О РАЗРУШЕНИИ СОЛИТОННОЙ РЕШЕТКИ В ТРЕХМЕРНЫХ НЕСОИЗМЕРИМЫХ КРИСТАЛЛАХ

М. С. Вещунов

Теоретически изучается переход в нормальную фазу, вызываемый разрушением решетки доменных стенок в несоизмеримой фазе трехмерного кристалла. Показано, что для некоторых кристаллов такой переход может происходить в две стадии.

Изучение кристаллов с несоизмеримой структурой вызывает в последнее время большой интерес [1-4]. Наиболее полно в таких кристаллах изучен переход соизмеримая—несоизмеримая (C—I) структура, однако в недавних исследованиях кристаллов BSN [5] особое внимание было уделено переходу из несоизмеримой фазы в нормальную фазу (I—N), происходящему при повышении температуры.

В настоящей работе сделана попытка теоретического описания I—N перехода в нормальную фазу, вызываемого разрушением решетки доменных стенок (или солитонов) в несоизмеримой фазе трехмерного кристалла. В случае кристаллов со структурой BSN такой переход может происходить в две стадии.

В простейшем случае, характеризуемом однокомпонентным комплексным параметром порядка $\eta(x, y, z)$, функционал Ландау, описывающий фазовые переходы в системе с модуляцией в одном направлении (x), имеет вид (см., например, [1])

$$F = F_0 + \int d^3\mathbf{r}\, \{(A/2)\,|\eta|^2 + (L/2)(\eta \cdot \partial\eta^*/\partial x - \eta^* \cdot \partial\eta/\partial x) + (K_1/2)(\partial\eta/\partial x)(\partial\eta^*/\partial x) + (K_2/2)(\partial\eta/\partial y)(\partial\eta^*/\partial y) + (K_3/2)(\partial\eta/\partial z)(\partial\eta^*/\partial z) + (C/4)\,|\eta|^4 + (D/4)\left(\eta^4 + \eta^{*4}\right) + \ldots \tag{1}$$

или в представлении $\eta(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) \exp[i\varphi(\mathbf{r})]$

$$F - F_0 = \int d^3\mathbf{r}\, \{(A/2)\,\rho^2 + (C/4)\,\rho^4 + (D/2)\,\rho^4 \cos 4\varphi + L\rho^2(\partial\varphi/\partial x) + (K_1/2)[(\partial\rho/\partial x)^2 + \rho^2(\partial\varphi/\partial x)^2] + (K_2/2)[(\partial\rho/\partial y)^2 + \rho^2(\partial\varphi/\partial y)^2] + (K_3/2)[(\partial\rho/\partial z)^2 + \rho^2(\partial\varphi/\partial z)^2] + \ldots\, . \tag{2}$$

В приближении $\rho(\mathbf{r}) = \mathrm{const}$, обычно используемом для описания несоизмеримой фазы, функционал принимает стандартный вид, описывающий систему доменных стенок (солитонов), расположенных перпендикулярно направлению модуляции x.

Плотность свободной энергии системы доменных стенок имеет вид [6]

$$f = -\varepsilon_0/l + (w_0/l)\exp(-l/l_0), \tag{3}$$

где l — среднее расстояние между стенками.

Учет флуктуаций, связанных с изгибом и столкновением доменных стенок, приводит к появлению отталкивательного взаимодействия между стенками $\propto l^{-1}\exp(-l^2/l_0^2)$ [7, 8], а учет дополнительных степеней свободы, связанных с вариацией амплитуды ρ или упругими напряжениями в кристалле, может приводить к появлению новых членов, степенным образом зависящих от l и описывающих притяжение между стенками [5].

Возникновение солитонов, свободно перемещающихся в направлении модуляции x, означает; что у несоизмеримой структуры появляется непрерывная группа трансляций, с которыми связаны дополнительные акустические моды. Это позволяет рассмотреть трехмерную кристаллическую решетку, образованную солитонами. В решетке с одномерной периодичностью можно рассматривать смещение солитонов u только в направлении x. Два упругих модуля такой решетки $K_y \propto \rho^2 \varepsilon_0 K_2/(ll_0)$ и $K_z \propto \propto \rho \varepsilon_0 K_3/(ll_0)$ связаны с конечной энергией изгиба солитонов, а модуль сжатия $K = l^2 \partial^2 f/dl^2 |_{\partial f/\partial l=0} \backsim ll_0^{-2} \exp(-l/l_0)$ (ср. с двумерной ситуацией [9, 10]).

Эффективный функционал свободной энергии системы, возникающий в результате сглаживания (2) и описывающий флуктуации в решетке солитонов, принимает вид

$$F = \int dxdydz \left[K_x (\partial u/\partial x)^2 + K_y (\partial u/\partial y)^2 + K_z (\partial u/\partial z)^2\right]. \qquad (4)$$

В системе, описываемой функционалом (4), существуют возбуждения, связанные с возникновением вихрей в солитонной решетке, которые характеризуются ненулевым приращением поля при обходе вокруг линии вихря по замкнутому контуру

$$\oint du = -4lm, \quad m = 0, \mp 1, \mp 2, \ldots . \qquad (5)$$

Энергия вихря растет с увеличением его длины, поэтому при низких температурах существуют лишь петли конечного радиуса. По мере увеличения температуры их радиус увеличивается. Мы покажем, что при некоторой температуре T^* в системе спонтанно возникают разомкнутые, т. е. бесконечно длинные, петли.

Аналогичный (4) функционал описывает λ-переход в сверхтекучем He^4, который может быть связан с появлением бесконечно длинных вихрей [11], приводящим к исчезновению сверхтекучей компоненты плотности ρ. В работах [12-14] было показано, что появление таких вихрей действительно приводит к исчезновению далекого порядка и фазовому переходу в системе (4), а также в более сложных кристаллических системах с векторным полем $\mathbf{u}$, в которых роль вихрей выполняют дислокационные линии. Конечность температуры такого фазового перехода может быть доказана при учете «экранировки» поля, создаваемого вихрями.

В самом деле, энергия единицы длины одиночного бесконечно длинного вихря ($L \to \infty$) очень велика ($\propto \ln L$) и вероятность его возникновения при конечных температурах исчезающе мала. Однако при учете экранировки его поля таким же вихрем с противоположным по знаку «зарядом» (см. (5)) [13] или всей совокупностью вихрей в решетке [14] эта энергия оказывается конечной.

Число различных способов образования замкнутой петли фиксированной длины L пропорционально $N \propto e^{pL}$, $p = \mathrm{const}$, поэтому для свободной энергии вихря получаем оценку [13]

$$F = \alpha KL (4l)^2 - TpL, \qquad (6)$$

где K — среднее от комбинаций упругих модулей $(K_i K_j)^{1/2}$ $(i, j = x, y, z)$; α — константа, учитывающая перенормировку энергии вихря из-за «экранировки». Из условия обращения свободной энергии (6) в нуль получаем температуру T^* спонтанного зарождения разомкнутых вихревых линий, т. е. фазового перехода с разрушением решетки доменных стенок, при котором параметр порядка ρ обращается в нуль. При этом характер фазового перехода и его критические индексы определяются видом функционала (4), лежащего в классе универсальности трехмерной XY-модели.

Легко видеть, что температура T^* заведомо ниже температуры фазового перехода T_C, определяемой в рамках приближения среднего поля функционалом (2), если в нем положить $A=a(T-T_C)$. В самом деле, поскольку в окрестности температуры T_C $\rho^2 \simeq a(T_C-T)/C$, то при $T \to T_C$, $\rho^2 \to 0$ и, в соответствие с (6), $T^* \to 0$. Следовательно, ниже температуры T_C «затравочное» значение параметра ρ отлично от нуля, однако из-за флуктуаций параметра $\varphi(\mathbf{r})$ происходит его ренормировка и эффективное обращение в нуль при температуре $T^* < T_C$.

Заметим, однако, что при рассмотрении флуктуаций параметра φ мы использовали приближение $\rho(\mathbf{r})=\text{const.}$, т. е. пренебрегали флуктуациями параметра ρ. Очевидно, что такое рассмотрение справедливо лишь вне флуктуационной окрестности температуры T_C, т. е. при выполнении критерия Гинзбурга $|T-T_C| \gg T_C^2C^2/(K^3a)$. Следовательно, вышеразвитые представления о вихревой природе фазового перехода в нормальную (N) фазу корректны лишь при выполнении условия

$$T_C-T^* \gg T_C^2C^2/(K^3a). \tag{7}$$

Это условие накладывает некоторые ограничения на параметры функционала (1), (2), возникающие при подстановке уравнения для T^* в (7). Для оценки этих ограничений по порядку величины [в соответствие с видом неравенства (7)] мы будем полагать $K_1 \sim K_2 \sim K_3 \sim K$, а также $l \gg l_O$, что обеспечивает применимость модели солитонной решетки и эффективного функционала (4). Тогда $K_x \sim K_y \sim K_z \sim \rho^4 D$, и, соответственно, $T^* \sim K_x l_0^2/p \sim K\rho^2 b$, где $b \cdot p^{-1}$ — микроскопический размер порядка шага исходной решетки, на которой определен параметр порядка η. Подставляя в это выражение соотношение $\rho^2 \simeq a(T_C-T)/C$ и считая $T^* \sim T_C$, для величины T_C-T^* получаем оценку $T_C-T^* \sim T_C C/(aKb)$. Подставляя ее в (7), окончательно получаем $T_C \ll K^2/(bC)$.

Считая, что выполнено условие применимости теории Ландау [т. е. функционала (1)] $T_C \ll aK^3/C^2$, связанное с малостью величины флуктуационной области $|T-T_C| \ll T_C$ ([15]), получаем следующее ограничение на параметры функционала (1):

$$K \leqslant C/(ab). \tag{8}$$

Дополнительное ограничение на параметр L, связанное с указанным выше условием $l \gg l_0$, принимает вид $T_C \gg bL^2/D$, или, с учетом вышеприведенного неравенства для T_C, $L^2 \ll DK/(ab^3)$.

Эти ограничения не являются очень жесткими и описывают область параметров, для которой применим предложенный выше механизм разрушения солитонной решетки при температуре T^*. В случае невыполнения неравенства (8) температура T^* попадает во флуктуационную окрестность температуры T_C, где флуктуации параметра ρ являются сильноразвитыми. В этом случае в качестве температуры перехода в нормальную (N) фазу следует выбирать T_C, а уточнение ее значения (по сравнению с приближением среднего поля) может быть произведено лишь при одновременном учете флуктуации параметров ρ и φ.

Более сложная ситуация возникает в случае кристалла BSN, симметрия несоизмеримой фазы которого описывается многокомпонентным параметром порядка, а модуляция возможна в двух взаимно перпендикулярных направлениях. Функционал Ландау имеет вид [15]

$$F-F_0=\int d^3\mathbf{r}\,\{(\alpha/2)(\rho^2+\rho'^2)+(\beta_1/4)(\rho^4+\rho'^4)+(\beta_2/4)[\rho^4\cos 4\varphi+\rho'^4\cos 4\varphi']+$$
$$+\lambda[\rho^2(\partial\varphi/\partial x)+\rho'^2(\partial\varphi'/\partial y)]+(\beta_3/2)\rho^2\rho'^2+K_1[(\partial\rho/\partial x)^2+\rho^2(\partial\varphi/\partial x)^2+$$
$$+(\partial\rho'/\partial y)^2+\rho'^2(\partial\varphi'/\partial y)^2]+K_2[(\partial\rho/\partial y)^2+\rho^2(\partial\varphi/\partial y)^2+(\partial\rho'/\partial x)^2+$$
$$+\rho'^2(\partial\varphi'/\partial x)^2]+K_3[(\partial\rho/\partial z)^2+\rho^2(\partial\varphi/\partial z)^2+(\partial\rho'/\partial z)^2+\rho'^2(\partial\varphi'/\partial z)^2]+\ldots \tag{7}$$

В зависимости от соотношения параметров функционала (7) минимуму свободной энергии могут соответствовать две несоизмеримые фазы. В первой из них ($1q$) модуляция возникает в одном из двух возможных направлений (т. е. либо $\rho=0$, $\rho'\neq0$, либо $\rho'=0$, $\rho\neq0$). Во второй фазе ($2q$) модуляция возникает одновременно в двух направлениях ($\rho=\rho'\neq0$). В окрестности $C-I$ перехода наблюдается фаза $1q$, состоящая из доменов с различными направлениями модуляции [5].

Легко понять, что в каждом из доменов фазы $1q$ функционал (7) сводится к изученному выше функционалу (2). По мере повышения температуры плотность солитонов возрастает, и при температуре T^*, одинаковой для обоих видов доменов, происходит разрушение солитонной решетки. Заметим, однако, что при таком переходе в каждом из доменов по-прежнему остается выделенным направление модуляции, являющееся преимущественным направлением атомных смещений. Для описания возникшего состояния введем новый параметр порядка $\xi=\langle e^{i2\varphi}\rangle$, где угол φ, отсчитываемый от одного из направлений модуляции, описывает преимущественное направление локальных атомных смещений. В соответствии с вышесказанным параметр порядка ξ принимает два возможных значения ∓1, т. е. описывает двукратно вырожденное состояние и осуществляет одномерное неприводимое представление высокотемпературной N фазы, симметрия которой восстанавливается в результате фазового перехода, лежащего в классе универсальности модели Изинга.

Таким образом, переход из I в N фазу в предложенном сценарии происходит в два этапа: сначала происходит фазовый переход с разрушением солитонной решетки, лежащий в классе универсальности трехмерной XY-модели, а затем — изинговский переход, при котором восстанавливается спонтанно нарушенная дискретная ориентационная симметрия.

Конечно, вышеописанный сценарий не является единственным, поскольку в нем не учитывалась связь с флуктуациями амплитуды $\rho(\mathbf{r})$. Нельзя исключать также возможности существования единственного фазового перехода, в результате которого полностью восстанавливается симметрия N фазы. Заметим, однако, что авторы [5] допускают интерпретацию своих наблюдений как существование промежуточной фазы с «расплавленной» решеткой доменных стенок.

Наконец, хотелось бы остановиться еще на одном возможном сценарии. Поскольку параметры функционала (7) с повышением температуры изменяются, возможен переход из $1q$ фазы с одним направлением модуляции в $2q$ фазу, в которой $\rho=\rho'$ и пересекающиеся доменные стенки (солитоны) образуют прямоугольную решетку, промодулированную в двух направлениях.

В этом случае для свободной энергии системы доменных стенок вместо (3) можно написать выражение

$$f_1=-2\varepsilon_0/l+\varepsilon_c/l^2+(w_0/l)\exp(-l/l_0), \tag{8}$$

учитывающее энергию пересечения доменных стенок ε_c.

При $\varepsilon_c>0$ в окрестности $C-I$ перехода, когда ε_0 мало, более выгодно появление $1q$ фазы с энергией решетки (3). Минимизируя (3) по l, получаем $f=-\varepsilon_0/[l\cdot\ln(w_0/\varepsilon_0)]$. Минимизируя (8) по l, получаем $f=-\varepsilon_0^2/\varepsilon_c$. Таким образом, при увеличении ε_0 с ростом температуры $1q$ решетка может смениться $2q$ решеткой (ср. с [16]).

Разрушение $2q$ солитонной решетки по мере разогрева может быть описано сходным с вышеизложенным механизмом для $1q$ решетки. Отличие заключается в том, что поле смещений u солитонной решетки, введенное в (4), является теперь двухкомпонентным $\mathbf{u}=(u_x, u_y)$. Соответственно флуктуации в такой решетке описываются более сложным функционалом, а вместо вихрей возникают дислокации с двумерными векторами Бюргерса, лежащими в плоскости модуляции.

Мы не будем здесь подробно рассматривать этот случай, требующий дополнительного изучения, отметим лишь аналогию с плавлением трехмерного кристалла, в котором векторы смещений u и соответствующие им векторы Бюргерса имеют три компоненты [12–14]. В работах [12, 17] было показано, что при нарушении трансляционного порядка в такой решетке, связанного со спонтанным появлением бесконечно длинных дислокаций, сохраняется ориентационный порядок «кубического» жидкого кристалла, энергия которого инвариантна относительно непрерывных вращений в трехмерном пространстве. Разрушение ориентационного порядка происходит в результате восстановления нарушенной непрерывной симметрии, т. е. полное разупорядочение происходит также в две стадии.

По аналогии с этим случаем можно ожидать, что для $2q$ фазы с двумерным вектором смещений разрушение солитонной решетки приводит к исчезновению трансляционного порядка, при этом ориентационный порядок сохраняется, как и в случае $1q$ фазы, лишь в плоскости модуляции отличаясь от этого случая ($1q$ фазы) непрерывным (а не дискретным) характером ориентационной симметрии промежуточной фазы.

В такой ситуации ориентационный порядок может характеризоваться параметром $\eta = e^{i4\theta}$, где θ — угол поворота, соответствующий вращениям в плоскости модуляции xy, а эффективный функционал свободной энергии промежуточной фазы принимает вид

$$F = \int dxdydz\, \{K_{11}[(\partial u/\partial x)^2 + (\partial u/\partial y)^2] + K_{\perp}(\partial u/\partial z)^2\}, \qquad (9)$$

который изоморфен функционалу (4). Поэтому разрушение ориентационного порядка в такой «жидкокристаллической» фазе может происходить по вышеописанному механизму, связанному с возникновением бесконечно длинных вихрей (дисклинаций), и, по-видимому, лежит в классе универсальности трехмерной XY-модели.

Как и в случае $1q$ фазы, мы не можем исключить возможности существования единственного фазового перехода из несоизмеримой (I) фазы в нормальную (N) фазу. В этом смысле большой интерес вызывают дальнейшее экспериментальное исследование окрестности I—N перехода в кристаллах BSN и попытка обнаружения промежуточной «жидкокристаллической» фазы.

Автор благодарит А. П. Леванюка за полезное обсуждение результатов работы и ценные замечания.

Список литературы

[1] Janssen T., Janner A. // Adv. in Phys. 1987. V. 36. P. 519.
[2] Schneck J., Toledano J. C., Joffrin C., Aubrec J., Joukoff B., Gabelotand A. // Phys. Rev. B. 1982. V. 25. P. 1766.
[3] Pan Xaioqing, Feng Duan, Yao Minghui, Hu Meisheng // Phys. Status Solidi «a». 1985. V. 91. P. 57.
[4] Van Tendeloo G., Amelinkx S., Manolikas C., Wen Shulen // Phys. Status Solidi «a». 1985. V. 91. P. 483.
[5] Pan Xiaoqing, Gleiter H., Feng Duan // J. Phys. Condens Matter. 1990. V. 2. P. 2603.
[6] Bak P., Emery V. J. // Phys. Rev. Lett. 1976. V. 36. P. 978.
[7] Fisher M. E., Fisher D. S. // Phys. Rev. B. 1982. V. 25. P. 3192.
[8] Nattermann T. // J. Physique. 1982. V. 43. P. 631.
[9] Люксютов И. Ф. // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 32. С. 593.
[10] Coppersmith S. N., Fisher D. S., Halperin B. I., Lee P. A., Brinkman W. F. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 46. P. 549.
[11] Feynmann R. P. // Progress in Low Temp. Phys. / Ed. C. J. Gorter. North Holland. Amsterdam, 1955. V. 1.
[12] Nelson D. R., Toner J. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. P. 362.
[13] Вещунов М. С. // ФТТ. 1982. Т. 24. С. 2276.
[14] Обухов С. П. // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. С. 1978.
[15] Errandonea G., Hebbache M., Bonnourrier F. // Phys. Rev. B., 1985. V. 32. P. 1691.
[16] Bak P., Mukamel D., Villain J., Wentowska K. // Phys. Rev. B. 1979. V. 19. P. 1610.
[17] Паташинский А. З., Шумило Б. И. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. С. 315.

Институт проблем
безопасного развития атомной энергетики
АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
28 ноября 1990 г.
В окончательной редакции
11 марта 1991 г.