Письма в ЖЭТФ, том 35, вып. 8, стр. 315 – 318 20 апреля 1982 г.

ВОЗНИКНОВЕНИЕ НЕОДНОРОДНЫХ СОСТОЯНИЙ В СИСТЕМАХ С ДВУМЯ ПАРАМЕТРАМИ ПОРЯДКА

А.Л.Корженевский

Исследована возможность возникновения в кристалле неоднородной сверхструктуры, обусловленная наличием ангармонического, линейного по градиентам, взаимодействия двух параметров порядка. Показано, что это взаимодействие становится эффективно сильным в области развитых флуктуаций, при этом в системе произойдет фазовый переход первого рода в неоднородное состояние.

Принято считать, что возникновение неоднородной фазы (НФ), в рамках феноменологического подхода, является следствием нарушения условия Лифшица, либо связывать с наличием минимума частоты мягкой моды $\omega(\mathbf{q})$ при "случайном" значении $\mathbf{q} = \mathbf{q}_0$ [1,2]. В работе [3] было указано на возможность появления НФ за счет нелифшицевских градиентных инвариантов (кубических по компонентам параметра порядка). Свойства фазовых переходов в такие НФ были исследованы в [4,5]. Ниже будет показано, что наряду с перечисленными случаями, НФ может также возникать в системах с двумя параметрами порядка, взаимодействие которых содержит ангармонический член, линейный по градиентам.

В качестве простейшего примера подобной системы рассмотрим модель двух связанных однокомпонентных полей $\phi(\mathbf{x})$ и $\psi(\mathbf{x})$, термодинамический потенциал которой имеет вид

$$\Phi = \Phi_0 + \int d\mathbf{x} \left[\frac{1}{2} r_1 \phi^2 + \frac{1}{2} r_2 \psi^2 + \frac{1}{2} g_1 (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{2} g_2 (\nabla \psi)^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{4!} (u_0 \phi^4 + 2\lambda_0 \phi^2 \psi^2 + v_0 \psi^4) + \frac{1}{2} b_0 \phi^2 \frac{d\psi}{dz} \right]. \tag{1}$$

Здесь r_1, r_2 – гладкие функции внешних параметров, обращающиеся в нуль на линиях ФП по полям $\phi(\mathbf{x})$, $\psi(\mathbf{x})$ соответственно, $u_0, v_0, \lambda_0 > 0$, $\lambda_0 < (u_0 v_0)^{1/2}$. Потенциал (1) описывает, например, поведение кристалла, в котором происходит структурный ФП с удвоением периода элементарной ячейки (в частности, антиферромагнитный) или ферромагнитный ФП, а также структурный ФП без изменения объема элементарной ячейки.

Уже в рамках теории Ландау можно убедиться, что вблизи точки пересечения линий ФП $r_1 = r_2 \equiv r = 0$ образование НФ становится энергетически выгодным для достаточно больших значений коэффициента b_0. Используем вариационный принцип, выбрав пробные функции $\phi(\mathbf{x}) = \rho\cos(qz)$, $\psi(\mathbf{x}) = \rho\sin(2qz)$. Минимизируя на них потенциал (1), вычислим значения варьируемых параметров $\widetilde{\rho}, \widetilde{q}$:

$$\widetilde{q}^2 = \frac{-r}{(g_1 + 4g_2)(x-1)}, \qquad \widetilde{\rho} = \frac{-(g_1 + 4g_2)}{b_0}\widetilde{q}, \tag{2}$$

где безразмерный параметр $x = (g_1 + 4g_2)(u_0 + v_0 - \frac{4}{3}\lambda_0)/4b_0^2$, и получим выражение для потенциала неоднородной фазы $\Phi_{\text{нф}}(\widetilde{\rho}, \widetilde{q})$:

$$\Phi_{\text{нф}} - \Phi_0 = -\frac{(g_1 + 4g_2)\, r^2}{(x-1)\, b_0^2}. \tag{3}$$

Сравнивая (3) с потенциалом однородной фазы $\Phi_{\text{оф}}$:

$$\Phi_{\text{оф}} - \Phi_0 = -\frac{3(u_0 + v_0 - 2\lambda_0)\, r^2}{2(u_0 v_0 - \lambda_0^2)} \tag{4}$$

находим, что при $x = 1 + \delta^2$, $\delta^2 << 1$ в точке пересечения линий $r = 0$ произойдет ФП второго рода в НФ. Если значение параметра $x < 1$, то уже при $r > 0$ произойдет ФП первого рода в НФ. Линия этих ФП может быть найдена при включении в (1) членов шестого порядка [1)].

Изучим, как влияют на возникновение НФ критические флуктуации. Пусть система находится вблизи линии $r_1 = 0$, где поле $\varphi(x)$ сильно флуктуирует, а $\psi(x)$ – некритическое поле. Покажем, что наличие градиентной связи $\phi(x)$ и $\psi(x)$ может привести к неустойчивости относительно образования НФ. В качестве наводящего соображения заметим, что первая флуктуационная поправка к коэффициенту g_2 отрицательна и сингулярным образом зависит от r_1: $\Delta g_2 \sim - b_0^2/\sqrt{r_1}$. В области сильных флуктуаций поля $\phi(x)$ нельзя, конечно, делать каких-либо заключений о характере ФП по виду одной этой поправки, а необходимо учесть вклады и других сингулярных при $r_1 \to 0$ графиков. Это можно сделать, если допустить, что период возникающей НФ $L >> r_c$ – радиуса корреляции $\phi(x)$. Из этого предположения, справедливость которого показана ниже, вытекает, что наличие градиентной связи в (1) при $r_1 \to 0$ сводится к замене $r_1 \to \widetilde{r}_1 = \left(r_1 + b_0 \dfrac{d\psi}{dz}\right)$, и сингулярная часть термодинамического потенциала Φ_s может быть представлена как однородная функция $\widetilde{r}_1$ [6 2)]:

$$\Phi_s = - \frac{3}{2u_0^{1-2a}} |\widetilde{r}_1|^{2-a}. \tag{5}$$

Потенциал слабофлуктуирующего поля $\psi(x)$ принимает вид

$$\Phi = \Phi_0 + \int dx \left\{ - \frac{3}{2u_0^{1-2a}} \left| r_1 + b_0 \frac{d\psi}{dz} \right|^{2-a} + \frac{1}{2} r_2 \psi^2 + \frac{1}{4!} v_0 \psi^4 + \frac{1}{2} g_2 \left(\frac{d\psi}{dz} \right)^2 \right\}. \tag{6}$$

Равновесную конфигурацию $\psi(x)$, для которой функционал (6) имеет минимальное значение, можно найти из уравнения Эйлера:

$$\left(g_2 - \epsilon \left| r_1 + b_0 \frac{d\psi}{dz} \right|^{-a} \right) \frac{d^2\psi}{dz^2} - \left(r_2 + \frac{v_0}{6} \psi^2 \right) \psi = 0, \tag{7}$$

где $\epsilon = 3b_0^2(2 - a)(1 - a)/2u_0^{1-2a}$. Чтобы выяснить качественный характер его решений, введем переменные $\psi(x) = x$, $d\psi/dz = y$ и запишем уравнение изоклин:

$$\frac{dx}{dy} = \frac{y(g_2 - \epsilon |r_1 + b_0 y|^{-a})}{x\left(r_2 + \frac{v_0}{6} x^2\right)}. \tag{8}$$

Переменные в нем разделяются, и общий интеграл имеет вид

$$\left(r_2 + \frac{v_0}{12} x^2 \right) x^2 = g_2 y^2 - \frac{2\epsilon}{b_0^2} \left[\frac{|r_1 + b_0 y|^{2-a}}{(2-a)} \mp \frac{r_1 |r_1 + b_0 y|^{1-a}}{(1-a)} \right] + \frac{3r_1^{2-a}}{u_0^{1-2a}} + C \equiv \Theta(r_1, y, C), \tag{9}$$

---

1) Соответствующие формулы вполне аналогичны полученным в [5] для описания ФП в НФ в кубических сегнетоэлектриках.

2) В выражениях (5), (6) для простоты опущен член $\lambda_0 \phi^2 \psi^2$, так как флуктуационный ФП в неландаусскую однородную фазу невозможен $(\lambda_0 < (u_0 v_0)^{1/2})$ [6], и учет этого члена не влияет качественно на структуру диаграммы состояний.

где знаки (∓) отвечают условиям $y \gtrless - r_1/b_0$, C – константа интегрирования. График функции $\Theta(y)$ при $r_1 < (1-a)(\epsilon/g_2)^{1/a}/2(2-a)$ приведен на рисунке. Цифры (1), (2), (3) соответствуют значениям $C_1 = 0, 0 < C_2 < C_3$, $\Theta(b_0 y = -r_1 + (\epsilon/g_2)^{1/a}, C_3) = 0$. Из рисунка видно, что при $0 < C < C_3$ траектории на плоскости (x, y) замкнутые, следовательно, уравнение (7) обладает периодическими решениями. Численные расчеты показывают, что с уменьшением r_1 периоды таких решений растут, и имеется область значений r_1, в которой $L \gg r_c$. В то же время значения потенциала (6) оказывается для них **меньше**, чем для решения, описывающего ФП в однородную фазу. Отсюда следует, что при некотором $r_1^* > 0$ в системе произойдет ФП первого рода в НФ. Этот вывод тесно связан с расходимостью теплоемкости ($a > 0$) для эффективно однокомпонентного поля флуктуаций, например, ФП в кубическом кристалле, сжатому (растянутому) вдоль одной оси. Вместе с тем, так как НФ возникает при конечном $r_1 = r_1^*$ расходимость теплоемкости не является необходимым условием, и для появления НФ достаточен резкий рост теплоемкости системы в области $r_1 \gtrsim r_1^*$.

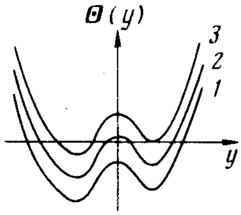

График функции $\Theta(y)$ при трех разных значениях постоянной интегрирования

Для анализа критического поведения вблизи точки пересечения линий $r_1 = r_2 = 0$ применим метод ренормгруппы. Система уравнений Гелл-Манна – Лоу для перенормированных безразмерных зарядов b^2, u, v, λ[1)] имеет вид

$$\frac{db^2}{dt} = -b^2 + 3ub^2 - \frac{3}{2}b^4, \qquad \frac{d\lambda}{dt} = -\lambda + \frac{9}{2}\lambda^2 + \frac{1}{2}v^2,$$

$$\frac{du}{dt} = -u + \frac{9}{2}u^2 + \frac{1}{2}v^2 - \frac{3}{2}(3u+v)b^2 + \frac{9}{4}b^4, \tag{10}$$

$$\frac{dv}{dt} = -v + \frac{3}{2}(u+\lambda)v + 2v^2 - \frac{9}{4}\left(\lambda + \frac{v}{3}\right)b^2, \qquad t = -\frac{1}{2}\ln r_c.$$

При $b = 0$ у этих уравнений имеется устойчивая фиксированная точка (ФТ) $u^* = v^* = \lambda^* = 1/5$ [6,7], соответствующая асимптотическому повышению симметрии до $O(2)$. При включении градиентной связи система (10) теряет устойчивые ФТ. Численное интегрирование показывает, что в пространстве перенормированных зарядов b, u, v, λ есть область, отвечающая затравочным значениям параметра $x \gg 1$, для которой флуктуации приводят к усилению градиентной связи и вызывают ФП первого рода в НФ. Само существование такой области можно обнаружить аналитически, заметив, что вблизи ФТ Изинга ($u = 2/9$, $\lambda = 0$, $v_{1,2} = 2/9$, 0) и $O(2)$ отношение b^2/u растет при $r_c \to \infty$ как $r_c^{1/3}$ и $r_c^{2/5}$ соответственно.

Полученные выше результаты показывают, что при решении вопроса о возможности появления НФ в кристаллах, испытывающих несколько ФП, существенен учет градиентной связи параметров порядка, отвечающих различным неприводимым представлениям высокосимметричной фазы.

[1)] Множитель нормировки равен $(24\pi)^{-1}$, например, $u = (24\pi)^{-1} r_c^{1/2} u(q_i = 0, r_c)$.

Благодарю С.А.Бразовского, С.Л.Гинзбурга, А.И.Соколова, Д.Е.Хмельницкого, Б.Н.Шалаева за полезные обсуждения вопросов, рассмотренных в этой статье.

Литература

1. *Дзялошинский И.Е.* ЖЭТФ, 1964, **46**, 1420; 1964, **47**, 992.

2. *Cowley R.A., Bruce A.D.* Jour. of Phys., 1978, **C11**, 3577.

3. *Асланян Т.А., Леванюк А.П.* ФТТ, 1978, **20**, 804.

4. *Логинов Е.Б.* Кристаллография, 1979, **24**, 1109.

5. *Корженевский А.Л.* ЖЭТФ, 1981, **81**, 1071.

6. *Люксютов И.Ф., Покровский В.Л., Хмельницкий Д.Е.* ЖЭТФ, 1975, **69**, 1817.

7. *Nelson D.R., Kosterlitz J.M., Fisher M.E.* Phys. Rev. Lett., 1974, **33**, 813.

Ленинградский
электротехнический институт
им. В.И.Ульянова(Ленина)

Поступила в редакцию
16 февраля 1982 г.