Письма в ЖЭТФ, том 63, вып.8, стр.623 - 627 © 1996г. 25 апреля

ДАЛЬНИЙ ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ПОРЯДОК В ДВУМЕРНОЙ ВЫРОЖДЕННОЙ СИСТЕМЕ ДИПОЛЕЙ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

В.М.Розенбаум

Институт химии поверхности НАН Украины

252022 Киев, Украина

Поступила в редакцию 23 января 1996 г.

После переработки 20 марта 1996 г.

Показано, что в плоской вырожденной системе на квадратной решетке с диполь-дипольными взаимодействиями электрических или магнитных моментов термодинамические флуктуации разрушают голдстоуновскую моду в спектре ориентационных колебаний. Это приводит к возникновению слоистых антиферроэлектрических структур, характеризующихся ненулевым параметром дальнего ориентационного порядка, который в низкотемпературном пределе пропорционален $\exp(-T|\ln T|)$.

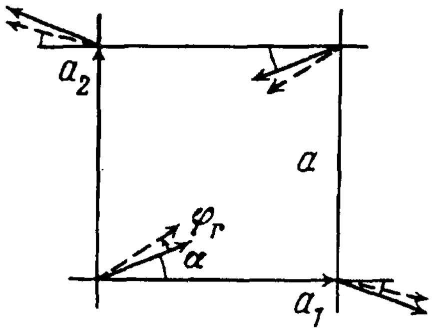
PACS: 71.10.-w

До сих пор считалось, что двумерная вырожденная система диполей на квадратной решетке отличается от аналогичных систем на других плоских решетках Браве отсутствием дальнего ориентационного порядка [1–4]. Действительно, для решеток с осью симметрии не выше второго порядка анизотропия дипольных сил препятствует возникновению голдстоуновской моды в спектре ориентационных колебаний и приводит к изингоподобному поведению системы при низких температурах. Специфический вид закона дисперсии голдстоуновской моды на треугольной решетке диполей обеспечивает устойчивость вырожденного ферроэлектрического основного состояния относительно термодинамических флуктуаций [2,3]. Таким образом, только для квадратной решетки с вихревой структурой дипольных моментов в вырожденном основном состоянии [5,6] существует голдстоуновская мода $J_0(\mathbf{k})$, обращающая в ноль параметр дальнего ориентационного порядка [2–4]:

$$\rho_0^{1/2} = \exp\left[-\frac{T}{2N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{J_0(\mathbf{k})}\right] \tag{1}$$

(здесь T – абсолютная температура, N – количество узлов решетки в основной области; суммирование проводится по первой зоне Бриллюэна).

В данной статье будет показано, что термодинамические флуктуации так перенормируют закон дисперсии ориентационных колебаний $J_0(\mathbf{k})$, что новая функция $J(\mathbf{k})$ (вычисленная при $T \neq 0$) отлична от нуля для всех волновых векторов $\mathbf{k}$. Это приводит к разрушению голдстоуновской моды и возникновению дальнего порядка. Механизм такой перенормировки закона дисперсии связан с известным упорядочивающим воздействием термодинамических флуктуаций на межподрешеточные антиферромагнитные ориентации магнитных моментов, которые были вырожденными в основном состоянии [7,8]. В частности, благодаря этому эффекту возникают слоистые антиферроэлектрические структуры дипольных моментов, коллинеарных одной из осей квадратной решетки [9]. Именно эти структуры оказываются устойчивыми относительно термодинамических флуктуаций. Чтобы доказать это, мы воспользуемся предложенным в [10,11] и обобщенным в [2] самосогласованным вариационным методом вычисления гауссовых флуктуаций двумерных моментов, который является асимптотически точным в области низких температур. Этим методом будут рассчитаны температурные зависимости корреляторов $\rho(\mathbf{r}|\sigma) = \langle\cos(\varphi_{\mathbf{r}'+\mathbf{r}} - \sigma\varphi_{\mathbf{r}'})\rangle$, где $\sigma = \pm 1$, а $\varphi_{\mathbf{r}}$ - угловое отклонение дипольного момента в $\mathbf{r}$ узле решетки относительно соответствующей равновесной ориентации в основном состоянии (рис.1*a*). Параметр дальнего порядка (1) является пределом $\rho^{1/2}(\mathbf{r}|\sigma)$ при $|\mathbf{r}| \to \infty$.



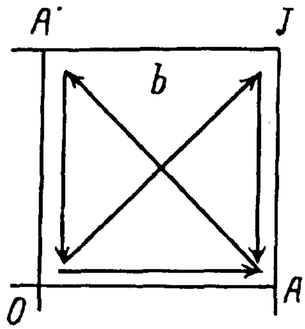


Рис.1. *a*) Вырожденные по углу α ориентации дипольных моментов на квадратной решетке в основном состоянии (сплошные стрелки) и угловые флуктуации (штриховые стрелки); *b*) четверть первой зоны Бриллюэна квадратной решетки с указанием симметричных направлений ее обхода при построении законов дисперсии ориентационных колебаний на рис.2

Ввиду того, что основное состояние диполей, вырожденное по углу наклона дипольных моментов к оси квадратной решетки (рис.1*a*), соответствует симметричным точкам A и A' границы первой зоны Бриллюэна (рис.1*b*), близкодействующая модель дает качественно правильное описание системы с дальними диполь-дипольными взаимодействиями [12]. Поэтому сначала рассмотрим близкодействующую модель, в рамках которой, исходя из общих уравнений работы [2], удается получить, а затем и решить замкнутую систему самосогласованных уравнений относительно четырех корреляторов ближайших соседей $\rho_1 = \rho(\mathbf{a}_1|1)$, $\rho_2 = \rho(\mathbf{a}_2|1)$, $\rho_3 = \rho(\mathbf{a}_1|-1)$ и $\rho_4 = \rho(\mathbf{a}_2|-1)$:

$$\rho_j = e^{-\tau L_j} \quad (j = 1, \ldots, 4), \qquad \tau = T/3V, \qquad V = \mu^2/a^3, \tag{2}$$

$$L_{1,3} = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\pi}^{\pi}\int \frac{1 \mp \cos q_x}{J(q_x, q_y)} dq_x dq_y, \quad L_{2,4} = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\pi}^{\pi}\int \frac{1 \mp \cos q_y}{J(q_x, q_y)} dq_x dq_y, \tag{3}$$

$$J(q_x, q_y) = \rho_3(1+\cos q_x)+\rho_4(1+\cos q_y)+v[\rho_1(1-\cos q_x)-\rho_2(1-\cos q_y)], \quad v = 3^{-1}\cos 2\alpha. \tag{4}$$

Здесь величина $J(q_x, q_y)$, выраженная в единицах характерной энергии диполь-дипольных взаимодействий $3V$ (μ - дипольный момент, a - постоянная квадратной решетки, $\mathbf{q} = \mathbf{k}a$), определяет перенормированный термодинамическими флуктуациями закон дисперсии ориентационных колебаний. При $T = 0$ все корреляторы ρ_j равны единице, и выражение (4) принимает такой же вид, как и в [4]. Эта неперенормированная функция $J_0(q_x, q_y)$, изображенная на рис.2, обращается в нуль в симметричной точке $J(q_x = q_y = \pi)$ первой зоны Бриллюэна. Квадратичная по $\mathbf{q}$ асимптотика $J_0(\mathbf{q})$ вблизи этой точки обусловливает расходимость интеграла от $J_0^{-1}(\mathbf{q})$ и обращение в нуль параметра дальнего порядка (1). Зависимость $J_0(\mathbf{q})$ от параметра вырождения α определяет зависимость от α и свободной энергии системы. Минимизация последней по α указывает на термодинамическую предпочтительность коллинеарных структур с $\alpha = 0$ или $\pi/2$ [9].

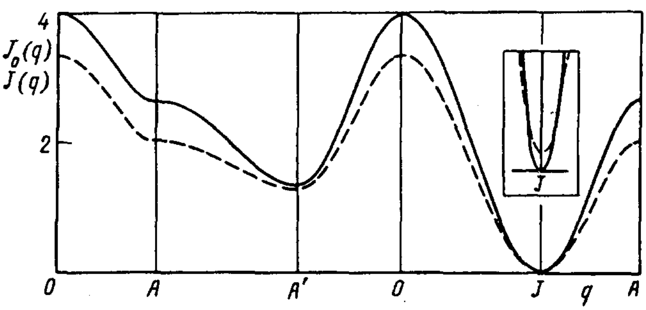


Рис.2. Законы дисперсии $J_0(\mathbf{q})$ при $\tau = 0$ (сплошная линия) и $J(\mathbf{q})$ при $\tau = 0.3$ (штриховая линия) для ориентационных колебаний диполей на квадратной решетке относительно коллинеарной структуры основного состояния ($\alpha = 0$). Направления обхода первой зоны Бриллюэна указаны на рис.1*b*

При $T \neq 0$ из уравнения (4) следует, что $J(\pi,\pi) = 2v(\rho_1 - \rho_2) \neq 0$, если $\rho_1 \neq \rho_2$. Покажем, что система уравнений (2)-(4) в определенной области ненулевых температур действительно имеет решение с $\rho_1 \neq \rho_2$.

Вычисляя интегралы в (3) по первой зоне Бриллюэна, систему уравнений (2)-(4) можно представить в следующем виде:

$$\rho_1 = \rho_0^2/\rho_3, \qquad \rho_2 = \rho_0^2/\rho_4, \qquad \rho_0 = e^{-\tau L_0}; \tag{5}$$

$$L_0 = \frac{1}{\pi}\left[\frac{\rho_3\rho_4}{\rho_3^2\rho_4^2 - v^2\rho_0^4}\right]^{1/2} K(m), \qquad m = \frac{(\rho_3^2 - v\rho_0^2)(\rho_4^2 + v\rho_0^2)}{\rho_3^2\rho_4^2 - v^2\rho_0^4}; \tag{6}$$

$$L_j = \frac{\rho_j}{\rho_j^2 \mp v\rho_0^2}[1 - \Lambda_0(\epsilon_j \backslash m)], \qquad \epsilon_j = \arcsin\left[\frac{\rho_3\rho_4 \pm v\rho_0^2}{\rho_j(\rho_3 + \rho_4)}\right]^{1/2} \quad (j = 3, 4), \tag{7}$$

где $K(m)$ - полный эллиптический интеграл первого рода, $\Lambda_0(\epsilon\backslash m)$ - функция Хеймана [13]. Параметр дальнего порядка $\rho_0^{1/2}$ связывает корреляторы ближайших соседей и принимает ненулевые значения в низкотемпературной области при $\rho_3 < \rho_4$ (последнее неравенство соответствует структурам с $\alpha = 0$, когда $v > 0$, $\rho_1 > \rho_2$ и щель $J(\pi,\pi) > 0$). Полученная система уравнений допускает аналитическое решение в случае малого параметра v:

$$\rho_{3,4} = \rho \mp \delta, \qquad \rho = \exp[-\tau/(2\rho)]; \tag{8}$$

$$\rho_0 = \exp\left\{-\frac{\tau}{2(\pi\rho - 2\tau)}\left|\ln\frac{(\pi-2)v^2\tau}{4\rho^4[2\pi\rho - (\pi-2)\tau]}\right|\right\}, \qquad \tau < \pi\rho/2; \tag{9}$$

$$\delta = \frac{(\pi-2)\rho_0^2 v\tau}{\rho[2\pi\rho - (\pi-2)\tau]}. \tag{10}$$

Уравнение (8) определяет изменение ρ от 1 до $e^{-1} \simeq 0.3679$ при увеличении температурного параметра τ от 0 до $\tau_c = 2e^{-1} \simeq 0.7358$. Однако при несколько меньшем значении $\tau_{c'} = (\pi/2)\exp(-\pi/4) \simeq 0.7162$ знаменатель $\pi\rho - 2\tau$ обращается в нуль, а вместе с ним и параметр дальнего порядка $\rho_0^{1/2}$, что соответствует спонтанному нарушению дискретной симметрии Z_4. Поэтому в узкой температурной области $\tau_{c'} < \tau < \tau_c$ $\rho_0 = \rho_1 = \rho_2 = 0$, $\delta = 0$, корреляторы $\rho_3 = \rho_4 = \rho$ изменяются от $\exp(-\pi/4) \simeq 0.4559$ до e^{-1} и может реализоваться только фаза с ближним порядком. Температурные зависимости $\rho_0, \rho_1, ..., \rho_4$ представлены на рис.3.

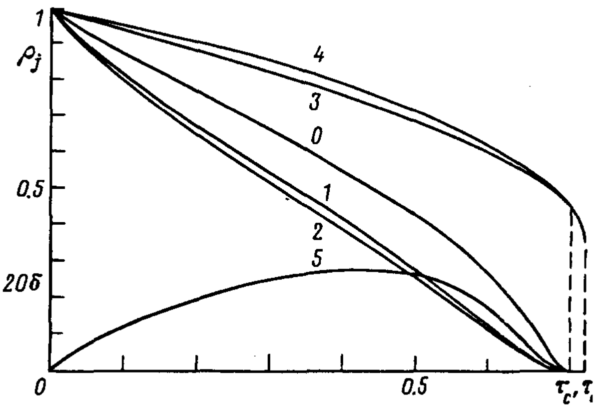


Рис.3. Температурные зависимости параметра дальнего порядка ρ_0 (кривая 0), корреляторов ближайших соседей ρ_j (кривые $j = 1,...,4$) и величины $20\delta = 10(\rho_4 - \rho_3)$ (кривая 5) при $v = 1/3$

Отметим, что использованный здесь метод самосогласования дает обрыв температурных зависимостей корреляторов даже в случае взаимодействия бесконечного радиуса, не зависящего от расстояния между частицами, когда известно, что точное решение задачи соответствует фазовому переходу второго рода [2]. Причина этого состоит в том, что приближение гауссовых флуктуаций углов не справедливо вблизи температуры ориентационного фазового перехода. Поэтому полученный в этом приближении вывод о существовании промежуточной фазы с ближним порядком можно рассматривать лишь как указание на возможность ее возникновения. В то же время, полученное решение является асимптотически точным в области низких температур ($\tau \ll \tau_{c'}$, τ_c) и доказывает возникновение дальнего порядка с параметром $\rho_0 \sim \exp(-T|\ln T|)$. Аналогичная температурная зависимость параметра дальнего порядка была недавно получена для плоского треугольного антиферромагнетика во внешнем магнитном поле [14].

Обсудим теперь изменения, к которым может привести учет дальнодействия дипольных сил. Легко показать, что низкотемпературное поведение корреляторов (5), (8)-(10) обусловлено возникновением в спектре ориентационных колебаний линейной по температуре энергетической щели вблизи точки J первой зоны Бриллюэна (рис.2) и зависит от коэффициентов $C_{x,y}$ квадратичных асимптотик:

$$J(\mathbf{q}_J + \mathbf{q}') \simeq C_0 T + V(C_x q_x'^2 + C_y q_y'^2). \qquad (11)$$

Действительно, подстановка (II) и (I) дает:

$$\rho_0|_{\tau \to 0} = \exp\left[-\frac{3\tau}{4\pi(C_x C_y)^{1/2}} \ln\frac{\text{const}}{\tau}\right]. \qquad (12)$$

В близкодействующей модели $C_x = 1$, $C_y = 2$ и для коллинеарных структур $v = (C_y - C_x)/(C_x + C_y) = 1/3$ (в пределе $v \to 0$ коэффициенты C_x, C_y стремятся к значению 3/2, так что $\rho_0 \to \exp[-\tau|\ln\tau|/2\pi]$ в соответствии с формулой

(9) при $\tau \to 0$. Асимптотики собственных значений фурье-компонент тензоров дальнодействующих дипольных взаимодействий вблизи той же точки J дают: $C_x = 0.1447$, $C_y = 1.7873$ [2,12], так что параметр v оказывается равным 0.8502. Увеличение значения v не меняет вывода о возникновении дальнего порядка в системе, но приводит к более быстрому спаду корреляторов с ростом температуры и уменьшением значений τ_c.

Отметим, что предел $v \to 1$ соответствует переходу к квазиодномерной системе с не взаимодействующими цепочками дипольных моментов. Поэтому не удивительно, что результаты монте-карловского моделирования [4,15] свидетельствуют об уменьшении температуры фазового перехода от значения $T_c = (1.52 \pm 0.01)V$ для близкодействующей модели до значения $T_c \simeq 0.75V$ при учете дальнодействия дипольных сил. Первое значение оказывается близким к температуре фазового перехода $T_c = 1.641V$ в аналогичной точно решаемой дипольной близкодействующей изинговской модели [16], в которой диполи могут иметь 4 дискретные ориентации вдоль диагоналей квадратной решетки, соответствующие $\alpha = \pi/4$.

В заключение автор благодарит профессора C.L.Henley и J.F.Fernandez за ряд полезных критических замечаний. Представленная работа была поддержана Государственным фондом фундаментальных исследований ГКНТ Украины, а также грантом K64100 Правительства Украины и Международного научного фонда.

1. D.M.Danchev, Physica **A163**, 835 (1990).
2. Ю.М.Малозовский, В.М.Розенбаум, ЖЭТФ **98**, 265 (1990).
3. В.М.Розенбаум, ЖЭТФ **99**, 1836 (1991).
4. S.Romano, Physica Scripta **50**, 326 (1994).
5. П.И.Белобров, Р.С.Гехт, В.А.Игнатченко, ЖЭТФ **84**, 1097 (1983).
6. В.М.Розенбаум, В.М.Огенко, ФТТ **26**, 1448 (1984).
7. J.Villain, R.Bidaux, J.P.Carton, and R.Conte, J. Phys. (Paris) **41**, 1263 (1980).
8. Е.Ф.Шендер, ЖЭТФ **83**, 326 (1982).
9. S.Prakash and C.L.Henley, Phys. Rev. **B42**, 6574 (1990).
10. В.Л.Покровский, Г.В.Уймин, ЖЭТФ **65**, 1691 (1973).
11. А.З.Паташинский, В.Л.Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, М.: Наука, 1982.
12. V.M.Rozenbaum, Phys. Rev. **B51**, 1290 (1995); **B 53**, 6240 (1996).
13. *Справочник по специальным функциям* /Под ред. М.Абрамовица и И.Стиган, М.: Наука, 1979.
14. R.Rustelli, A.Tassi, A.Pimpinelli, and S.Sedazzari, Phys. Rev. **B45**, 7936 (1992).
15. S.Romano, Nuovo Cim. **D9**, 409 (1987).
16. В.М.Розенбаум, В.М.Огенко, Письма в ЖЭТФ **35**, 151 (1982).