Письма в ЖЭТФ, том 22, вып. 4, стр 199 – 203 *20 августа 1975 г.*

МАСШТАБНАЯ ИНВАРИАНТНОСТЬ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПЕРВОГО РОДА В КУБИЧЕСКИХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ

А.И.Соколов

В квадратичном приближении для функций Гелл-Манна – Лоу рассмотрен фазовый переход в трехмерной модели с диполь-дипольным взаимодействием. Показано, что при наличии сколь угодно слабой кубической анизотропии фазовый переход является переходом первого рода.

Давно замечено, что фазовые переходы в сегнетоэлектрических кристаллах являются обычно переходами первого рода, близкими ко второму. Наиболее известный пример такого сорта – фазовый переход из ку-

бической фазы в тетрагональную в титанате бария. Принято считать, что это явление связано с влиянием электрострикции на критическую термодинамику кристалла [1, 2]. Электрострикционный механизм превращения непрерывного фазового перехода в переход первого рода не является, однако, единственным. Как будет показано ниже, при наличии диполь-дипольного взаимодействия (которое всегда имеется в сегнетоэлектриках) причиной изменения рода перехода может быть кубическая анизотропия кристалла, причем сколь угодно слабая.

Гамильтониан кубического сегнетоэлектрика в критической области возьмем в виде

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta q} \left[(r_0 + q^2)\, \delta_{\alpha\beta} + \Delta^2 n_\alpha n_\beta \right] \phi_\alpha(q)\, \phi_\beta(-q) +$$

$$+ \frac{1}{4!} \sum_{\substack{\alpha\beta \\ q + q' + q'' + q''' = 0}} \left[2\gamma_2 + (\gamma_1 - 2\gamma_2)\, \delta_{\alpha\beta} \right] \phi_\alpha(q)\, \phi_\alpha(q')\, \phi_\beta(q'') \times$$

$$\times \phi_\beta(q'''), \qquad n_\alpha = q_\alpha / q. \qquad (1)$$

Векторное поле ϕ_α соответствует критическим ветвям спектра системы, затравочная "масса" r_0 линейно зависит от температуры. Величина энергии диполь-дипольного взаимодействия [2, 3] определяется параметром Δ, который в сегнетоэлектриках, где это взаимодействие является сильным, имеет порядок величины импульса обрезания q_D.

Вопрос о роде фазового перехода можно решить, выяснив характер эволюции перенормированных констант связи Γ_1 и Γ_2 как функций температуры при $T \to T_c$ [4 – 6]. Эта эволюция описывается уравнениями ренормализационной группы. Известно, однако, что входящие в эти уравнения функции Гелл-Манна – Лоу точно вычислить не удается, а аппроксимировать их в интересующей нас области отрезками степенных рядов можно только для $(4 - \epsilon)$-мерных моделей, где $\epsilon \ll 1$ [7]. В то же время при наличии в системе диполь-дипольного взаимодействия размерность поля ϕ_α необходимо полагать равной размерности q-пространства [3]. Следовательно, работая в рамках ϵ-разложения, мы вынуждены рассматривать лишь "частично анизотропный" кристалл, у которого "охвачено анизотропией" в гамильтониане (1) только три компоненты поля ϕ_α, а остальные $(1 - \epsilon)$ компонент остаются "изотропными (см., например, [8]). При этом достоверность результатов, получаемых аналитическим продолжением по ϵ, оказывается весьма сомнительной, поскольку в точке $\epsilon = 1$, где анизотропия становится "полной", меняется симметрия гамильтониана. С другой стороны, недавно было обнаружено [9], что уже квадратичное по Γ приближение для функции Гелл-Манна – Лоу дает, несмотря на отсутствие для этого общетеоретических оснований, вполне удовлетворительные результаты непосредственно для трехмерной модели Гайзенберга. Поэтому, имея в виду недостатки ϵ-разложения, мы будем рассматривать сразу трехмерный случай, рассчитывая получить хотя бы качественно верную картину.

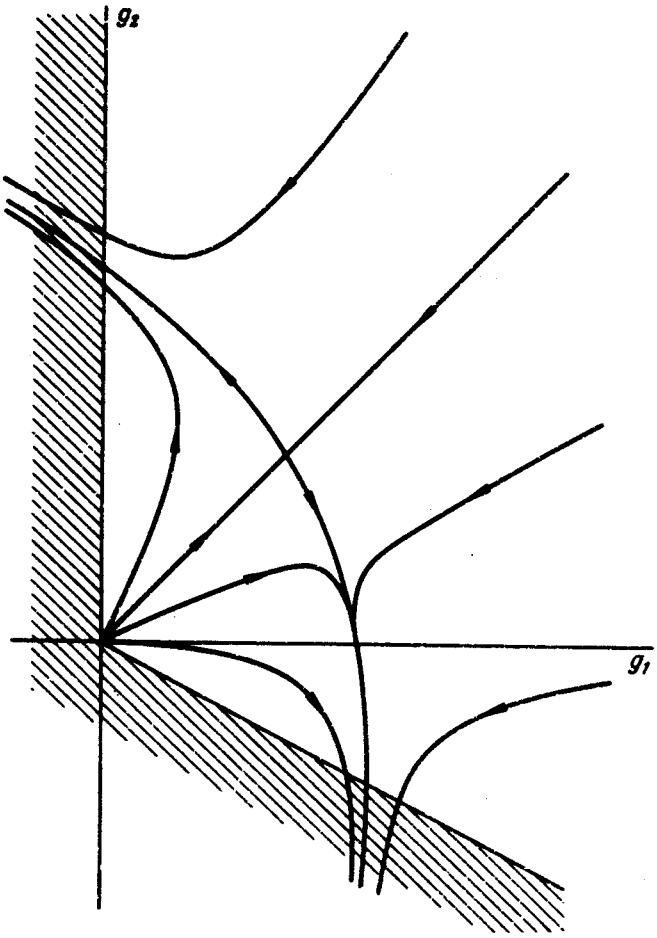
В нашем случае корреляционная функция $G_{\alpha\beta}(q)$ и массовый оператор $\Sigma_{\alpha\beta}(q)$, очевидно, недиагональны. Вспоминая, однако, что $G_{\alpha\beta}(q)$

совпадает с восприимчивостью, нетрудно получить для нее при малых q следующее представление:

$$G_{\alpha\beta}(q) = \frac{\delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta}{r_0 + q^2 - \Sigma(q)} + \frac{n_\alpha n_\beta}{r_0 + \Delta^2 + q^2 - \Sigma(q)}, \quad \Sigma(q) \equiv \Sigma_{\alpha\alpha}(q). \tag{2}$$

Поскольку $\Delta \sim q_D$, продольной компонентой $G_{\alpha\beta}(q)$ можно пренебречь. Дальнейшие операции по выводу уравнений ренормгруппы совершенно стандартны [7, 9]. Делая два вычитания и ограничиваясь в (2) полюсным членом, в пренебрежении индексом η получим

$$G_{\alpha\beta}(q) \approx \frac{\delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta}{r + q^2}. \tag{3}$$



Фазовые траектории системы уравнений (4). Заштрихована область неустойчивости гамильтониана (1)

Разлагая далее производные $d\Gamma_1/dr$ и $d\Gamma_2/dr$ в перенормированный диаграммный ряд с пропагаторами (3) и выделяя скейлинговую асимптотику $\Gamma_1 = 120\pi\sqrt{r}g_1$, $\Gamma_2 = 120\pi\sqrt{r}g_2$, придем к уравнениям Гелл-Манна –

Лоу для $g_1(r)$ и $g_2(r)$. С точностью до второго порядка эти уравнения имеют вид

$$\frac{dg_1}{dt} = \frac{g_1}{2} - 24g_1^2 - 4g_1g_2 - 6g_2^2,$$

$$\frac{dg_2}{dt} = \frac{g_2}{2} - 3g_1^2 - 18g_1g_2 - 13g_2^2, \quad t = -\ln r. \quad (4)$$

Исследование системы (4) элементарно. Она имеет две особые точки: $g_1 = g_2 = 1/68$ и $g_1 = g_2 = 0$; первая из них является седловой, вторая – неустойчивым узлом. Фазовые траектории системы приведены на рисунке. Хорошо видно, что все траектории, кроме "гайзенберговской" ($g_1 = g_2$), уходят за одну из границ области устойчивости, даваемых уравнениями $g_1 = 0$ и $g_1 = -2g_2$. Таким образом, при наличии даже очень слабой анизотропии фазовый переход является переходом первого рода. Последнее характерно именно для систем с диполь-дипольным взаимодействием. Действительно, можно показать, что кубический кристалл с короткодействующим потенциалом и трехмерным параметром порядка испытывает фазовый переход первого рода только при достаточно сильной затравочной анизотропии, а именно, когда $\gamma_2 < 0$ или $\gamma_2 > 3/2\,\gamma_1$.

В заключение отметим некоторые особенности фазового перехода в модели (1), которые характерны также и для перехода в титанате бария. Во-первых, в нашем случае характер фазового перехода определяется взаимодействием критических флуктуаций, т.е. переход происходит, как и в $BaTiO_3$ [2], в области сильных корреляционных эффектов. И во-вторых, как видно из рисунка, по мере приближения к T_c растет эффективная анизотропия модели. Рост анизотропии критических флуктуаций в области фазового перехода в титанате бария также неоднократно отмечался экспериментаторами [10]. Не исключено поэтому, что принадлежность фазовых переходов в $BaTiO_3$ и других перовскитах к переходам первого рода обусловлена, хотя бы отчасти, действием рассмотренного выше механизма.

Я признателен С.Л.Гинзбургу и С.В.Малееву за обсуждение результатов работы.

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

Поступила в редакцию
4 июня 1975 г.

Литература

[1] А.И.Ларкин, С.А.Пикин. ЖЭТФ, 56, 1664, 1969.

[2] В.Г.Вакс. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков, М., изд. "Наука", 1973.

[3] A.Aharony, M.E.Fisher. Phys. Rev., B8, 3323, 1973.

[4] K.G.Wilson, M.E.Fisher. Phys. Rev. Lett., 28, 240, 1972.

[5] И.Ф.Люксютов, В.Л.Покровский. Письма в ЖЭТФ, 21, 22, 1975.

[6] С.А.Бразовский, И.Е.Дзялошинский. Письма в ЖЭТФ, 21, 360, 1975.

[7] T. Tsuneto, E.Abrahams. Phys. Rev. Lett., 30, 217, 1973.

[8] A.Aharony. Phys. Rev., B8, 3358, 1973.

[9] С.Л.Гинзбург. ЖЭТФ, 68, 273, 1975.

[10] Y.Yamada, G.Shirane, A.Linz. Phys. Rev., 177, 848, 1969; J.Harada, J.Axe, G.Shirane. Phys. Rev., B4, 155, 1971.