1989 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 31, в. 7
1989 SOLID STATE PHYSICS Vol. 31, N 7

УДК 533; 539

ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В УПРУГО-АНИЗОТРОПНЫХ КРИСТАЛЛАХ С ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

А. А. Лужков

Исследовано взаимодействие флуктуаций параметра порядка с упругими деформациями в анизотропных кристаллах с низкосимметричными точечными дефектами. На конкретных примерах показано, что в критической области это взаимодействие асимптотически убывает.

В ряде работ [1-3] было исследовано критическое поведение кристаллов с упругими точечными дефектами типа «случайная температура». Основным приближением этих работ является изотропная связь m-компонентного параметра порядка (ПП) φ_i (x) с упругими деформациями, т. е. описываемая в гамильтониане членом, пропорциональным $|\varphi|^2$. В этом случае асимптотика величины упругого взаимодействия ПП определяется индексом теплоемкости α несжимаемого дефектного кристалла и убывает как $\tau^{-\alpha}$ ($\tau=(T-T_c)/T_c$, $\alpha<0$). Однако такая связь ПП с упругой подсистемой не является адекватной при $m>1$ и ее необходимо записывать с учетом конкретной симметрии кристалла. Кроме того, при $m>1$ реальные (низкосимметричные) дефекты не описываются скалярным полем «случайной температуры».

В настоящей работе мы рассмотрим критическое поведение кристаллов с учетом анизотропии взаимодействия флуктуаций ПП с упругими деформациями, включая внутренние деформации, обусловленные наличием низкосимметричных точечных дефектов.

В качестве примера удобно выбрать случай $m=2$, отражающий характерные особенности задачи. Будем предполагать, что наличие дефектов не нарушает макросимметрию кристалла. В этом случае возможны два основных типа гамильтонианов H_1 и H_2

$$H_1=H_1^0+H_1^e, \tag{1}$$

$$H_1^0=\int d\mathbf{x}\left\{\sum_{i=1}^{2}\left[\frac{1}{2}(\tau\varphi_i^2+|\nabla\varphi_i|^2)+\lambda_0\varphi_i^4+V_i\varphi_i^2\right]+2g_0\varphi_1^2\varphi_2^2\right\},$$

$$H_1^e=\int d\mathbf{x}\left\{|\varphi|^2\left[q_1(\tilde\varepsilon_{11}+\tilde\varepsilon_{22})+q_2\tilde\varepsilon_{33}\right]+(\varphi_1^2-\varphi_2^2)\,q_3\tilde\varepsilon_{12}+\frac{1}{2}\sum_{i,\,k,\,m,\,n}\tilde\varepsilon_{ik}\tilde\varepsilon_{mn}c_{ikmn}\right\},$$

$$H_2=H_1+\Delta H^0+\Delta H^e\equiv H_2^0+H_2^e,\ \ \Delta H^0=2\int d\mathbf{x}\,(V_3\varphi_1\varphi_2),\ \ \Delta H^e=q_4\int d\mathbf{x}\,(\tilde\varepsilon_{12}\varphi_1\varphi_2). \tag{2}$$

Здесь V_i (x) — случайные поля, q_i — стрикционные коэффициенты; c_{ikmn} — тензор упругих модулей; $\tilde\varepsilon_{ik}=\varepsilon_{ik}+\varepsilon_{ik}^d$ — сумма упругих деформаций ε_{ik} (x) и случайного поля ε_{ik}^d(x), связанного законом Гука со случайным полем внутренних напряжений; H_1 соответствует гамильтониану, описывающему фазовый переход (ФП) в несобственных ферроэластиках типа Hg_2Cl_2 [4], а H_2 — в кристаллах тетрагональной симметрии и векторным ПП.

Используя процедуру гауссова интегрирования по упругим степеням свободы с учетом ε_{ik}^{d} (см. [1, 3]), получаем эффективные гамильтонианы $\tilde{H}_1$ и $\tilde{H}_2$, отличающиеся от H_i заменой H_i^e на $\tilde{H}_i^e$, определяемые формулами

$$\tilde{H}_1^e = \int d\mathbf{p} \{\gamma_1^0(\mathbf{n})(\varphi_1^2)_\mathbf{p}(\varphi_1^2)_{-\mathbf{p}} + \gamma_1^0(\mathbf{n}')(\varphi_2^2)_\mathbf{p}(\varphi_2^2)_{-\mathbf{p}} + 2\gamma_2^0(\mathbf{n})(\varphi_1^2)_\mathbf{p}(\varphi_2^2)_{-\mathbf{p}} + \Psi_1(\mathbf{p})(\varphi_1^2)_\mathbf{p} + \Psi_2(\mathbf{p})(\varphi_2^2)_\mathbf{p}\}, \quad \tilde{H}_2^e = \tilde{H}_1^e + \int d\mathbf{p}\{2\gamma_3^0(\mathbf{n})(\varphi_1\varphi_2)_\mathbf{p}(\varphi_1\varphi_2)_{-\mathbf{p}} + \Psi_3(\mathbf{p})(\varphi_1\varphi_2)_\mathbf{p}\}, \tag{3}$$

где $n_i = p_i/|\mathbf{p}|$, $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$, $\mathbf{n}' = (n_2, -n_1, n_3)$, $\Psi_i(\mathbf{p})$ — Фурье-образ случайного поля, описывающего упругое взаимодействие ПП с дефектами; $(\varphi_i\varphi_k)_\mathbf{p}$ — Фурье-образ от $\varphi_i(\mathbf{x})\varphi_k(\mathbf{x})$. Мы не выписываем явно вклад от интегрирования по однородным деформациям, а условимся считать его включенным в $\gamma_i^0(\mathbf{n})$ и в тривиальную перенормировку λ_0, g_0.

Считая, как обычно, распределение дефектов δ-коррелированным и гауссовым, а также предполагая, что дефекты в среднем сохраняют симметрию кристалла, для корреляторов случайных полей $\tilde{V}_i = V_i + \Psi_i$ получаем

$$\begin{gathered}\langle \tilde{V}_i(\mathbf{x})\rangle = V, \quad \langle \tilde{V}_3(\mathbf{x})\rangle = \langle \tilde{V}_3(\mathbf{x})\tilde{V}_i(\mathbf{y})\rangle = 0,\\ \langle \tilde{V}_i(\mathbf{p})\tilde{V}_j(\mathbf{k})\rangle - \delta(\mathbf{p}+\mathbf{k})V^2 = 2\delta(\mathbf{p}+\mathbf{k})\{(1-\delta_{ij})[v_1^0 + v_2^0(\mathbf{n})] + \\ + \delta_{ij}[u_1^0 + \delta_{i1}u_2^0(\mathbf{n}) + \delta_{i2}u_2^0(\mathbf{n}')]\},\\ \langle \tilde{V}_3(\mathbf{p})\tilde{V}_3(\mathbf{k})\rangle = \delta(\mathbf{p}+\mathbf{k})[w_1^0 + w_2^0(\mathbf{n})], \quad i, j = 1, 2.\end{gathered} \tag{4}$$

Здесь $\langle\ldots\rangle$ обозначает конфигурационное усреднение. Концентрацию дефектов (примесей) считаем много ниже порога протекания. Величины u_1^0, v_1^0, w_1^0 соответствуют эффективным вершинам, описывающим короткодействующее взаимодействие ПП с дефектами, а появление зависящих от углов вершин $u_2^0(\mathbf{n})$, $v_2^0(\mathbf{n})$, $w_2^0(\mathbf{n})$ вызвано дальнодействующими упругими полями дефектов.

Рассмотрим модель с гамильтонианом (1) и покажем, что соответствующая система уравнений ренормализационной группы (РГ) на перенормированные инвариантные заряды λ, g, γ_i, v_i, u_i имеет устойчивую фиксированную точку (ФТ), отвечающую асимптотическому убыванию упругого взаимодействия.

Согласно результатам работы [5], критическое поведение гамильтониана $\tilde{H}_1$ без учета стрикции асимптотически эквивалентно поведению двух независимых примесных моделей Изинга (ПМИ), если набор затравочных параметров модели находится в области притяжения соответствующей ФТ. Координаты этой ФТ имеют вид

$$\lambda^* = \lambda_I, \quad u_1^* = u_I, \quad g^* = v_1^* = 0, \tag{5}$$

где λ_I, u_I — координаты устойчивой ФТ ПМИ [6]. Нетрудно показать, используя анализ размерностей операторов φ_1^2, φ_2^2 (см. [5]), что поведение инвариантных зарядов $\gamma_2(\mathbf{n})$, $v_2(\mathbf{n})$ в окрестности ФТ (5) аналогично g, v_1. Таким образом, величины γ_2, v_2 асимптотически стремятся к нулю, собственные значения линеаризованных РГ уравнений на γ_2, v_2 отрицательны и равны $\alpha/(2\nu)$ (α, ν — индексы теплоемкости и корреляционного радиуса в ПМИ). Следовательно, критическое поведение модели (1) также эквивалентно поведению двух независимых ПМИ, но в сжимаемой решетке. Поскольку в однокомпонентной модели упругое взаимодействие асимптотически убывает [1–3], окончательно получаем, что ФТ (5) устойчива относительно упругих возмущений.

В отличие от модели (1) критическое поведение модели (2) без учета стрикции не описывается устойчивой ФТ соответствующих уравнений РГ [5]. В зависимости от затравочных значений в системе реализуется либо ФП первого рода, либо РГ траектории уходят на бесконечность, не покидая области устойчивости. Было показано [5], что уход траекторий на бесконечность сопровождается изотропизацией системы ($\lambda/g \to 1$,

$(u_1 - v_1)/w_1 \to 1)$, которой в однопетлевом приближении соответствует выход на притягивающее подпространство

$$\lambda(t) = g(t) = (4/3)\,w_1(t), \quad u_1(t) - v_1(t) = w_1(t), \quad v_1(t) = w_1(t)\,X,$$
$$X = [(19)^{1/2} - 4]/6, \tag{6}$$

причем $w_1(t) \to +\infty$ при $t \to +\infty$. Покажем, что этот результат сохраняется и при «включении» упругого взаимодействия.

Рассмотрим линеаризованные РГ уравнения на величины $\gamma_i(\mathbf{n})$, $u_2(\mathbf{n})$, $v_2(\mathbf{n})$, $w_2(\mathbf{n})$, описывающие это взаимодействие

$$d\gamma_1/dt = \gamma_1(1/2 - 24\lambda + 16u_1) + 8\gamma_2(w_1 - g), \quad d\gamma_2/dt = \gamma_2(1/2 - 24\lambda + 16u_1) +$$
$$+ 8\tilde{\gamma}_1(w_1 - g), \quad d\gamma_3/dt = \gamma_3(1/2 - 16g + 16v_1 + 8w_1), \quad du_2/dt = u_2(1/2 - 24\lambda + 16u_1) +$$
$$+ 8v_2(w_1 - g) + 8(\gamma_1 u_1 + \gamma_2 v_1), \quad dv_2/dt = v_2(1/2 - 24\lambda + 16u_1) + 8\tilde{u}_2(w_1 - g) +$$
$$+ 8(\gamma_2 u_1 + \tilde{\gamma}_1 v_1), \quad dw_2/dt = w_2(1/2 - 16g + 16v_1 + 8w_1) + 8\gamma_3 w_1. \tag{7}$$

Здесь $t = \ln(r_c^2)$, r_c — корреляционный радиус, $\tilde{\gamma}_1 = [\gamma_1(\mathbf{n}) + \gamma_1(\mathbf{n}')/2$, $\tilde{u}_2 = [u_2(\mathbf{n}) + u_1(\mathbf{n}')]/2$.

Рассмотрим уравнения (7) в окрестности подпространства (6). Перейдем к новой монотонной переменной $\tilde{t} = \int w_1(t)\,dt$ и исследуем устойчивость точки $\gamma_i = u_2 = v_2 = w_2 = 0$ (отметим, что уравнения для $\gamma_1(\mathbf{n})$, $u_2(\mathbf{n})$ и $\gamma_1(\mathbf{n}')$, $u_2(\mathbf{n}')$ следует рассматривать отдельно). Используя (6), получаем собственные значения y_i для системы линейных дифференциальных уравнений относительно переменной $\tilde{t}$

$$y_{1-4} = 16X - 40/3, \quad y_{5,6} = 16X - 56/3, \quad y_{7,8} = 16(X - 1).$$

Поскольку $y_i < 0$, траектории типа (6) оказываются устойчивыми относительно упругих возмущений, т. е. и при таком критическом режиме упругое взаимодействие также асимптотически убывает.

Полученные результаты показывают, что вывод об асимптотическом убывании упругого взаимодействия остается справедливым и для некоторых упруго-анизотропных кристаллов и носит, по-видимому, общий характер. При этом каждую конкретную модель приходится рассматривать, вообще говоря, отдельно. Например, исследование ФП в кристалле кубической симметрии при $m=3$ аналогично исследованию модели (2) и приводит к тем же результатам.

Необходимо отметить, что при сильной стрикции ($\max \gamma_i^0 \gg u_1^0, v_1^0, w_1^0$) указанный «примесный» критический режим не будет наблюдаем, так как в системе скачком произойдет ФП первого рода. В этом случае необходимо численно решать громоздкую систему уравнений РГ совместно с уравнением состояния. Соответствующий расчет целесообразно проводить лишь для конкретных кристаллов с известным набором затравочных параметров.

Автор благодарен А. Л. Корженевскому за полезное обсуждение результатов работы.

Список литературы

[1] Sasvari L., Tadić B. // Z. Phys. B. 1981. V. 43. N 2. P. 163—172.
[2] Chakrabarti B. K. // J. Phys. C. 1982. V. 15. N 33. P. L1195—L1199.
[3] Корженевский А. Л., Лужков А. А. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 2. С. 351—355.
[4] Задохин Б. С., Каплянский А. А., Малкин Б. З., Марков Ю. Ф. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 5. С. 1555—1558.
[5] Корженевский А. Л., Лужков А. А. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. № 6. С. 250—258.
[6] Хмельницкий Д. Е. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. № 5. С. 1960—1968.

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

Поступило в Редакцию
10 февраля 1989 г.