

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПЕРВОГО РОДА В СИСТЕМАХ С КУБИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

И.Ф. Люксютов, В.Л. Покровский

Показано, что в системе с сильной кубической анизотропией изменение симметрии происходит путем фазового перехода первого рода. Построена фазовая диаграмма, имеющая три критических точки.

Классическим теоретическим примером фазового перехода второго рода является изменение кристаллической модификации. Реальные переходы между кристаллическими модификациями сопровождаются скачками термодинамических величин, хотя иногда и очень малыми. Одна из возможных причин неустойчивости кристалла и появления фазового перехода первого рода – взаимодействие между оптическими и акустическими колебаниями решетки – была исследована Ларкиным и Пикиным [1].

В настоящей работе показано, что другой причиной скачков при переходах из тетрагональной или гексагональной симметрии в ромбическую или моноклинную может явиться сильная анизотропия.

Пусть для определенности исходной симметрией была тетрагональная. Рассмотрим переход, при котором один из атомов ячейки переходит в несимметричное положение. В силу начальной симметрии существует 4 эквивалентных положения, получающихся друг из друга поворотом вокруг оси C_4 . Введем параметры ϕ_1, ϕ_2 , характеризующие да-

лекий порядок в расположении несимметричных атомов. Так, например, $\phi_1 = 1, \phi_2 = 0$ соответствует одинаковому расположению несимметричных атомов во всех ячейках, $\phi_1 = -1, \phi_2 = 0$ отличается от предыдущего положения поворотом на π , а $\phi_1 = 0, \phi_2 = 1$ поворотом на $\pi/2$ вокруг C_4 . Согласно Ландау [2], рассматриваемая система описывается термодинамическим потенциалом.

$$\Phi = \int d^d X \{ (\nabla \phi_1)^2 + (\nabla \phi_2)^2 + \tau (\phi_1^2 + \phi_2^2) + \lambda_1 (\phi_1^4 + \phi_2^4) + \lambda_2 \phi_1^2 \phi_2^2 \}. \quad (1)$$

Область устойчивости системы, описываемой потенциалом (1), определяется неравенством $\lambda_1 > 0, -2 \leq \gamma_0 < \infty$, где $\gamma_0 = \lambda_2/\lambda_1$. Потенциал Φ инвариантен относительно преобразования

$$\phi_{1,2} \rightarrow \frac{\phi_1 \pm \phi_2}{\sqrt{2}}, \quad \gamma_0 \rightarrow \frac{6 - \gamma_0}{1 + \gamma_0/2} \quad (2)$$

переводящего области $-2 < \gamma_0 < 2$ и $2 < \gamma_0 < \infty$ друг в друга. В приближении самосогласованного поля при $-2 < \gamma_0 < 2$ происходит фазовый переход второго рода на линии $\tau = 0$ между симметричной фазой $\phi_1 = \phi_2 = 0$ (фаза I) и несимметричной фазой $\phi_1 = \pm \phi_2 \neq 0$ (фаза II). В области $\gamma_0 > 2$ в несимметричной фазе $\phi_1 \neq 0, \phi_2 = 0$ или наоборот (фаза III). Следовательно, должна существовать линия фазовых переходов первого рода между фазами II и III. В силу симметрии (2) это прямая $\gamma_0 = 2$. Оказывается, на диаграмме состояния системы, описываемой потенциалом (1), в плоскости γ_0, τ есть еще две линии фазовых переходов первого рода.

Система двух связанных скалярных полей с потенциалом (1) исследовалась в работе Вилсона и Фишера [3] методом рекурсионных уравнений для пространства размерности $d = 4 - \epsilon$. Оказалось, что решение рекурсионных уравнений (неподвижная точка) существует лишь в области $0 \leq \gamma_0 \leq 6$. В этой области ренормированные константы взаимодействия Λ_1 и Λ_2 по мере увеличения масштаба стремятся к фиксированным значениям, так что отношение $y = \Lambda_2/\Lambda_1$ в пределе равно 2. Потенциал (1) становится изотропным относительно вращения в плоскости ϕ_1, ϕ_2 . Мы рассмотрим области $-2 < \gamma_0 < 0$ и $\gamma_0 > 6$. Преобразование (2) переводит их друг в друга, так что достаточно рассмотреть область $-2 < \gamma_0 < 0$.

В случае 4-мерного пространства ренормированные вершины Λ_1 и Λ_2 определяются уравнениями группы ренормировок [4], которые в первом приближении имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{d\Lambda_1}{d\xi} &= -36\Lambda_1^2 - \Lambda_2^2 & \Lambda_1 \Big|_{\xi=0} &= \lambda_1 \\ \frac{d\Lambda_2}{d\xi} &= -24\Lambda_1\Lambda_2 - 8\Lambda_2^2 & \Lambda_2 \Big|_{\xi=0} &= \lambda_2 \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\xi = \min \left\{ \ln \frac{1}{p}, \ln \frac{1}{\sqrt{r}} \right\}$, p — импульс. Явное решение урав-

нений (3) мы не выписываем ввиду громоздкости. Существенно, что при $y_0 < 0$ функция $y(\xi)$ монотонно убывает и обращается в $-\infty$ при некотором конечном ξ_0 . Это означает, что при другом значении ξ_1 , зависящем от y_0 , y достигает границы области устойчивости $y = -2$.

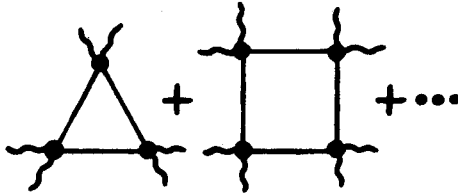


Рис. 1. Примеры кольцевых диаграмм

В случае слабой связи граница устойчивости $\xi_1(y_0)$ мало отличается от кривой равновесия фаз. При этом гамильтониан (1) нестабилен, и необходимо учитывать ангармонизмы более высокого порядка, чем четвертый. Анализ показывает, что главный вклад вносят кольцевые диаграммы¹⁾ (рис. 1). При $y_0 < 0$ в равновесии могут находиться симметричная фаза I и фаза II. Зная это, легко просуммировать кольцевые диаграммы. Заменяя λ_1 и λ_2 их ренормированными значениями и отбрасывая градиентные члены, получим потенциал конденсата:

$$\Phi = 2r\phi^2 + (2 + y)\Lambda_1\phi^4 + 16 \frac{\Lambda_1}{\pi^2} \phi^4 \ln \frac{16\Lambda_1\phi^2}{r}. \quad (4)$$

Равновесное значение ϕ находится из условия минимума Φ . На кривой равновесия $\Phi = 0$. Уравнения $\Phi = 0$, $\partial\Phi/\partial\phi = 0$ определяют равновесное значение y и кривую равновесия в плоскости y_0, r .

При $y_0 > 6$, в силу инвариантности относительно преобразования (2), при фазовом переходе первого рода появляется фаза III. Интересно, что фазовая диаграмма имеет три трикритических точки $y_0 = 0; 2; 6$ (рис. 2).

Полученные результаты легко продолжить и на пространство размерности $d = 4 - \epsilon$. Для конденсата на кривой равновесия получаем

$$\phi = \text{const} \cdot r^{\frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{4}} |y_0|^{-3 - \frac{3}{4}\epsilon} |y_0| \ll 1.$$

¹⁾ Аналогичное суммирование для случая скалярной электродинамики см. в работе [5].

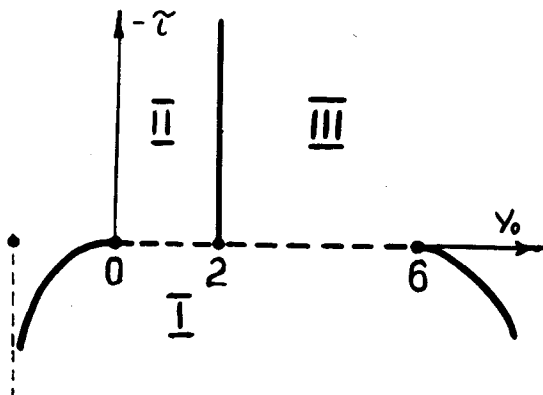


Рис. 2. Фазовая диаграмма состояний

Уравнение кривой равновесия вблизи трикритической точки $\tau = y_0 = 0$ при $y_0 < 0$ имеет вид:

$$\tau = \left(1 + \text{const} \cdot \frac{\epsilon}{|y_0|^3} \right)^{-\frac{2}{\epsilon}} \quad (5)$$

Образование сверхструктур в сплавах с исходной симметрией, T_d образующих объемноцентрированную кубическую решетку, описывается тем же потенциалом (1) [2]. Поэтому наши результаты относятся и к этому случаю.

В реальных системах диаграммы состояния в плоскости топологически эквивалентны диаграмме рис. 2, если изменением температуры и давления можно получить сильную анизотропию. Вид кривой равновесия и теплота перехода, пропорциональная ϕ^2 на кривой перехода, вблизи трикритической точки, остаются неизменными (τ и y_0 — регулярные функции P и T).

Авторы благодарны Д.Е.Хмельницкому за ценные обсуждения.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау

Поступила в редакцию
3 ноября 1974 г.

Литература

- [1] А.И.Ларкин. С.А.Пикин. ЖЭТФ, 56, 1664, 1969.
- [2] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика, М., изд. Наука, 1964.
- [3] К. Wilson, М. Fisher. Phys. Rev. Lett., 28, 240, 1972.
- [4] Н.Боголюбов, Д.Ширков. Введение в теорию квантованных полей, М., 1973.
- [5] S. Coleman, E. Weinberg. Phys. Rev., D7, 1889, 1973.