интенсивности и ширины/.

На рис.3 показано поведение структурного фактора в зависимости от частоты при различных температурах. Видно, что интенсивность центрального пика увеличивается при приближении к T_c как из области сегнетофазы, так и из области парафазы, а ширина уменьшается.

Рис.3. Температурная зависимость функции рассеяния $S_s(\omega)$; 1,2,3 – T = 1,00; 1,05; 1,10 соответственно (T_c=0,95).



5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развитая в данной работе теория позволяет дать количественное описание динамического поведения квазиодномерных систем вблизи точки ФП. Полученные результаты показывают, что в квазиодномерных сегнетоэлектриках, как и в системах с короткодействием, характер коллективного поведения в области ФП определяется кластерами ближнего порядка, появление которых приводит к кроссоверу из режима "смещение" в режим "порядок-беспорядок". В результате ФП характеризуется не мягкой фононной модой, а центральным пиком.

Авторы выражают признательность Н.М.Плакиде за обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Брус А., Каули Р. Структурные фазовые переходы. "Мир", М., 1984.
2. Müller K.A. In: Statics and Dynamics of Nonlinear Systems. (Ed. by G.Benedek, H.Bulz, R.Zeyher). Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1983, p.68.
3. Аксенов В.Л., Дидык А.Ю., Юшанхай В.Ю. ФНТ, 1982, 8, с.626.
4. Якушкин Е.А., Баранов А.И., Шувалов Л.А. Письма в ЖЭТФ, 1981, 33, с.27.
5. Аксенов В.Л., Дидык А.Ю., Плакида Н.М. Письма в ЖЭТФ, 1983, 38, с.157.
6. Scalapino D.J., Imry Y., Pincus P. Phys.Rev.B, 1975, 11, p.2042.
7. Bishop A.R., Krumhansl J.A. Phys.Rev.B, 1975, 12, p.2824.
8. Imada M.J. J.Phys.Soc.Jap., 1981, 50, p.1457.
9. Аксенов В.Л., Плакида Н.М. ТМФ, 1978, 34, с.353; 35, с.104.
10. Аксенов В.Л. и др. ОИЯИ, Р17-12961, Дубна, 1979, с.12.
11. Давыдов А.С. Квантовая механика. "Наука", М., 1973, с.217-220.
12. Kanda E., Tamaki A., Fujimura T. J.Phys.C, 1982, 15, No.15, p.3401.
13. Bruce A.D., Schneider T., Stoll E. Phys.Rev.Lett., 1979, 43, No.18, p.1284.
14. Bruce A.D., Müller K.A., Berlinger W. Phys.Rev.Lett., 1979, 42, No.3, p.185.
15. Schneider T., Stoll E. Phys.Rev.B, 1976, 13, No.3, p.1216.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 июня 1984 года.

Аксенов В.Л., Дидык А.Ю. Р17-84-406
Мягкая мода и центральный пик
в квазиодномерных сегнетоэлектриках

На основе метода оператора перехода и метода самосогласованных фононов развита самосогласованная динамическая теория решетки в квазиодномерных сегнетоэлектриках.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод авторов

Aksenov V.L., Didyk A.Yu. P17-84-406
Soft Mode and Central Peak
in Quasi-One-Dimensional Ferroelectrics

On the basis of the transfer-operator technique and self-consistent phonon theory the self-consistent theory of the lattice dynamics in quasi-one-dimensional ferroelectrics is developed.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984