

01;05.3

О КРИТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКЕ В ОКРЕСТНОСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПОРЯДОК–БЕСПОРЯДОК

© С.В.Сазонов

Предложен новый полуфеноменологический подход к учету псевдоспиновой релаксации в окрестности фазовых переходов порядок–беспорядок. Подход основан на законе сохранения полной квантово-механической вероятности, приходящейся на один активный центр в двухъямном кристаллическом потенциале. Найдена зависимость времени фазовой релаксации от частоты туннельного расщепления симметрично-антисимметричного перехода и средней постоянной диполь-дипольного взаимодействия.

Фазовые переходы порядок–беспорядок охватывают широкий круг явлений в различных областях физики. Это могут быть, например, сегнетоэлектрические [1,2], сверхизлучательные [3] переходы, фазовые переходы в высокотемпературных сверхпроводниках [4], в бинарных сплавах [5] и т.д. В этой связи естественным образом возникает вопрос о построении динамической теории данных переходов, основанной на общих принципах, присущих системам типа порядок–беспорядок. Хорошо известно, что процессы релаксации играют основную роль в динамике переходов порядок–беспорядок [1,2]. Однако учет релаксации параметра порядка на микроскопическом уровне часто бывает весьма не прост.

В настоящей работе предложен новый полуфеноменологический подход к учету релаксационных процессов в окрестности температуры перехода T_c систем типа порядок–беспорядок с помощью введения в гейзенбергову динамические уравнения для псевдоспина релаксационных членов специального вида.

Гамильтониан системы типа порядок–беспорядок в представлении “право–лево” имеет вид [1,2]

$$\hat{H} = -\hbar\omega_0 \sum_{j=1}^N \hat{S}_x^j - \frac{\hbar}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{S}_z^i \hat{S}_z^j - \hbar\Omega \sum_{j=1}^N \hat{S}_z^j, \quad (1)$$

где \hbar — постоянная Планка; ω_0 — частота туннельного расщепления симметрично-антисимметричного состояния активного локализованного центра в двухъямном кристаллическом потенциале; $\hat{S}_\rho^j (\rho = x, y, z)$ — операторы псевдоспина j -го центра, причем параметр порядка пропорционален

$\sum_j \langle S_z^j \rangle$; $\langle \dots \rangle$ — операция квантового усреднения; J_{ij} — постоянная диполь-дипольного взаимодействия между i -м и j -м центрами; Ω — внешнее поле (электрическое, упругое, продольное магнитное), приведенное к размерности частоты, N — количество локализованных центров.

Гамильтониану (1) в приближении молекулярного поля (ПМП) [1,2] можно сопоставить классическую энергию W , приходящуюся на один центр:

$$W = -\hbar\omega_0 S_x - \frac{\hbar}{2} J S_z^2 - \hbar\Omega S_z, \quad (2)$$

где $S_\rho = \sum_{j=1}^N \langle \hat{S}_\rho^j \rangle / N$, ($\rho = x, y, z$), J — средняя постоянная диполь-дипольной связи, пропорциональная концентрации локализованных центров [6].

Тогда уравнения для вектора $S = (S_x, S_y, S_z)$ по аналогии с ферро- и парамагнетиками [7] могут быть записаны в виде

$$\dot{S} = \Omega^{ef} x S - \frac{e_x}{\tau_{\parallel}} (S_x - \tilde{\chi}_0 \Omega_x^{ef}) - \frac{1}{\tau_{\perp}} (S_{\perp} - \tilde{\chi}_0 \Omega_{\perp}^{ef}), \quad (3)$$

где $S_{\perp} = (S_y, S_z)$, $\Omega_{\perp}^{ef} = (\Omega_y^{ef}, \Omega_z^{ef})$, эффективное поле

$$\Omega^{ef} = -\hbar^{-1} \partial W / \partial S, \quad (4)$$

τ_{\parallel} и τ_{\perp} — времена энергетической и фазовой релаксаций соответственно; $\tilde{\chi}_0$ — эффективная статическая восприимчивость, определяемая из соотношения $S_z = \tilde{\chi}_0 \Omega_z^{ef}$ в статическом режиме (не следует путать с истинной восприимчивостью, см. ниже); e_x — единичный вектор, параллельный оси x в пространстве псевдоспина.

В низкочастотном слабонелинейном приближении такой способ введения релаксации соответствует сохранению квадрата длины вектора псевдоспина S [8] или полной квантово-механической вероятности, приходящейся на один центр, что представляется вполне естественным. Из (2)–(4) находим, что $\tilde{\chi}_0 = S_{x0} / \omega_0$, $\Omega_x^{ef} = \omega_0$, $\Omega_y^{ef} = 0$, $\Omega_z^{ef} = \Omega + J \tilde{S}_z$, S_{x0} — термодинамически равновесное значение инверсии S_x симметрично-антисимметричного перехода. При $T > T_c$ $S_{x0} = \text{th}(\hbar\omega_0 / kT)$ (k — постоянная Больцмана), при $T < T_c$ $S_{x0} = \omega_0 / J$ [1,2]. Тогда член, описывающий энергетическую релаксацию в (3), принимает хорошо известный из квантовой электроники вид — $(S_x - S_{x0}) / \tau_{\parallel}$. Данное обстоятельство — один из аргументов в пользу предложенного способа

учета релаксации. Обычно в твердых телах $\tau_{\perp} \ll \tau_{\parallel}$. Поэтому в дальнейшем будем учитывать лишь фазовую релаксацию, полагая $\tau_{\parallel} = \infty$. Тогда из (2)–(4) в низкочастотном ($\omega \ll \tau_{\perp}^{-1}$) слабонелинейном приближении [9] получим для параметра порядка S_z :

$$\frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 + \gamma^2} \ddot{S}_z + \gamma \dot{S}_z = -\omega_c^2 S_z - \frac{\omega_0^2}{2S_{z0}^2} S_z^3 + [1 + (\gamma/\omega_0)^2] \omega_0 S_{z0} \Omega, \quad (5)$$

где

$$\omega_c = \sqrt{1 + (\gamma/\omega_0)^2} \omega_+; \quad \gamma = \tau_{\perp}^{-1};$$

$$\omega_+ = \omega_0 \sqrt{1 - (J/\omega_0) \text{th}(\hbar\omega_0/kT)}$$

— частота мягкой моды в отсутствие релаксации при $T > T_c$ [9]. Температура перехода находится из условия $\omega_+ = 0$ или [1,2]

$$\zeta \equiv \frac{\omega_0}{J} = \text{th} \frac{\hbar\omega_0}{kT_c}. \quad (6)$$

С другой стороны, согласно уравнению Ландау–Халатникова [2]:

$$\frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 + \gamma^2} \ddot{S}_z + \gamma \dot{S}_z = -\nu \frac{\partial E}{\partial S_z}, \quad (7)$$

где F — свободная энергия, приходящаяся на один центр; ν — коэффициент, подлежащий определению.

Используя термодинамический подход, в ПМП просто получить разложение F в окрестности T_c по степеням S_z [2,10]:

$$F = \frac{\hbar J}{2\omega_0^2} \omega_+^2 S_z^2 + \frac{\hbar J^3}{8\omega_0^2} [1 - (1 - S^2) \text{Arth} \zeta / \zeta] S_z^4 - \hbar \Omega S_z. \quad (8)$$

Подставляя (8) в (7) и приравнивая получившееся выражение правой части (5), найдем вблизи T_c :

$$\nu = \omega_0^2(1 + \alpha)/\hbar J, \quad (9)$$

$$\gamma = \tau_{\perp}^{-1} = \sqrt{\alpha} \omega_0, \quad (10)$$

$$\alpha = \frac{(1 - \zeta^2) \text{Arth} \zeta / \zeta}{1 - (1 - \zeta^2) \text{Arth} \zeta / \zeta}. \quad (11)$$

Из (5) следует, что статическая линейная восприимчивость $\chi_0 \sim \omega_0 S_{x0} / \omega_+^2$ не зависит от релаксационного параметра γ , как это следует и из термодинамической теории [1,2]. Кроме того, из выражения для ω_+ (см. выше) видно, что χ_0 имеет полюс при $T = T_c$, что также согласуется с общетеоретическими положениями. Если в (3) положить $\Omega_{\perp}^{ef} = 0$, к данным выводам прийти невозможно.

Часто встречаются ситуации, когда эффекты туннелирования несущественны. Полагая в (5) $\omega_0 \rightarrow 0$, приходим к выводу о том, что критическая динамика в окрестности T_c становится чисто релаксационной. В этом случае динамическое поведение системы определяется процессами тепловых перебросов между минимумами двухъямного кристаллического потенциала [2]. Соответствующее время релаксации τ_+ , как следует из (7)–(11), при $T > T_c$ определяется соотношением

$$\tau_+^{-1} = \gamma \frac{T - T_c}{T}, \quad (12)$$

в релаксационный параметр

$$\gamma = 1.22kT_c/\hbar, \quad (13)$$

где $T_c = \hbar J/k$.

Налицо эффект критического замедления при $T \rightarrow T_c$, наблюдающийся в экспериментах с кристаллами типа порядок–беспорядок и вытекающий из общей динамической теории критических явлений [10]. Заметим, что если в (3) положить $\Omega_{\perp}^{ef} = 0$, как это обычно делается в задачах квантовой электроники, то при $\omega_0 \rightarrow 0$ эффект критического замедления получить не удастся. Это обстоятельство — существенный аргумент в пользу принятого способа учета релаксации.

Соотношение (10) (см. также (11)) наряду с (6) может использоваться для косвенного определения ω_0 и J по экспериментальным данным для γ . Для измерения последнего параметра разработано достаточно много методов [10]. В качестве примеров рассмотрим кристаллы KN_2PO_4 и KD_2PO_4 . Для первого температура перехода $T_c^{(1)} = 123$ К, для второго $T_c^{(2)} = 213$ К [1,10]. Во втором случае можно положить приблизительно $\omega_0^{(2)} = 0$. Тогда $J = kT_c^{(2)}/\hbar = 2.8 \cdot 10^{13}$ с⁻¹. Используя (13), находим, что $\gamma^{(2)} = 3.4 \cdot 10^{13}$ с⁻¹. В то же время из (6) для ω_0 в случае KN_2PO_4 находим $\omega_0^{(1)} = 2.6 \cdot 10^{13}$ с⁻¹. При этом, как обычно, предполагается, что J одинаково для

обоих сегнетоэлектриков. Тогда, используя (10) и (11), получаем для KN_2PO_4 $\gamma^{(1)} = 1.6 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$. Более чем двукратное увеличение параметра γ при замещении водорода дейтерием может трактоваться как релаксационный изотопический эффект.

При $\zeta \rightarrow 1$, $\alpha \rightarrow 0$ и, как следует из (10), (11), релаксация исчезает. На самом деле это не так. Дело в том, что ПМП автоматически исключает из рассмотрения псевдоспиновые флуктуации. Именно последние являются причиной релаксации в отсутствие фазовых переходов, когда $\omega_0 > J$. В нашем случае ($\omega_0 < J$) эти тонкие эффекты сильно подавлены пространственными корреляциями параметра порядка, являющимися главной причиной его релаксации в окрестности перехода.

Работа выполнена при поддержке ассоциации INTAS в рамках программы "Международного центра фундаментальной физики в Москве" (грант 93-2492), Российского фонда фундаментальных исследований (проект 96-02-16228а) и Европейской академии.

Список литературы

- [1] Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М.: Наука. 1973. 328 с.
- [2] Струков Б.А., Леванюк А.П. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. М.: Наука, 1983. 240 с.
- [3] Андреев А.В., Емельянов В.И., Ильинский Ю.А. Кооперативные явления в оптике. М.: Наука. 1988. 288 с.
- [4] Иргин В.Ю., Кацнельсон М.И., Трефилов А.В. // ЖЭТФ. 1994. Т. 105. В. 6. С. 1733-1744.
- [5] Фейман Р. Статистическая механика. М.: Мир, 1978. 408 с.
- [6] Сазонов С.В. // ФТТ. 1988. Т. 37. № 11. С. 3226-3230.
- [7] Марченко В.И. // Письма в ЖЭТФ. 1992. Т. 56. В. 11. С. 592-594.
- [8] Варьяхтар В.Г. // Интегрируемость и кинетические уравнения для солитонов. Киев: Наук. думка, 1990. С. 6-43.
- [9] Сазонов С.В. // ФТТ. 1995. Т. 37. № 6. С. 1612-1622.
- [10] Брус А., Каули Р. Структурные фазовые переходы. М.: Мир, 1984. 408 с.

Астраханский государственный
технический университет

Поступило в Редакцию
28 мая 1996 г.