

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P17-85-564

В.Л.Аксенов, А.Ю.Дидык, Р.Жакула*

**ВЛИЯНИЕ РЕЛАКСИРУЮЩИХ ДЕФЕКТОВ
НА ДИНАМИКУ
ВИРТУАЛЬНЫХ ДОМЕННЫХ СТЕНОК**

Направлено в журнал "Теоретическая
и математическая физика"

*

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

1985

I. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время благодаря широкому распространению методов нелинейной физики существенное развитие получила классическая теория мягкой моды при структурных фазовых переходах^{/1/}. Исследование ряда моделей показало, что характерной чертой фазовых переходов типа смещения является возникновение в окрестности точки перехода кластеров ближнего порядка, предшествующих установлению упорядоченного состояния. При этом критическое поведение системы определяется динамикой виртуальных доменных стенок - областей, разделяющих эти кластеры с разной ориентацией параметра порядка. В реальных кристаллах распределение стенок и их проявление в наблюдаемых в эксперименте величинах определяется дефектами структуры. Поэтому при выяснении роли кластеров в динамике фазовых переходов необходимо учитывать влияние на них этих дефектов.

Наиболее подходящими для рассмотрения этой задачи являются низкоразмерные (одномерные и квазиодномерные) системы, для которых кластерная картина является наиболее убедительной, ввиду сильно развитых критических флуктуаций и в то же время возможно ее математическое исследование. В этом случае стенки кластеров описываются солитоноподобными возбуждениями - кинками, и задача сводится к изучению влияния на них вызванного дефектом возмущения. Различные аспекты этой проблемы в связи со структурными фазовыми переходами исследовались в ряде работ^{/2-5/}. При этом рассматривались стационарные дефекты, структура которых не менялась со временем, в результате чего остался незатронутым ряд важных для теории вопросов^{/1/}. Неясно, в какой мере дефекты влияют на кластерные явления, в частности, какова роль релаксации дефекта на проявление кластерной динамики. Неизвестно динамическое поведение отдельного дефекта в нелинейной области фазового перехода. Помимо этого мало изучена зависимость от волнового вектора, которая отражает пространственные корреляции в системе.

В настоящей работе исследовано влияние нестационарных - релаксирующих дефектов замещения на динамику виртуальных доменных стенок в одномерной скалярной модели φ^4 - простейшей модели структурного фазового перехода. В разделе 2 получены уравнения движения модели и установлено соответствие между возможными типами дефектов в терминах теории динамики решетки и теории критических явлений. В разделе 3 исследовано влияние дефектов на форму стенки и получены условия ее закрепления с учетом взаимодействия между стенками и действия температуры. В разделе 4 получена восприимчивость системы и изучено влияние на

фононную и голдстоуновскую моды дефектов в режиме быстрой и медленной релаксации. В разделе 5 обсуждаются полученные результаты.

2. МОДЕЛЬ

Рассмотрим одномерную модель структурно-неустойчивого одноосного кристалла с одной дефектной ячейкой^{/1,6/}. Гамильтониан такой системы запишем в виде

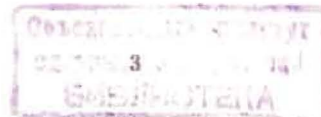
$$H = \sum_{n \neq n_0} \left[\frac{m \dot{s}_n^2}{2} - \frac{A}{2} s_n^2 + \frac{B}{4} s_n^4 + \frac{1}{4} \sum_{n' \neq n_0} y_{nn'} (s_n - s_{n'})^2 + \frac{m_d \dot{\delta}_{n_0}^2}{2} - \frac{A_d}{2} \delta_{n_0}^2 + \frac{B_d}{4} \delta_{n_0}^4 + \frac{1}{4} \sum_n y_{nn_0}^d (s_n - \delta_{n_0})^2 \right], \quad (I)$$

где s_n , δ_{n_0} - локальные нормальные координаты, описывающие колебания основной и дефектной ячеек с массами m и m_d соответственно. $y_{nn'}$ и $y_{nn_0}^d$ - силовые постоянные взаимодействия ячеек матрицы между собой и с дефектом. Штрих у суммы в (I) означает суммирование по ближайшим соседям: $A, B > 0$.

В терминах теории динамики решетки дефектная ячейка может быть нескольких типов^{/6/}. Если $A_d < 0$, то такой дефект является стабилизирующим, или "жестким". При $A_d > 0$ и таком соотношении глубин одночастичных потенциалов $V_0 (= A^2/4B)$ и $V_d (= A_d^2/4B)$, что в дефектной ячейке может происходить смещение за счет ее взаимодействия с соседями, дефект называется "мягким". Если $V_d \gg V_0$ и возможны переориентации в одночастичном потенциале, дефект является релаксирующим, в противном случае - замороженным. Жесткие и мягкие дефекты называются также сохраняющими симметрию, а замороженные - нарушающими симметрию дефектами. Релаксирующие дефекты могут относиться к первому или второму из этих двух типов в зависимости от соотношения времен релаксации дефекта и времени наблюдения. Обычно их относят к сохраняющим симметрию дефектам.

При переходах типа смещения ($\sum_n y_{nn'}/A = \chi/A \gg 1$) переменные s_n мало меняются на протяжении постоянной решетки ℓ , и тогда в (I) можно перейти к непрерывному пределу. В этом случае получаем уравнения движения для полей смещений в виде

$$\ddot{\varphi} - \varphi'' - \varphi + \varphi^3 + \gamma \dot{\varphi} = h \exp(-i\omega t) - \Phi_d(x-x_d) [\varphi(x,t) - \varphi_d(x_d,t)] \quad (2a)$$



$$\frac{m_d}{m} \ddot{\varphi}_d - a \varphi_d + b \varphi_d^3 + \gamma_d \dot{\varphi}_d = h \exp(-i\omega t) - \int dx \Phi_d(x-x_d) [\varphi_d(x_d, t) - \varphi(x, t)], \quad (2b)$$

где введены безразмерные переменные

$$\varphi = s \sqrt{B/A}, \quad \varphi_d = z \sqrt{B/A}, \quad t = t' \sqrt{A/m}, \quad x = x' \sqrt{A} \epsilon^2, \\ a = A_d/A, \quad b = B_d/B, \quad \Phi_d(x-x_d) = Y_d(x-x_d)/A, \\ \gamma = \gamma' \sqrt{A/m}, \quad \omega = \omega' \sqrt{A/m}, \quad h = h' \sqrt{B/A^3}.$$

В уравнениях (2) включены члены с затуханием γ и γ_d , которые феноменологически описывают процессы релаксации в системе.

Решение уравнений (2) будем искать по теории возмущений, представляя поле смещений в форме^{7,8/}:

$$\varphi(x, t) = \varphi_0(x) + u^{(1)}(x, t) + u^{(2)}(x, t), \quad (3)$$

здесь $\varphi_0(x)$ - стационарное решение уравнений (2a) и (2b) в однородном случае, определяющее положение равновесия ячейки, а $u^{(1)}(x, t) \sim \epsilon$ и $u^{(2)}(x, t) \sim \epsilon^2$ - возмущения этих решений, характеризующие флуктуационные эффекты. Для уравнения (2a) решение $\varphi_0(x)$ имеет стандартный вид стационарного кинка

$$\varphi_0(x) = \tanh(x-x_0)/\sqrt{2}, \quad (4)$$

где x_0 - координата центра кинка.

Для уравнения (2b) решение $\varphi_{od}(x_d)$ имеет разный вид для различных типов дефектов. В случае жесткого ($A_d < 0$) и мягкого ($Y_{od} = \int dx Y_d(x-x_d) > A_d > 0$) дефектов $\varphi_{od}(x_d) = 0$. Для релаксирующего дефекта положение равновесия также равно нулю. Отличие его от двух предыдущих типов дефектов состоит в том, что изменяется характер динамики флуктуаций. В случае замороженного дефекта ($V_d \gg V_0$, $Y_{od} \ll A_d$) $\varphi_{od}(x_d) = \pm \sqrt{(B/A)(A_d - Y_{od})/B_d} = \varphi_{od}$.

Таким образом, при переходе к непрерывному пределу мы приходим в случае сохраняющих симметрию дефектов ($\varphi_{od} = 0$) к задаче о дефектах типа "случайная температура" (по терминологии теории критических явлений^{9/}). В случае же нарушающих симметрию дефектов ($\varphi_{od} \neq 0$) возникает задача о системе с дефектами двух типов: "случайная температура" и "случайное поле".

3. ИЗМЕНЕНИЕ ФОРМЫ СТЕНКИ

Рассмотрим влияние дефектов на форму и распространение стенок. Для этого при решении уравнений (2) совместно с (3) можно ограничиться линейным по ϵ приближением. Взаимодействие примеси с матрицей будем описывать с помощью простейшего модельного потенциала^{2,10,11/}:

$$\Phi_d(x-x_d) = \alpha \delta(x-x_d), \quad (5)$$

полагая мощность потенциала малой: $\alpha \sim \epsilon$.

Используя представление (3) в (2), находим систему уравнений для отклонений $u^{(i)}(x, t)$:

$$\ddot{u}^{(1)} - u^{(1)''} + [2 - 3ch^{-2} \frac{x}{\sqrt{2}}] u^{(1)} + \gamma \dot{u}^{(1)} = h \exp(-i\omega t) - \alpha \delta(x-x_d) [\varphi_0(x) - \varphi_{od}(x_d)], \quad (6a)$$

$$\frac{m_d}{m} \ddot{u}_d^{(1)} + \omega_d^2 u_d^{(1)} + \gamma_d \dot{u}_d^{(1)} = h \exp(i\omega t) + \alpha (\varphi_0(x_d - x_0) + u^{(1)}(x_d, t)), \quad (6b)$$

здесь $\omega_d^2 = \alpha - a + 3b(\varphi_{od}^2 + \langle (u_d^{(1)})^2 \rangle)$ - частота локальных колебаний дефекта. Корреляционная функция флуктуаций дефекта может быть вычислена с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы

$$\langle (u_d^{(1)})^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\Gamma_1 + \eta(\omega)}{1 + \eta(\omega)} \text{Im} \chi_d(\omega), \quad (7)$$

где $\eta(\omega) = [e^{i\beta\omega} - 1]^{-1}$, а $\chi_d(\omega)$ - восприимчивость, связанная с дефектом, которую определим ниже.

Представим $u^{(1)}(x, t)$ в виде разложения по полному набору ортонормированных собственных функций $\{\Psi\}$ линейного самосопряженного оператора L ($L\Psi = -\Psi'' + (2 - 3ch^{-2}x/\sqrt{2})\Psi = \omega^2\Psi$):

$$u^{(1)}(x, t) = \beta_0^{(1)}(t) \Psi_0(x) + \beta_1^{(1)}(t) \Psi_1(x) + \int dq \beta_q^{(1)}(t) \Psi_q(x). \quad (8)$$

Собственные функции $\{\Psi\}$ и собственные значения имеют вид^{2,8/}:

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{3\sqrt{2}}{8}} ch^{-2} \frac{x}{\sqrt{2}}, \quad \omega_0^2 = 0 \quad (9a)$$

$$\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{3\sqrt{2}}{2}} \tanh \frac{x}{\sqrt{2}} ch^{-1} \frac{x}{\sqrt{2}}, \quad \omega_1^2 = \frac{3}{2} \quad (9b)$$

$$\Psi_q(x) = e^{\frac{iqX}{2}} \frac{3th^2 \frac{X}{\sqrt{2}} - 3iq th \frac{X}{\sqrt{2}} - (1+q^2)}{[2\pi(1+q^2)(4+q^2)]^{1/2}}, \quad \omega_q^2 = 2 + \frac{q^2}{2}. \quad (9b)$$

Подставляя (8) в (6a) и используя ортонормированность базиса $\{\Psi\}$, найдем систему неоднородных дифференциальных уравнений для коэффициентов $\{\beta_j^{(i)}\}$. Решение этой системы уравнений в линейном по ε приближении при начальных условиях $\beta_j^{(i)}(t=0) = \beta_j^{(i)'}(t=0) = 0$ имеет вид

$$\beta_0^{(i)}(t) = \beta_0^{(i)'} \left[\frac{t}{\gamma} - \frac{1}{\gamma^2} (1 - e^{-\gamma t}) \right] - \frac{h\sqrt{3V_2}}{\omega^2 + i\delta\omega} \left[e^{-i\omega t} - 1 + \frac{i\omega}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \right], \quad (10a)$$

$$\beta_1^{(i)}(t) = \beta_1^{(i)'} \left[1 - e^{-\frac{\gamma t}{2}} \left(\cos \tilde{\omega}_1 t + \frac{\gamma}{2\tilde{\omega}_1} \sin \tilde{\omega}_1 t \right) \right], \quad (10б)$$

$$\beta_q^{(i)}(t) = \beta_q^{(i)'} \left[1 - e^{-\frac{\gamma t}{2}} \left(\cos \tilde{\omega}_q t + \frac{\gamma}{2\tilde{\omega}_q} \sin \tilde{\omega}_q t \right) \right] - \frac{2\sqrt{\pi} h \delta(q)}{\omega^2 + i\delta\omega - \omega_q^2} \left[e^{-i\omega t} - e^{-\frac{\gamma t}{2}} \left(\cos \tilde{\omega}_q t + \frac{\gamma}{2\tilde{\omega}_q} \left(1 - \frac{2i\omega}{\gamma} \right) \sin \tilde{\omega}_q t \right) \right], \quad (10в)$$

где $\tilde{\omega}_1^2 = \omega_1^2 - \gamma^2/4$, $\tilde{\omega}_q^2 = \omega_q^2 - \gamma^2/4$ и

$$\beta_c^{(i)} = \sqrt{\frac{3V_2}{8}} \alpha \left[\varphi_{od} + th \frac{x_0 - x_d}{\sqrt{2}} \right] ch^{-2} \frac{x_0 - x_d}{\sqrt{2}}, \quad (11a)$$

$$\beta_1^{(i)} = -\frac{\sqrt{3V_2}}{3} \alpha \left[\varphi_{od} + th \frac{x_0 - x_d}{\sqrt{2}} \right] th \frac{x_0 - x_d}{\sqrt{2}} ch^{-1} \frac{x_0 - x_d}{\sqrt{2}}, \quad (11б)$$

$$\beta_q^{(i)} = \alpha I_q^*(x_d - x_0) \left[\varphi_{od} + th \frac{x_0 - x_d}{\sqrt{2}} \right] / \omega_q^2. \quad (11в)$$

Для малых значений $t/\gamma \ll 1$ решение (3), (4) и (8) можно привести к виду

$$\varphi(x,t) \approx th \frac{x - x_0 + at^2}{2} + \beta_1^{(i)}(t) \Psi_1(x) + \int dq \beta_q^{(i)}(t) \Psi_q(x), \quad (12)$$

здесь $a = \sqrt{3V_2} \beta_0^{(i)'} / 4$ - ускорение солитона, движение которого направлено к дефекту.

Полученное решение показывает изменение формы стенки при ее взаимодействии с дефектом. На рис. 1 показано это изменение при взаимодействии стенки с сохраняющим симметрию дефектом. Расчеты проводились

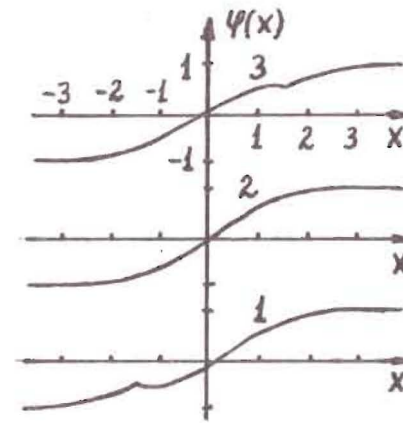


Рис. 1. Изменение формы кинка при взаимодействии с сохраняющим симметрию дефектом.

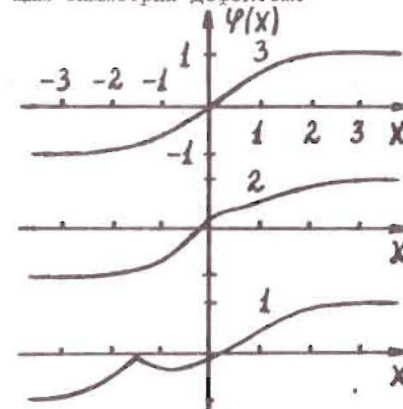


Рис. 2. Изменение формы кинка при взаимодействии с не сохраняющим симметрию дефектом.

Помимо изменения формы стенки, дефекты могут приводить к ее закреплению. Энергия связи стенки с дефектом определяется как разность энергий стенки, когда она находится в поле потенциала дефекта и вдали от него [10, 11]:

$$E_B = E_\infty - E_d = E(x_0 \rightarrow \infty) - E(x_0 = x_d), \quad (13)$$

где $E = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-\infty}^{x_d} 2V[\varphi(x,t)] dx$,

$$V[\varphi(x,t)] = -\varphi'^2/2 - \varphi^2/2 + \varphi^4/4 + \frac{\alpha}{2} \delta(x - x_d) [\varphi - \varphi_{od}]^2.$$

Используя (3), (4), (8), получаем

$$E_B = (\kappa \xi_0 / 2\ell) [1 + 2(1 + \sqrt{2}/4) \psi_{od}], \quad (I4)$$

где ξ_0 - ширина стенки.

Если кинетическая энергия стенки $E_{кин}$ меньше энергии связи с дефектом, то система будет "закреплена" дефектом. В приближении идеального газа стенок $E_{кин} = m^* \delta^2 / 2$, где $m^* = 2\sqrt{2} m(A/B) / 3 \xi_0 \ell$ - эффективная масса стенки $/13/$. Из условия $E_{кин} = E_B$ можно получить значение критической скорости $v_{кр}$ движения стенки, при которой происходит ее закрепление. Используя (I4), видим, что $v_{кр} \sim \xi_0$ - ширине стенки для обоих типов дефектов.

При повышении температуры плотность стенок n увеличивается. В результате взаимодействие между стенками может привести к "освобождению" и свободному их распространению. Такой механизм освобождения стенок при их закреплении решеткой был рассмотрен в работе $/14/$. При малой концентрации дефектов их можно рассматривать изолированными, а вклад их в физические величины аддитивным. При этом предположении энергия закрепления стенок дефектами (на одну частицу) равна $E_{pin} = p E_B$. Оценка для энергии взаимодействия стенок между собой была получена в работе $/14/$:

$$E_{int} = 4n E_0 \exp[-\ell / \sqrt{2} n \xi_0], \quad n \ll 1, \quad (I5)$$

здесь $E_0 = 8\sqrt{2} \xi_0 / 3\ell$ - энергия стенки. Как было показано в работе $/11/$, в области применимости непрерывного предела, когда $\xi_0 / \ell \gg 1$, закрепление происходит главным образом за счет дефектов, а не решетки. Поэтому эффекты закрепления на решетке мы здесь учитывать не будем.

Критическую плотность $n_{кр}$ определим из условия $E_{int} = E_{pin}$, которое, с учетом (I4) и (I5), приводит к уравнению

$$d p \frac{\xi_0}{\ell} [1 + 2(1 + \frac{\sqrt{2}}{4}) \psi_{od}] = \frac{64\sqrt{2}}{3} \frac{\xi_0}{\ell} n_{кр} \exp[-\frac{\ell}{\sqrt{2} \xi_0 n_{кр}}] \quad (I6)$$

Как видно, величина $n_{кр}$ определяется шириной стенки, концентрацией дефектов и мощностью потенциала. На рис. 3 показана зависимость величины $n_{кр}$ от $\delta = \xi_0 / \ell$ при фиксированных значениях $y = d \cdot p$ для сохраняющих симметрию дефектов. Аналогичные зависимости получаются и для нарушающих симметрию дефектов.

Учитывая связь плотности стенок с температурой $/13/$:

$n = (2\pi T / m^* \delta^2)^{1/2} \exp[-E_0 / T]$, уравнение (I6) можно использовать для определения критической температуры $T_{кр}$, при которой происходит освобождение стенок. Поведение $T_{кр}$ в зависимости от δ и y аналогично поведению $n_{кр}$, показанному на рис. 3.

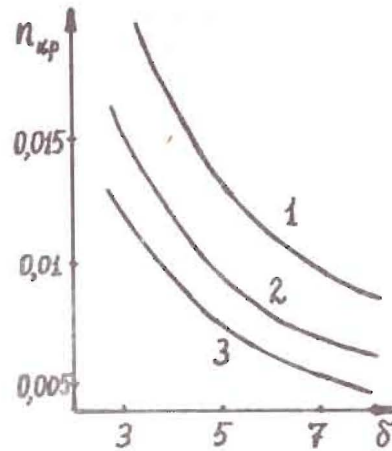


Рис. 3. Зависимость критической плотности стенок от их ширины при $y = 10^{-5}$; 10^{-7} ; 10^{-9} (кривые 1, 2, 3 соответственно).

4. ВОСПРИИМЧИВОСТЬ

Восприимчивость системы вычислим согласно определению:

$$\chi_q(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{-\infty}^{\infty} dx dt \frac{\partial u(x, t)}{\partial h} e^{-i(\omega t - qx / \sqrt{2})} \quad (I7)$$

Как видно из выражений (I0), восприимчивость в первом порядке теории возмущений не содержит членов, пропорциональных d , т.е. в присутствии дефекта она не меняется. Такой же вывод был получен в работе $/15/$ для модели Изинга с дефектами типа случайного поля.

Найдем решение (3) во втором порядке теории возмущений. Рассмотрим сохраняющие симметрию дефекты. Используя (8)-(II) при $X_0 = X_d$, получаем

$$u^{(1)}(\omega) = h \left[\frac{3}{2} \chi_0(\omega) - \frac{\sqrt{2}}{2} \chi_{q=0}(\omega) \right], \quad (I8)$$

где

$$\chi_0(\omega) = -[\omega^2 + i\gamma\omega]^{-1}, \quad \chi_{q=0}(\omega) = -[\omega^2 + i\gamma\omega - \omega_q^2]^{-1} \quad (I9)$$

С помощью преобразования Фурье в уравнении (6б), используя (I8), находим

$$u_d^{(1)}(\omega) = -h \frac{1 + \frac{3}{2} d \chi_0(\omega) - \frac{\sqrt{2}}{2} d \chi_{q=0}(\omega)}{\frac{m_d}{m} \omega^2 + i\gamma_d \omega - \omega_d^2} \quad (20)$$

Тогда из выражений (7) и (20) можно найти корреляционную функцию флуктуаций дефекта

$$\langle (u_d^{(1)})^2 \rangle = \frac{\sqrt{m/md}}{\pi} \times \begin{cases} \left[\frac{\pi}{2} + \arctg \frac{\omega_d}{\tilde{\gamma}_d} \right] (4\omega_d^2 - \tilde{\gamma}_d^2)^{-1/2}, & \omega_d > \frac{\tilde{\gamma}_d}{2} \equiv \frac{m}{md} \frac{\tilde{\gamma}_d}{2} \\ 2 \ln \frac{\tilde{\gamma}_d}{\omega_d} (\tilde{\gamma}_d^2 - 4\omega_d^2)^{-1/2}, & \omega_d < \frac{\tilde{\gamma}_d}{2}. \end{cases} \quad (21)$$

Уравнение для $u^{(2)}(x,t)$ имеет вид

$$\ddot{u}^{(2)} - u''^{(2)} + \left[2 - 3ch^{-2} \frac{x-x_0}{\sqrt{2}} \right] u^{(2)} + \gamma \dot{u}^{(2)} = -\alpha \delta(x-x_d) [u^{(1)}(x,t) - u_d^{(1)}(x_d,t)]. \quad (22)$$

Используя для отклонений $u^{(2)}(x,t)$ разложение типа (8) с коэффициентами $\{\beta_j^{(2)}(t)\}$ и действуя по схеме предыдущего раздела, находим

$$\beta_c^{(2)} = \alpha \sqrt{\frac{3\sqrt{2}}{8}} \frac{u^{(1)}(\omega) - u_d^{(1)}(\omega)}{\omega^2 + i\gamma\omega}, \quad \beta_0^{(2)}(\omega) = 0, \quad (23)$$

$$\beta_q^{(2)} = -\alpha \sqrt{\frac{1+q^2}{2\pi(4+q^2)}} \frac{u^{(1)}(\omega) - u_d^{(1)}(\omega)}{\omega^2 + i\gamma\omega - \omega_q^2}. \quad (24)$$

Таким образом, Фурье-образ поправки второго порядка в (3) имеет вид

$$u^{(2)}(x,\omega) = \beta_0^{(2)}(\omega) \Psi_0(x) + \int_{-\infty}^{\infty} dq \beta_q^{(2)}(\omega) \Psi_q(x). \quad (25)$$

Подставляя (8) и (25) в (17), получаем выражение для восприимчивости:

$$\chi_q(\omega) = \chi_q^{(1)}(\omega) + \chi_q^{(2)}(\omega), \quad (26)$$

$$\chi_q^{(1)}(\omega) = \frac{3\sqrt{2}}{4} \frac{q}{\text{sh} \frac{\pi q}{2}} \chi_0(\omega) + \left[2\delta(q) - \frac{3q}{2 \text{sh} \frac{\pi q}{2}} \right] \chi_{q=0}(\omega), \quad (26a)$$

$$\chi_q^{(2)}(\omega) = \frac{\sqrt{3\sqrt{2}}}{4} \frac{q}{\text{sh} \frac{\pi q}{2}} \frac{\beta_0^{(2)}(\omega)}{h} + \frac{2-q^2}{\sqrt{\pi(1+q^2)(4+q^2)}} \frac{\beta_q^{(2)}(\omega)}{h}. \quad (26b)$$

Основной вклад в восприимчивость дают возмущенные дефектом две моды: фононная и голдстоуновская, связанная с нарушением стеной трансляционной симметрии в системе. Используя малость α в (26), выпишем соответствующие восприимчивости, полюса которых определяют спектр возбуждений:

$$\chi_{q \rightarrow 0}^{ph}(\omega) = \frac{3}{\pi} \left[\omega^2 + i\omega\gamma - \omega_{q=0}^2 + \frac{\alpha}{12} + \frac{\alpha^2/12}{\frac{md}{m} \omega^2 + i\gamma\omega - \omega_d^2} \right]^{-1}, \quad (27)$$

$$\chi_q^{ph}(\omega) = -\frac{3\sqrt{2}}{4} \frac{q}{\text{sh} \frac{\pi q}{2}} \left[\omega^2 + i\gamma\omega - \frac{3\sqrt{2}}{8} \alpha + \frac{3\sqrt{2} \alpha^2/8}{\frac{md}{m} \omega^2 + i\gamma\omega - \omega_d^2} \right]^{-1}. \quad (28)$$

Заметим, что в первом порядке по α и при $q=0$ выражение (28) с точностью до численного множителя перед α совпадает с выражением для восприимчивости, полученным в [2]. Результат работы [2] получается, если в уравнении (6a) при $u_d^{(1)} = 0$ сохранить член $\alpha \delta(x-x_d) u^{(1)}$, который является величиной порядка ϵ^2 . В этом случае коэффициент $\beta_0^{(1)}$ не зависит от α , в результате чего поправка $u^{(1)}(x,t)$ в (3) оказывается порядка величины $\varphi_0(x)$, что противоречит содержанию представления (3).

Характер динамики дефекта определяется величиной затухания γ_d . В зависимости от соотношения γ_d и ω_d^2 возможны два режима: "медленный" $\gamma_d \gg \omega_d$ и "быстрый" $\gamma_d \ll \omega_d$ релаксации.

Рассмотрим медленно релаксирующий дефект. Представим фононную восприимчивость в стандартном виде:

$$\chi_{q \rightarrow 0}^{ph} = \frac{3}{\pi} \left[\omega^2 + i\gamma\omega - \tilde{\omega}_{q=0}^2 - \frac{\delta^2 \nu}{\nu - i\omega} \right]^{-1}, \quad (29)$$

где введены обозначения

$$\delta^2 = \frac{\alpha^2}{12 \omega_d^2}, \quad \nu = \frac{\omega_d^2}{\gamma_d}, \quad \tilde{\omega}_{q=0}^2 = \omega_{q=0}^2 - \frac{\alpha}{12}. \quad (30)$$

Соответствующая функция рассеяния, или корреляционная функция флуктуаций плотности частиц [6]:

$$S_q^1(\omega) = [1+n(\omega)] \frac{1}{\pi N} \text{Im} \chi(\omega), \quad n(\omega) = \left[e^{\frac{\omega}{T}} - 1 \right]^{-1}, \quad (31)$$

будет содержать три пика - два фононных с полушириной $\gamma/2$, центрированных относительно $\omega = \pm \tilde{\omega}_q$, и центральный с максимумом при $\omega = 0$. В низкочастотном пределе при $\gamma \ll \omega_{0q}$ получаем

$$S_q^{10}(\omega) = [1+n(\omega)] \frac{1}{\pi N} \frac{\delta^2}{\tilde{\omega}_q^2 \omega_{0q}^2} \frac{\gamma \omega}{\omega^2 + \gamma_d^2}, \quad (32)$$

где $\omega_{0q}^2 = \tilde{\omega}_q^2 + \delta^2$, $\gamma_d' = \nu \tilde{\omega}_q^2 / \omega_{0q}^2$.

Таким образом, медленно релаксирующий дефект приводит к сдвигу фононной частоты на величину $\alpha/12$ и появлению центрального пика с шириной γ' . Кроме того, критические возбуждения в модели, определяемые обратной статической восприимчивостью, имеют частоту ω_{0q} вместо ω_q при отсутствии дефектов.

Для голдстоуновской моды (28) получаем

$$\delta_g^{\prime}(\omega) \approx [1 + n(\omega)] \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{2q d^{-1}}{\text{sh} \frac{Tq}{2}} \frac{\delta_1' \omega}{\omega^2 + \gamma_1'^2}. \quad (33)$$

Таким образом, возникает центральный пик, ширина которого

$$\delta_1' \approx \delta_0' \left[1 - \frac{\delta d}{\omega d^2} \delta_0' \right], \quad \delta_0' = \frac{3\sqrt{2} d}{8\delta} \quad (34)$$

определяется как параметрами матрицы, так и дефекта.

В случае быстро релаксирующего дефекта фононная восприимчивость (27) содержит две ветви, соответствующие фононной и дефектной модам. В сечении рассеяния будут наблюдаться пики при $\omega = \pm(\omega_{q=c}^2 - d/I_2)$ и $\omega = \pm \omega_d$. Восприимчивости (28) будут соответствовать два пика с максимумами при $\omega = \pm \omega d$ и центральный пик с функцией рассеяния вида (33) с шириной

$$\delta_2' = \delta_0' [1 + d/\omega_d^2], \quad (35)$$

где δ_0' определено в (34).

Следовательно, быстро релаксирующий дефект приводит к сдвигу фононной частоты и образованию ширины у центрального пика.

До сих пор мы рассматривали сохраняющие симметрию дефекты. Нарушающий симметрию дефект может находиться только в режиме быстрой релаксации и его влияние на динамику системы аналогично описанному выше.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

Полученные выше результаты позволят сделать некоторые заключения о влиянии релаксирующих дефектов на динамику стенок кластеров ближнего порядка в одномерной системе. Сохраняющие симметрию и нарушающие симметрию дефекты по-разному влияют на форму стенки. В первом случае при прохождении через дефект стенка не меняется, во втором же случае она сдвигается и приподнимается (или опускается), причем это воздействие несимметрично. В обоих случаях стенка приобретает ускорение, направленное в сторону дефекта. Так что, если кинетическая энергия стенки меньше энергии закрепления на дефекте, то она прекратит свое движение. При некоторой критической концентрации стенок они могут возобновить свое движение в результате взаимодействия друг с другом. Нарушающие симметрию дефекты имеют большую энергию закрепления.

Спектр возбуждений в системе существенно зависит от того, находится ли дефект в режиме быстрой или медленной релаксации. В первом случае в функции рассеяния будут наблюдаться боковые пики, связанные с фононной модой и колебаниями дефекта, а также центральный пик, обусловленный закрепленной голдстоуновской модой. Ширина этого центрального пика

обратно пропорциональна времени релаксации кинка в результате его взаимодействия с дефектом. Можно сказать, что в этом случае появление центрального пика вызвано динамикой стенок кластеров.

В случае медленно релаксирующего дефекта картина иная. Боковые пики обусловлены только рассеянием на фононах, а центральный пик вызван голдстоуновской модой и дефектом. При этом релаксация кинка замедляется по сравнению с предыдущим случаем. Можно заключить, что при наличии медленно релаксирующих дефектов собственная динамика кластеров в сильной степени "маскируется" динамикой дефектов. Разделить их вклады в центральный пик весьма трудно. Для этого можно использовать зависимость функции рассеяния от квазиимпульса (ср. (32) и (33)).

Отметим, что дефекты в обоих случаях приводят к сдвигу фононной частоты, более сильному при наличии медленно релаксирующих дефектов. Результатом этого является то, что мягкая фононная мода уже не является критической модой — она "замораживается". Критической теперь является солитонная мода. Этот эффект аналогичен эффекту рассеяния фононов на самих стенках [13].

Мы рассмотрели дефекты типа замещения в модели (I). В реальных системах возможны и другие типы дефектов. Часто рассматривают дефект, взаимодействие которого с кинком описывается потенциалом вида $V(x) = -d \delta(x-x_d) \partial \varphi(x) / \partial x$. Расчеты, аналогичные проведенным выше, показывают, что такой дефект также приводит к закреплению стенки, его вклад в восприимчивость системы имеет вид (26), но с другими числовыми коэффициентами. Следовательно, анализ, проведенный в разделе 4, полностью может быть перенесен и на этот случай.

ЛИТЕРАТУРА

1. Брус А., Каули Р. Структурные фазовые переходы. "Мир", М., 1984.
2. Дороговцев С.Н., Ктиторов С.А. ФТТ, 1978, 20, № 6, с.1882.
3. Schmidt H., Schwabl F. Z.Physik B, 1978, 30, No.2, p.197.
4. Bayeriswyl D., Bishop A.R. J.Phys.C, 1980, 13, No.8, p.1403.
5. Абдуллаев Ф.Х. ФТТ, 1984, 26, № 9, с.2675.
6. Аксенов В.Л., Плакида Н.М., Стаменкович С. Рассеяние нейтронов сегнетоэлектриками. "Энергоатомиздат", М., 1984.
7. Бишоп А. В кн.: Солитоны в действии. "Мир", М., 1981, с.72.
8. Wada Y., Schrieffer J.R. Phys.Rev.B, 1978, 18, No.8, p.3897.
9. De Dominicis C. Lect.Notes in Phys., 1979, 104, p.251.
10. Rice T.M., Whitehouse S., Littlewood P. Phys.Rev.B, 1981, 24, No.5, p.2751.

11. Aksenov V.L., Didyk A.Yu., Žakula R. Lect.Notes in Phys., 1985, 217, p.500.
12. Fogel M.B., Trullinger S.E., Bishop A.R., Krumhansl J.A. Phys. Rev.Lett., 1976, 36, No.24, p.1411.
13. Аксенов В.Л., Дидык А.Ю., Юанхай В.Ю. ФНТ, 1982, 8, № 6, с.628.
14. Bak P., Pokrovsky V.L. Phys.Rev.Lett., 1981, 47, No.13, p.958.
15. Морозов А.И., Сигов А.С. ФТТ, 1983, 25, № 8, с.2297.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 июля 1985 года.

Аксенов В.Л., Дидык А.Ю., Жакула Р. P17-85-564
Влияние релаксирующих дефектов на динамику виртуальных
доменных стенок

Исследовано влияние сохраняющих и нарушающих симметрию дефектов на динамику кинков в одномерной скалярной модели ϕ^4 . Рассмотрено изменение формы кинков, условия их закрепления, а также поведение восприимчивости и функций рассеяния для дефектов в режиме быстрой и медленной релаксации.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод О.С.Виноградовой

Aksenov V.L., Didyk A.Yu., Zakula R. P17-85-564
The Influence of Relaxing Defects on Dynamics of Virtual
Domain Walls

The influence of conserving and breaking symmetry defects on kinks dynamics in one-dimensional scalar ϕ^4 - model is investigated. The change of the kinks form, conditions of their pinning and behavior of susceptibility and scattering function for defects in regime of fast and slow relaxation are considered.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985