1993 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 35, № 10
1993 SOLID STATE PHYSICS Vol. 35, N 10

УДК 536.320

О ВОЗМОЖНОСТИ ПРОЯВЛЕНИЯ БИФОНОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО ЗАТУХАНИЮ ЗВУКА В КРИСТАЛЛАХ СО СТРУКТУРНЫМИ ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ

Н.В.Щедрина, М.И.Щедрин

Приведены оценки, указывающие на возможность проявления бифононной нестабильности в некоторых кристаллах со структурными фазовыми переходами в окрестности точки перехода. Сдвиг температуры образования мягкого бифонона относительно температуры фазового перехода составляет 0.1–1 К. Делается предположение, что обнаруженный в ряде недавних экспериментальных работ сдвиг пика поглощения звука, возможно, является следствием образования этой квазичастицы.

В недавно появившихся экспериментальных работах [1-3] по затуханию и дисперсии скорости звука в некоторых типах веществ с сегнетоэлектрическим фазовым переходом (ФП) указывается на интересный факт сдвига пиков поглощения как в высокосимметричной так и в низкосимметричной фазе от положения $T = T_c$, где T_c — точка ФП. Следует отметить, что такое поведение наблюдалось и в случае других ФП, например у высокотемпературных сверхпроводников, а также у сверхпроводников с тяжелыми фермионами. Этот вопрос теоретически рассматривался в работах [4,5] (см. там же ссылки на экспериментальные работы). Обычно указывается на несколько возможных причин такого явления — наличие частотной дисперсии, примеси (например, возникновение стекольного состояния), особенности энергетического спектра квазичастиц и размерность модели. В связи с экспериментальными данными [1-3] мы бы хотели здесь обратить внимание на еще одну вероятную причину — на возникновение неустойчивости в решетке кристалла за счет ангармонического взаимодействия мягких фононов, что приводит к образованию мягкого бифонона (БФ). Если действительно реализуются условия для образования БФ, следует, очевидно, ожидать и других его проявлений в веществах такого типа.

БФ неустойчивость, обусловленная ангармоническим взаимодействием мягких фононов четвертого порядка, описывается вершинной частью Г такого же типа, как и в теории сверхпроводимости [6], с тем отличием, что для фонона, который является бозоном, суммирование ведется по четным частотам и гриновская функция (ГФ) параметра перехода η может быть записана в виде [7]

$$-G^{-1}(\omega_{n,\mathbf{k}}) = \mu\omega_n^2 + \gamma\,|\omega_n| + \alpha + \delta k^2, \qquad (1)$$

где μ — эффективная масса мягкой воды (ММ), $\gamma/2\mu$ — затухание, $\alpha(T)$ определяет температурную зависимость щели в спектре ММ. Обычно вводят $\omega_k = (\alpha_{\mathbf{k}}/\mu)^{1/2}$ — частоту ММ, $\alpha_{\mathbf{k}} = \alpha + \delta k^2$. Отметим, что, поскольку фононная ГФ в отличие от электронной четная по ω_n, не возникает разделения диаграмм на диаграммы куперовского типа и диаграммы с малой передачей энергии-импульса, здесь их вклады совпадают.

Вклад в собственно-энергетическую часть акустической ГФ за счет взаимодействия звуковой волны с критическими степенями свободы $(1/2)g\eta^2 v$ может быть записан в виде

$$\sum(\omega_n, k, T) = -(1/2g)^2\left(2\Pi + \Gamma\Pi^2\right) = -\frac{1}{2}g^2\frac{\Pi}{1+\frac{1}{2}\beta\Pi}, \tag{2}$$

где $\Pi(\omega_n, \mathbf{k}, T)$ есть Фурье-компонента $\Pi(x) = G^2(x)$

$$\Pi(\omega_n, \mathbf{k}, T) = T\sum_{\nu}\int\frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}G(\omega_{\nu,\mathbf{q}})G(\omega_n+\omega_\nu, \mathbf{k}+\mathbf{q}), \tag{3}$$

а вершинная часть $\Gamma(\omega_n, \mathrm{k}, T)$ (БФ пропагатор) равна $\Gamma = (-\beta)\times$ $\times\ (1+(1/2)\beta\Pi)^{-1}$ и имеет полюс при $\beta < 0$. Здесь g — константа взаимодействия акустической степени свободы с параметром перехода (для сегнетоэлектрика — стрикционный коэффициент), v — компонента тензора деформации (или их комбинация) в соответствующей звуковой волне, β — константа ангармонизма четвертого порядка. Величина $\sum$ фактически является поправкой к модулю упругости кристалла и при $\beta = 0$ (2) переходит в обычную формулу, описывающую затухание и дисперсию звука на флуктуациях η в однопетлевом приближении [7].

Температура T_0, при которой имеет место БФ неустойчивость, определяется уравнением

$$\frac{1}{2}\beta_0\Pi(0,0,T_0) = 1, \qquad \beta_0 = -\beta, \qquad \beta_0 > 0. \tag{4}$$

В чисто колебательном режиме $\Gamma = 0$ после суммирования по частотам из (3) имеем

$$\Pi(\omega_n, \mathbf{k}, T) = \frac{1}{2\mu^2}\int\frac{d\mathbf{q}}{(2\Pi)^3}\frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}\left[\frac{(n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-n_{\mathbf{q}})(\omega_q-\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{(\omega_{\mathbf{q}}-\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2+\omega_n^2}+\right.$$

$$\left.+\frac{(n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}+n_{\mathbf{q}}+1)(\omega_{\mathbf{q}}+\omega_{\mathbf{k}+q})}{(\omega_{\mathbf{q}}+\omega_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2+\omega_n^2}\right]. \tag{5}$$

Предельный переход $\omega_n \to 0$, $\mathbf{k} \to 0$ в силу неаналитичности (5) зависит от порядка выполнения этих операций

$$\Pi(0, \mathbf{k}\to 0, T) = \frac{1}{2\mu^2}\int\frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}^2}\left(\frac{2n_{bfq}+1}{2\omega_{\mathbf{q}}} - \frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial\omega_{\mathbf{q}}}\right). \tag{6}$$

В выражении $\Pi(\omega_n \to 0, 0, T)$ отсутствует второе слагаемое в (6). Здесь n_q — распределение Планка $n_{\mathbf{q}} = [\exp(\omega_{\mathbf{q}}/2T) - 1]^{-1}$, $\hbar = 1$. Эти два предельных случая, очевидно, отвечают различным экспериментальным ситуациям. При $T \to T_c$ $\alpha \to 0$ и растет число мягких фононов, поэтому для оценок интегралов типа (6) обычно используется высокотемпературная асимптотика $(\omega_0/T) \ll 1$, что означает переход к классическому пределу и пренебрежению квантовыми эффектами (вымораживанием фононов). В этой асимптотике оба слагаемых в (6) имеют одинаковую сингулярность по α. Отметим также, что в приближении высоких температур исчезает разница вкладов колебательного и релаксационного режимов в статическую часть П (зависимость от параметров μ и γ выпадает). Оценка (6) в этом приближении дает следующее значение:

$$\Pi(T) \approx (1/8\pi)T\delta^{-3/2}\alpha^{-1/2}.$$

Тогда условие существования T_0 (буквенно, с точностью до числовых множителей) может быть записано в виде

$$\left(\frac{T_0}{T_{\text{ат}}}\right)\left(\frac{r_c(T_0)}{d}\right) = 1, \tag{7}$$

где $r_c(T) = [\delta/\alpha(T)]^{1/2}$ — длина корреляции флуктуаций, $T_{\text{ат}} = \delta^2/\beta d$ — температура порядка атомной ($T_{\text{ат}} \approx 1 \div 10$эВ $\approx 10^4 \div 10^5$ K), d — порядка постоянной решетки. Вблизи T_c $r_c \gg d$, поэтому в (7) входит произведение безразмерных параметров, один из которых велик, другой мал.

Отметим также, что условие (7) означает, что корреляционный параметр ξ [8] должен быть порядка единицы, что вполне естественно, поскольку Г учитывает суммирование бесконечного ряда диаграмм и условие сходимости геометрической прогрессии является $\xi < 1$ (а не $\xi \ll 1$), а полюс возникает именно при $\xi \approx 1$ [6].

Оценим величину сдвига между температурой ФП T_c и температурой образования БФ T_0: $\Delta T = T_0 - T_c$. Обычно полагают $\alpha(T) = \alpha'(T - T_c)$. Для оценок в плотности эффективного гамильтониана

$$(\alpha/2)\eta^2 + (\delta/2)(\nabla\eta)^2 + (\beta/4!)\eta^4,$$

описывающего ФП, придадим η значение порядка атомного $\eta_{\text{ат}}$. Тогда все слагаемые будут одного порядка

$$\alpha' T_{\text{ат}}\eta_{\text{ат}}^2 \approx \delta(\eta_{\text{ат}}/d)^2 \approx \beta\eta_{\text{ат}}^4.$$

Считаем, что $T_{\text{ат}} \gg T_c$. Тогда

$$\eta_{\text{ат}}^2 = \delta/\beta d^2, \qquad \alpha' = \delta/T_{\text{ат}}d^2,$$

$T_{\text{ат}}$ оцениваем как энергию, приходящуюся на ячейку ($k_{\text{Б}} = 1$)

$$T_{\text{ат}} = \delta(\eta_{\text{ат}}/d)^2 d^3 = \delta d\eta_{\text{ат}}^2 = \delta^2/\beta d,$$

Откуда при $\Delta T \ll T_c, T_0$ из (7) получаем

$$\Delta T = \left(\frac{T_c}{T_{\text{ат}}}\right)T_c. \tag{8}$$

Полагая $T_c \approx 10^2$ K, имеем $\Delta T \approx 0.1 \div 1$ K. Это по порядку величины согласуется в величиной сдвига пиков поглощения, наблюдаемых в работах [1,2].

В заключение сделаем несколько замечаний по поводу полученных результатов. При T, не слишком близких к T_c, где нелинейные эффекты проявляются слабо. критические флуктуации носят гауссовский характер, а ММ хорошо описывается в терминах нормальных колебаний кристаллической решетки с тем лишь добавлением, что частота зависит определенным образом от T. Этому соответствует выбор затравочной ГФ в виде (1) с $\gamma = 0$. При приближении к T_c характер флуктуаций начинает отличаться от гауссовского. Пока это отличие мало, ММ еще можно описывать выражением вида (1), но уже с перенормированными коэффициентами, в частности, из-за нелинейности появляется затухание γ [8].

Когда корреляционные эффекты, обусловленные β, становятся еще более заметными, негауссовость флуктуаций может привести к полной неприменимости для описания ММ выражения (1) и оно должно быть заменено другим. В частности, оно совершенно неприменимо в критической области, где работает теория подобия [9]. Отметим, что проблеме негауссовости флуктуаций уделяется до настоящего времени достаточно большое внимание, даже после открытия столь мощных методов, как теория подобия и ε-разложения (см., например, [10] и ссылки там). Таким образом, при $T \to T_c$ имеет место перестройка вида ММ. Это может происходить плавно (когда $\beta > 0$) или же с определенным скачком (при $\beta < 0$). T_0 — это температура, при которой происходит переход одного вида ММ в другой, которая описывается теперь пропагатором $\Gamma(\omega_n, q)$. При этом новый спектр флуктуаций, как обычно, дается полюсами $\Gamma(\omega_n, q)$, $i\omega_n \to \omega + i\delta$ [6].

Заметим, что перестройка вида ММ происходит в пределах одной фазы и ни в коей мере не затрагивает положения T_c — температуры перехода в другую фазу. При получении Γ суммируется бесконечная подпоследовательность диаграмм. Это приводит к качественно новому решению, но в то же время, естественно, оно является приближенным и может быть так же не применимо в критической области, как и исходное выражение (1). Интересно отметить также, что в отличие от сверхпроводящего перехода здесь нет поверхности Ферми (т.е. нет своеобразного двумерного поведения в $\mathbf{k}$-пространстве), и, по-видимому, поэтому неустойчивость имеет место не при любой константе нелинейности, а только когда ангармонизм становится относительно большим, что имеет место вблизи температуры перехода T_c.

Список литературы

[1] Синий И.Г., Федосеев А.И., Волнянский М.Д. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 2. С. 353–363.

[2] Синий И.Г., Федосеев А.И., Волнянский М.Д. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 10. С.3130–3132.

[3] Лайхо Р., Лушников С.Г., Прохорова С.Д., Синий И.Г. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 12. С. 3490–3493.

[4] Шедрина Н.В., Шедрин М.И. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 8. С. 2431–2435

[5] Шедрина Н.В., Шедрин М.И. // СФХТ. 1991. Т. 4. № 2. С. 215–222.

[6] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., 1962. 443 с.

[7] Щедрин М.И., Щедрина Н.В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 139–145.
[8] Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М.: Наука, 1973. 327 с.
[9] Ма Ш. Современная теория критических явлений. М.: Мир, 1980. 298 с.
[10] Tuszyuski J.A., Wierzbicki A. // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. N 10. P. 8472–8481.

Институт инженеров водного транспорта
Нижний Новгород

Поступило в Редакцию
30 марта 1993 г.
В окончательной редакции
14 июня 1993 г.