Письма в ЖЭТФ, том 77, вып. 10, с. 659 – 663

Влияние упругих деформаций на критическое поведение трехмерных систем с эффектами дальнодействия

С. В. Белим[1)]

Омский государственный университет, 644077 Омск, Россия

Поступила в редакцию 31 марта 2003 г.

Осуществлено теоретико-полевое описание поведения изинговских сжимаемых систем с эффектами дальнодействия в двухпетлевом приближении непосредственно в трехмерном пространстве с применением техники суммирования Паде–Бореля. Проведен анализ ренормгрупповых уравнений и выделены фиксированные точки, определяющие критическое поведение системы. Показано, что влияние упругих деформаций на системы с эффектами дальнодействия приводит к смене режима как критического, так и мультикритического поведения.

PACS: 64.60.–i

В сжимаемых системах связь параметра порядка с упругими деформациями играет важную роль. Как было показано в [1], для упруго-изотропного тела критическое поведение сжимаемых систем с квадратичной стрикцией неустойчиво относительно связи параметра порядка с акустическими модами, и реализуется фазовый переход первого рода, близкий ко второму. Однако выводы работы [1] справедливы только в области низких давлений и, как показано в [2], в области высоких давлений, начиная с некоторого трикритического значения P_t, деформационные эффекты, индуцируемые внешним давлением, оказывают на систему более радикальное влияние, приводя к смене знака эффективной константы взаимодействия флуктуаций параметра порядка и, как следствие, рода фазового перехода. При этом в [2] для однородных сжимаемых систем предсказывается два типа трикритического поведения и существование критической точки четвертого порядка, в которой пересекаются две трикритические кривые. Расчеты, проведенные в рамках двухпетлевого приближения [3], подтвердили наличие двух типов трикритического поведения для изинговских систем и позволили получить значения трикритических индексов.

При структурных фазовых переходах с отсутствием пьезоэффекта в парафазе упругие деформации играют роль вторичного параметра порядка, флуктуации которого в большинстве случаев не являются критическими.

Влияние эффектов дальнодействия, описываемого на больших расстояниях степенным законом $1/r^{-D-a}$, было исследовано аналитически в рамках ε-разложения [4 – 6] и численно методом Монте-Карло [7 – 9] для двумерных и одномерных систем, и показало существенность влияния эффектов дальнодействия на критическое поведение изинговских систем для значений параметра $a < 2$. Исследование непосредственно в трехмерном пространстве в двухпетлевом приближении [10] подтвердило предсказание ε-разложения для систем с дальнодействием.

В настоящей работе описывается критическое и трикритическое поведение трехмерных сжимаемых систем с учетом эффектов дальнодействия при различных значениях параметра a.

Гамильтониан однородной изингоподобной модели с учетом упругих деформаций и эффектов дальнодействия может быть записан в виде

$$H_0 = \int d^Dx[\frac{1}{2}(\tau_1 + \nabla^a)S(x)^2 + \frac{u_0}{4!}(S(x)^2)^2] + \\ + \int d^Dx[a_1(\sum_{\alpha=1}^{3} u_{\alpha\alpha}(x))^2 + a_2 \sum_{\alpha,\beta=1}^{3} u_{\alpha\beta}^2] + \\ + \frac{1}{2}a_3 \int d^Dx\mathbf{S}(x)^2(\sum_{\alpha=1}^{3} u_{\alpha\alpha}(x)), \quad (1)$$

где $S(x)$ – скалярный параметр порядка, u_0 – положительная константа, $\tau_0 \sim |T - T_c|/T_c$, T_c – температура фазового перехода, $u_{\alpha\beta}$- тензор деформаций, a_1, a_2 – упругие постоянные кристалла, a_3 – параметр квадратичной стрикции. Переходя в (1) к фурье-образам переменных и интегрируя по слагаемым, зависящим от нефлуктуирующих переменных, не взаимодействующих с параметром порядка $S(x)$, и вводя для удобства новую переменную $y(x) = \sum_{\alpha=1}^{3} u_{\alpha\alpha}(x)$, получим гамильтониан системы в следующем виде:

[1)] e-mail: belim@univer.omsk.su

$$H_0 = \frac{1}{2}\int d^D q(\tau_0 + q^a) S_q S_{-q} +$$
$$+ \frac{u_0}{4!}\int d^D q_i S_{q1} S_{q2} S_{q3} S_{-q1-q2-q3} +$$
$$+ a_3 \int d^D q y_{q1} S_{q2} S_{-q1-q2} +$$
$$+ \frac{a_3^{(0)}}{\Omega} y_0 \int d^D q S_q S_{-q} +$$
$$+ \frac{1}{2} a_1 \int d^D q y_q y_{-q} + \frac{1}{2}\frac{a_1^{(0)}}{\Omega} y_0^2. \qquad (2)$$

В (2) выделены слагаемые y_0, описывающие однородные деформации. Как показано в работе [1], такое разделение необходимо, так как неоднородные деформации y_q отвечают за обмен акустическими фононами и приводят к эффектам дальнодействия, которые отсутствуют при однородных деформациях.

Определим эффективный гамильтониан системы, зависящий только от сильно флуктуирующего параметра порядка S, следующим образом:

$$\exp\{-H[S]\} = B \int \exp\{-H_R[S, y]\} \prod dy_q. \qquad (3)$$

Если эксперимент осуществляется при постоянном объеме, то y_0 является константой, интегрирование в (3) проводится только по неоднородным деформациям и однородные деформации вклада в эффективный гамильтониан не вносят. При постоянном давлении в гамильтониан добавляется слагаемое $P\Omega$, объем представляется в терминах компонент тензора деформации в виде

$$\Omega = \Omega_0[1 + \sum_{\alpha=1} u_{\alpha\alpha} + \sum_{\alpha\neq\beta} u_{\alpha\alpha} u_{\beta\beta} + O(u^3)] \qquad (4)$$

и интегрирование в (3) осуществляется также и по однородным деформациям. Как отмечено в [11], учет в (4) квадратичных слагаемых может оказаться важным в случае высоких давлений и кристаллов с большими стрикционными эффектами. Пренебрежение в [1] данными квадратичными слагаемыми ограничивает применение результатов работы Ларкина и Пикина только к случаю низких давлений. В результате

$$H = \frac{1}{2}\int d^D q(\tau_0 + q^a) S_q S_{-q} +$$
$$+ \left(\frac{u_0}{4!} - \frac{z_0}{2}\right)\int d^D\{q_i\} S_{q1} S_{q2} S_{q3} S_{-q1-q2-q3} +$$
$$+ \frac{1}{2\Omega}(z_0 - w_0)\int d^D\{q_i\} S_{q1} S_{-q1} S_{q2} S_{-q2}, \qquad (5)$$
$$z_0 = a_1^2/(4a_3), \quad w_0 = a_1^{(0)2}/(4a_3^{(0)}).$$

Возникающий в гамильтониане эффективный параметр взаимодействия $v_0 = u_0 - 12z_0$ за счет влияния стрикционных эффектов, определяемых параметром z_0, может принимать не только положительные, но и отрицательные значения. В результате данный гамильтониан описывает фазовые переходы как первого, так и второго родов. При $v_0 = 0$ в системе реализуется трикритическое поведение. В свою очередь, эффективное взаимодействие в (5), определяемое разностью параметров $z_0 - w_0$, при $z_0 - w_0 > 0$ может вызывать в системе фазовый переход второго рода, а при $z_0 - w_0 < 0$ – фазовый переход первого рода. Из данного вида эффективного гамильтониана следует возможность осуществления критической точки более высокого порядка, в которой пересекаются трикритические кривые, при одновременном выполнении условий $v_0 = 0$, $z_0 = w_0$ [2]. Следует отметить, что при трикритическом условии $z_0 = w_0$ гамильтониан модели (5) изоморфен гамильтониану однородной жесткой системы.

В рамках теоретико-полевого подхода [12] асимптотическое критическое поведение и структура фазовых диаграмм во флуктуационной области определяются ренорм-групповым уравнением Каллана–Симанчика для вершинных частей неприводимых функций Грина. Для вычисления β- и γ-функций как функций, входящих в уравнение Каллана-Симанчика перенормированных вершин взаимодействия $u, a_1, a_1^{(0)}$ или более удобных для определения критического и трикритического поведения модели комплексных вершин $z = a_1^2/4a_3$, $w = a_1^{(0)2}/4a_3^{(0)}$, $v = u - 12z$ был применен стандартный метод, основанный на диаграммной технике Фейнмана и процедуре перенормировки [13] с пропогатором $G_0(\mathbf{k}) = 1/(\tau + |\mathbf{k}|^a)$. В результате, в рамках двухпетлевого приближения были получены следующие выражения для β- и γ-функций:

$$\beta_v = -(4 - D)v\Big[1 - 36vJ_0 + 1728\Big(2J_1 - J_0^2 - \frac{2}{9}G\Big)v^2\Big],$$

$$\beta_z = -(4-D)z\Big[1 - 24vJ_0 - 2zJ_0 + 576(2J_1 - J_0^2 - \frac{2}{3}G)v^2\Big],$$

$$\beta_w = -(4 - D)w \times$$
$$\times \Big[1 - 24vJ_0 - 4zJ_0 + 2wJ_0 + 576(2J_1 - J_0^2 - \frac{2}{3}G)v^2\Big],$$

$$\gamma_t = (4 - D) \times$$
$$\times\Big[-12vJ_0 - 2zJ_0 + 2wJ_0 + 288\Big(2J_1 - J_0^2 - \frac{1}{3}G\Big)v^2\Big],$$

$$\gamma_\varphi = (4 - D)96Gv^2, \qquad (6)$$

$$J_1 = \int \frac{d^D q d^D p}{(1 + |\mathbf{q}|^a)^2(1 + |\mathbf{p}|^a)(1 + |q^2 + p^2 + 2\mathbf{pq}|^{a/2})},$$

$$J_0 = \int \frac{d^D q}{(1+|\mathbf{q}|^a)^2},$$

$$G = -\frac{\partial}{\partial |\mathbf{k}|^a} \times$$

$$\int \frac{d^D q d^D p}{(1+|q^2+k^2+2\mathbf{kq}|^a)(1+|\mathbf{p}|^a)(1+|q^2+p^2+2\mathbf{pq}|^{a/2})}.$$

Переопределяя эффективные вершины взаимодействия:

$$v = \frac{v}{J_0}, \qquad z = \frac{z}{J_0}, \qquad w = \frac{w}{J_0}, \tag{7}$$

приходим в результате к следующему выражению для β- и γ-функций:

$$\beta_v = -(4-D)v\Big[1 - 36v + 1728\Big(2\widetilde{J_1} - 1 - \frac{2}{9}\widetilde{G}\Big)v^2\Big],$$

$$\beta_z = -(4-D)z\Big[1 - 24v - 2z + 576(2\widetilde{J_1} - 1 - \frac{2}{3}\widetilde{G})v^2\Big],$$

$$\beta_w = -(4-D)w \times$$

$$\times \Big[1 - 24v - 4z + 2w + 576(2\widetilde{J_1} - 1 - \frac{2}{3}\widetilde{G})v^2\Big], \tag{8}$$

$$\gamma_t = (4-D)\Big[-12v - 2z + 2w + 288\Big(2\widetilde{J_1} - 1 - \frac{1}{3}\widetilde{G}\Big)v^2\Big],$$

$$\gamma_\varphi = (4-D)96\widetilde{G}v^2.$$

Такое переопределение преобретает смысл при значениях $a \le D/2$. При этом J_0, J_1, G становятся расходящимися функциями. Вводя же пеараметр обрезания Λ и рассматривая предел отношений

$$\frac{J_1}{J_0^2} = \frac{\int_0^\Lambda \int_0^\Lambda d^D q d^D p/((1+|\mathbf{q}|^a)^2(1+|\mathbf{p}|^a)(1+|q^2+p^2+2\mathbf{pq}|^a))}{\Big[\int_0^\Lambda d^D q/(1+|\mathbf{q}|^a)^2\Big]^2}, \tag{9}$$

$$\frac{G}{J_0^2} = \frac{-\partial/(\partial|\mathbf{k}|^a)\int_0^\Lambda \int_0^\Lambda d^D q d^D p/((1+|q^2+k^2+2\mathbf{kq}|^a)(1+|\mathbf{p}|^a)(1+|q^2+p^2+2\mathbf{pq}|^a))}{\Big[\int_0^\Lambda d^D q/(1+|\mathbf{q}|^a)^2\Big]^2}.$$

при $\Lambda \to \infty$ получаем конечные выражения.

Значения интегралов находились численно. Для случая $a \le D/2$ строилась последовательность значений J_1/J_0^2 и G/J_0^2 при различных Λ и аппроксимировалась на бесконечность.

Известно, что ряды теории возмущений являются асимптотическими, а вершины взаимодействия флуктуаций параметров порядка во флуктуационной области достаточно велики, чтобы можно было непосредственно применять выражения (8). Поэтому с целью извлечения из полученных выражений нужной физической информации был применен обобщенный на трехпараметрический случай метод Паде-Бореля. При этом прямое и обратное преобразования Бореля имеют вид

$$f(v,z,w) = \sum_{i_1,i_2,i_3} c_{i_1,i_2,i_3} v^{i_1} z^{i_2} w^{i_3} = $$

$$= \int_0^\infty e^{-t} F(vt, zt, wt)dt, \tag{10}$$

$$F(v,z,w) = \sum_{i_1,i_2,i_3} \frac{c_{i_1,i_2,i_3}}{(i_1+i_2+i_3)!} v^{i_1} z^{i_2} w^{i_3}.$$

Для аналитического продолжения борелевского образа функции вводится ряд по вспомогательной переменной θ:

$$\tilde{F}(v,z,w,\theta) = \sum_{k=0}^\infty \theta^k \sum_{i_1,i_2,i_3} \frac{c_{i_1,i_2,i_3}}{k!} v^{i_1} z^{i_2} w^{i_3} \delta_{i_1+i_2+i_3,k}, \tag{11}$$

к которому применяется аппроксимация Паде [L/M] в точке $\theta = 1$. Данная методика была предложена и апробирована в работе [14] для описания критического поведения ряда систем, характеризующихся несколькими вершинами взаимодействия флуктуаций параметра порядка. Выявленное в [14] свойство сохранения симметрии системы в процессе применения паде-аппроксимант по переменной θ становится существенным при описании многовершинных моделей.

В двухпетлевом приближении для вычисления β-функций был использован аппроксимант [2/1]. Природа критического поведения определяется существованием устойчивой фиксированной точки, удовлетворяющей системе уравнений

$$\beta_i(v^*, z^*, w^*) = 0 \quad (i = 1,2,3). \tag{12}$$

N	v^*	z^*	w^*	b_1	b_2	b_3	ν	η
$a = 1.9$								
1	0.042067	0	0	0.684	−0.184	−0.184	0.620054	0.013420
2	0.044353	0.095190	0	0.684	0.185	0.183	0.713861	0.013420
3	0.044353	0.095190	0.095190	0.684	0.185	−0.185	0.620054	0.013420
4	0	0.5	0	−1	1	1	1	0
5	0	0.5	0.5	−1	1	−1	0.5	0
$a = 1.8$								
1	0.023230	0	0	0.628	−0.488	−0.488	0.572714	0.007461
2	0.023230	0.245404	0	0.628	0.489	0.490	0.704621	0.007461
3	0.023230	0.245404	0.245404	0.628	0.489	−0.489	0.572714	0.007461
4	0	0.5	0	−1	1	1	1	0
5	0	0.5	0.5	−1	1	−1	0.5	0
$a = 1.7$								
1	0.020485	0	0	0.699	−0.532	−0.532	0.567334	0.004862
2	0.020485	0.266497	0	0.699	0.533	0.532	0.706051	0.004862
3	0.020485	0.266497	0.266497	0.699	0.533	−0.533	0.567334	0.004862
4	0	0.5	0	−1	1	1	1	0
5	0	0.5	0.5	−1	1	−1	0.5	0
$a = 1.6$								
1	0.015974	0	0	0.874	−0.616	−0.616	0.557889	0.003936
2	0.015974	0.309684	0	0.874	0.617	0.620	0.711578	0.003936
3	0.015974	0.309684	0.309684	0.874	0.617	−0.618	0.557889	0.003936
4	0	0.5	0	−1	1	1	1	0
5	0	0.5	0.5	−1	1	−1	0.5	0
$a = 1.5$								
1	0.015151	0	0	0.919	−0.635	−0.635	0.555566	0.002647
2	0.015151	0.316966	0	0.919	0.636	0.630	0.712195	0.002647
3	0.015151	0.316966	0.316966	0.919	0.636	−0.636	0.555566	0.002647
4	0	0.5	0	−1	1	1	1	0
5	0	0.5	0.5	−1	1	−1	0.5	0

Требование устойчивости фиксированной точки сводится к условию, чтобы собственные значения b_i матрицы

$$B_{i,j} = \frac{\partial \beta_i(u_1^*, u_2^*, u_3^*)}{\partial u_j} \quad (u_i, u_j \equiv v, z, w) \tag{13}$$

лежали в правой комплексной полуплоскости. Фиксированная точка с $v^* = 0$, соответствующая трикритическому поведению, является седловой точкой и должна быть устойчивой в направлениях, задаваемых переменными z, w, и неустойчивой в направлении, определяемом переменной v. Стабилизация трикритической фиксированной точки в направлении, задаваемом переменной v, осуществляется в результате учета в эффективном гамильтониане модели членов шестого порядка по флуктуациям параметра порядка. Фиксированная точка с $z^* = w^*$, соответствующая трикритическому поведению второго типа, является также седловой точкой и должна быть устойчивой в направлениях, задаваемых переменными v, z, и неустойчивой в направлении, определяемом переменной w. Ее стабилизация может осуществляться за счет влияния ангармонических эффектов.

Полученная система просуммированных β-функций содержит широкое разнообразие фиксированных точек. В таблице приведены наиболее интересные для описания критического и трикритического поведения фиксированные точки, лежащие в физической области значений вершин с $v, z, w \geq 0$. Здесь приведены также собственные значения матрицы устойчивости для соответствующих фиксированных точек и критические индексы ν, η.

Анализ значений фиксированных точек и их устойчивости позволяет сделать ряд выводов. Качественно картина критических явлений выглядит одинаково при любых значениях параметра дальнодействия a. Критическое поведение несжимаемых систем неустойчиво относительно деформационных степеней свободы (точки №1). Устойчивой оказывается фиксированная точка при постоянной деформации (точки № 2). Фиксированные точки № 3 описывают первый тип трикритического поведения сжимаемых систем, наблюдаемый при постоянном давлении. Фиксированные точки № 4 являются трикритическими для систем, исследуемых при постоянном объеме. Точки № 5 являются критическими точками четвертого порядка, в них пересекаются две трикритические линии.

Для трикритического поведения первого типа (точки № 3) гамильтониан (5) изоморфен гамильтониану однородной несжимаемой модели, поэтому и критические индексы совпадают с индексами несжимаемой модели. Трикритическое поведение второго типа (точки № 4) соответствует критическому поведению сферической модели и определяется соответствующими индексами. Фиксированные точки четвертого порядка (точки № 5) характеризуются среднеполевыми значениями критических индексов.

Достаточно большие значения эффективных вершин z и w по сравнению с короткодействующими системами [3] связано с тем, что основной механизм влияния упругих деформаций на критические явления связан с зависимостью интеграла взаимодействия в модели Изинга от расстояния между узлами решетки.

Проведенные исследования показали существенность влияния упругих деформаций на критическое поведение систем с дальнодействием, проявляющееся как в изменении значений критических индексов для изинговских систем, так и в появлении мультикритических точек на фазовых диаграммах вещества.

1. А. И. Ларкин, С. А. Пикин, ЖЭТФ **56**, 1664 (1969).
2. Y. Imry, Phys. Rev. Lett. **33**, 21, 1304 (1974).
3. С. В. Белим, В. В. Прудников, ФТТ **45**, 1299 (2001).
4. M. E. Fisher, S.-k. Ma, and B. G. Nickel, Phys. Rev. Lett. **29**, 917 (1972).
5. J. Honkonen, J. Phys. **A23**, 825 (1990).
6. E. Luijten and H. Mebingfeld, Phys. Rev. Lett. **86**, 5305 (2001).
7. E. Bayong and H. T. Diep, Phys. Rev. **B9**, 11920 (1999).
8. E. Luijten, Phys. Rev. **E60**, 7558 (1999).
9. E. Luijten and H. W. J. Bloöte, Phys. Rev. **B56**, 8945 (1997).
10. С. В. Белим, Письма в ЖЭТФ **77**, 118 (2003).
11. D. J. Bergman and B. I. Halperin, Phys. Rev. **B13**, 2145 (1976).
12. D. Amit, *Field theory the renormalization group and critical phenomena*, New York, McGraw-Hill, 1976.
13. J. Zinn-Justin, *Quantum field theory and critical phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1989.
14. A. I. Sokolov and K. B. Varnashev, Phys. Rev. **B59**, 8363 (1999).