*Математические структуры и моделирование*
2002, вып. 9, с. 1–7

УДК 536.763/764

# ЗАВИСИМОСТЬ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ОДНОРОДНЫХ СЖИМАЕМЫХ СИСТЕМ ОТ РАЗМЕРНОСТИ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

**С.В. Белим**

The renormalization-group method is applied to analysis of phase transitions in systems where the order parametr is coupled to nonordering additional elastic variable. A variety of critical and tricritical behavior is found as function of the physical variables and possible macroccopic constraints imposed on the system. The tricritical exponents were calculated in two-loop order with using Pade-Borel summation technique.

В сжимаемых системах связь параметра порядка с упругими деформациями играет важную роль. Как впервые было показано в [1], для упруго-изотропного тела критическое поведение сжимаемых систем с квадратичной стрикцией неустойчиво относительно связи параметра порядка с акустическими модами и реализуется фазовый переход первого рода, близкий ко второму. Однако выводы работы [1] справедливы только в области низких давлений и, как показано в [2], в области высоких давлений, начиная с некоторого трикритического значения $P_t$, деформационные эффекты, индуцируемые внешним давлением, оказывают на систему более радикальное влияние, приводя к смене знака эффективной константы взаимодействия флуктуаций параметра порядка и, как следствие, рода фазового перехода. При этом в [2] для однородных сжимаемых систем предсказывается два типа трикритического поведения и существование критической точки четвертого порядка, в которой пересекаются две трикритические кривые. Расчеты, проведенные в рамках двухпетлевого приближения [3], подтвердили наличие двух типов трикритического поведения для изинговских систем и позволили получить значения трикритических индексов.

Согласно критерию, полученному в [1], стрикционные эффекты, рассматриваемые как дополнительные термодинамические параметры, приводят к смене режима критического поведения только в системах с сингулярным поведением теплоемкости в отсутствии деформаций. Индекс теплоемкости $\alpha$ ($C \sim |T - T_c|^{-\alpha}$) положителен лишь для изинговских магнетиков. Для XY-модели и модели Гейзенберга индекс теплоемкости жестких систем положителен, и, следовательно, упругие деформации не должны сказываться на критическом поведении. Отсюда вытекает, что критическое значение размерности параметра порядка $n_c < 2$.

© **2002 С.В. Белим**
E-mail: belim@univer.omsk.su
Омский государственный университет

В настоящей работе осуществлено развитие модели фазовых превращений в однородных сжимаемых системах, характеризующихся различной размерностью флуктуирующего параметра порядка [4, 5], рассматриваемых методами ренорм-группы в двухпетлевом приближении непосредственно в трехмерном пространстве. Исследуются также условия реализации трикритического поведения за счет эффектов дальнодействующего взаимодействия флуктуаций параметра порядка, обусловленного длинноволновыми акустическими модами. В связи с тем, что в критической области основной вклад в стрикционные эффекты дает зависимость обменного интеграла от расстояния, рассматриваются лишь упруго-изотропные системы.

Гамильтониан однородной изингоподобной модели с учетом упругих деформаций может быть записан в виде:

$$\begin{aligned} H_0 &= \int d^Dx[\frac{1}{2}(\tau_1+\nabla^2)\vec{S}(x)^2 + +\frac{u_0}{4!}(\vec{S}(x)^2)^2] + \int d^Dx[a_1(\sum_{\alpha=1}^{3} u_{\alpha\alpha}(x))^2 + \\ &+ a_2\sum_{\alpha,\beta=1}^{3} u_{\alpha\beta}^2] + \frac{1}{2}a_3\int d^Dx\vec{S}(x)^2(\sum_{\alpha=1}^{3} u_{\alpha\alpha}(x)), \end{aligned} \tag{1}$$

где $\vec{S}(x)$ – $n$-мерный параметр порядка, $u_0$ – положительная константа, $\tau_0 \sim |T-T_c|/T_c$, $T_c$ – температура фазового перехода, $u_{\alpha\beta}$ – тензор деформаций, $a_1, a_2$ – упругие постоянные кристалла, $a_3$ – параметр квадратичной стрикции. Переходя в (1) к фурье-образам переменных и интегрируя по слагаемым, зависящим от нефлуктуирующих переменных, не взаимодействующих с параметром порядка $S(x)$, и вводя для удобства новую переменную $y(x) = \sum\limits_{\alpha=1}^{3} u_{\alpha\alpha}(x)$, получим гамильтониан системы в следующем виде:

$$\begin{aligned} H_0 = \frac{1}{2}\int d^Dq(\tau_0+q^2)\vec{S}_q\vec{S}_{-q} + \frac{u_0}{4!}\int d^Dq_i(\vec{S}_{q1}\vec{S}_{q2})(\vec{S}_{q3}\vec{S}_{-q1-q2-q3}) + \qquad (2) \\ +a_3\int d^Dqy_{q1}\vec{S}_{q2}\vec{S}_{-q1-q2} + \frac{a_3^{(0)}}{\Omega}y_0\int d^Dq\vec{S}_q\vec{S}_{-q} + \frac{1}{2}a_1\int d^Dqy_qy_{-q} + \frac{1}{2}\frac{a_1^{(0)}}{\Omega}y_0^2. \end{aligned}$$

В (2) выделены слагаемые $y_0$, описывающие однородные деформации. Как показано в работе [1], такое разделение необходимо, так как неоднородные деформации $y_q$ отвечают за обмен акустическими фононами и приводят к эффектам дальнодействия, которые отсутствуют при однородных деформациях.

Определим эффективный гамильтониан системы, зависящий только от сильно флуктуирующего параметра порядка $S$, следующим образом:

$$\exp\{-H[\vec{S}]\} = B\int \exp\{-H_R[\vec{S}, y]\}\prod dy_q. \tag{3}$$

Если эксперимент осуществляется при постоянном объеме, то $y_0$ является константой, интегрирование в (3) проводится только по неоднородным деформациям и однородные деформации вклада в эффективный гамильтониан не вносят.

При постоянном давлении в гамильтониан добавляется слагаемое $P\Omega$, объем представляется в терминах компонент тензора деформации в виде

$$\Omega = \Omega_0[1 + \sum_{\alpha=1} u_{\alpha\alpha} + \sum_{\alpha\neq\beta} u_{\alpha\alpha}u_{\beta\beta} + O(u^3)], \tag{4}$$

и интегрирование в (3) осуществляется также и по однородным деформациям. Как отмечено в [6], учет в (4) квадратичных слагаемых может оказаться важным в случае высоких давлений и кристаллов с большими стрикционными эффектами. Пренебрежение в [1] данными квадратичными слагаемыми ограничивает применение результатов работы Ларкина и Пикина только к случаю низких давлений. В результате:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\int d^D q(\tau_0 + q^2)\vec{S}_q\vec{S}_{-q} + \left(\frac{u_0}{4!} - \frac{z_0}{2}\right)\int d^D\{q_i\}\vec{S}_{q1}\vec{S}_{q2}\vec{S}_{q3}\vec{S}_{-q1-q2-q3} \\ &+ \frac{1}{2\Omega}(z_0 - w_0)\int d^D\{q_i\}\vec{S}_{q1}\vec{S}_{-q1}\vec{S}_{q2}\vec{S}_{-q2}), \\ & z_0 = a_1^2/(4a_3), \quad w_0 = a_1^{(0)2}/(4a_3^{(0)}). \end{aligned} \tag{5}$$

Возникающий в гамильтониане эффективный параметр взаимодействия $v_0 = u_0 - 12z_0$ за счет влияния стрикционных эффектов, определяемых параметром $z_0$, может принимать не только положительные, но и отрицательные значения. В результате данный гамильтониан описывает как фазовые переходы первого, так и второго рода. При $v_0 = 0$ в системе реализуется трикритическое поведение. В свою очередь, эффективное взаимодействие в (5), определяемое разностью параметров $z_0 - w_0$, при $z_0 - w_0 > 0$ может вызывать в системе фазовый переход второго рода, а при $z_0 - w_0 < 0$ – фазовый переход первого рода. Из данного вида эффективного гамильтониана следует возможность осуществления критической точки более высокого порядка, в которой пересекаются трикритические кривые, при одновременном выполнении условий $v_0 = 0$, $z_0 = w_0$ [2]. Следует отметить, что при трикритическом условии $z_0 = w_0$ гамильтониан модели (5) изоморфен гамильтониану однородной жесткой системы.

В рамках теоретико-полевого подхода [7] асимптотическое критическое поведение и структура фазовых диаграмм во флуктуационной области определяется реном-групповым уравнением Каллана-Симанчика для вершинных частей неприводимых функций Грина. Для вычисления $\beta$- и $\gamma$-функций как функций, входящих в уравнение Каллана-Симанчика перенормированных вершин взаимодействия $u, a_1, a_1^{(0)}$ или более удобных для определения критического и трикритического поведения модели комплексных вершин $z = a_1^2/(4a_3)$, $w = a_1^{(0)2}/(4a_3^{(0)})$, $v = u - 12z$, был применен стандартный метод, основанный на диаграммной технике Фейнмана и процедуре перенормировки [8]. В результате в рамках двухпетлевого приближения были получены следующие выражения для

$\beta$-функций:

$$\begin{aligned}
\beta_v &= -v\Big(1-\frac{n+8}{6}v+\frac{41n+190}{243}v^2\Big), \\
\beta_z &= -z\Big(1-\frac{n+2}{3}v-2nz+\frac{23(n+2)}{243}v^2\Big), \\
\beta_w &= -w\Big(1-\frac{n+2}{3}v-4nz+2nw+\frac{23(n+2)}{243}v^2\Big).
\end{aligned} \tag{6}$$

Известно, что ряды теории возмущений являются асимптотическими, а вершины взаимодействия флуктуаций параметров порядка во флуктуационной области достаточно велики, чтобы можно было непосредственно применять выражения (6). Поэтому с целью извлечения из полученных выражений нужной физической информации был применен обобщенный на трехпараметрический случай метод Паде-Бореля. При этом прямое и обратное преобразования Бореля имеют вид

$$\begin{aligned}
&f(v,z,w)=\sum_{i_1,i_2,i_3} c_{i_1,i_2,i_3} v^{i_1} z^{i_2} w^{i_3} = \int_0^\infty e^{-t} F(vt,zt,wt)dt, \\
&F(v,z,w)=\sum_{i_1,i_2,i_3} \frac{c_{i_1,i_2,i_3}}{(i_1+i_2+i_3)!} v^{i_1} z^{i_2} w^{i_3}.
\end{aligned} \tag{7}$$

Для аналитического продолжения борелевского образа функции вводится ряд по вспомогательной переменной $\theta$

$$\tilde{F}(v,z,w,\theta)=\sum_{k=0}^{\infty}\theta^k \sum_{i_1,i_2,i_3} \frac{c_{i_1,i_2,i_3}}{k!} v^{i_1} z^{i_2} w^{i_3} \delta_{i_1+i_2+i_3,k}\ , \tag{8}$$

к которому применяется аппроксимация Паде [L/M] в точке $\theta = 1$. Данная методика была предложена и апробирована в работах [9] для описания критического поведения ряда систем, характеризующихся несколькими вершинами взаимодействия флуктуаций параметра порядка. Выявленное в [9] свойство сохранения симметрии системы в процессе применения Паде-аппроксимант по переменной $\theta$ становится существенным при описании многовершинных моделей.

В двухпетлевом приближении для вычисления $\beta$-функций был использован аппроксимант [2/1]. Природа критического поведения определяется существованием устойчивой фиксированной точки, удовлетворяющей системе уравнений

$$\beta_i(v^*,z^*,w^*)=0 \qquad\qquad (i=1,2,3). \tag{9}$$

Требование устойчивости фиксированной точки сводится к условию, чтобы собственные значения $b_i$ матрицы

$$B_{i,j}=\frac{\partial\beta_i(u_1^*,u_2^*,u_3^*)}{\partial u_j} \qquad\qquad (u_i,u_j\equiv v,z,w) \tag{10}$$

Таблица 1. Значения фиксированных точек и собственных значений матрицы устойчивости

| N | $v^*$ | $z^*$ | $w^*$ | $b_1$ | $b_2$ | $b_3$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| n=1 | | | | | | |
| I0 | 0 | 0 | 0 | -1 | -1 | -1 |
| I1 | 1,064472 | 0 | 0 | 0,6536 | -0,1692 | -0,1692 |
| I2 | 1,064472 | 0,089187 | 0 | 0,6536 | 0,1702 | 0,1710 |
| I3 | 1,064472 | 0,089187 | 0,089187 | 0,6536 | 0,1702 | -0,1710 |
| I4 | 0 | 0,5 | 0 | -1 | 1 | -0,16923 |
| I5 | 0 | 0,5 | 0,5 | -1 | 1 | -1 |
| n=2 | | | | | | |
| X0 | 0 | 0 | 0 | -1 | -1 | -1 |
| X1 | 0,934982 | 0 | 0 | 0,6673 | -0,0017 | 0,1053 |
| X2 | 0,934982 | 0,000439 | 0 | 0,6673 | 0,0017 | 0,1087 |
| X3 | 0,934982 | 0,000439 | 0,000439 | 0,6673 | 0,0017 | -0,1053 |
| X4 | 0 | 0,25 | 0 | -1 | 1 | 1 |
| X5 | 0 | 0,25 | 0,25 | -1 | 1 | -1 |
| n=3 | | | | | | |
| G0 | 0 | 0 | 0 | -1 | -1 | -1 |
| G1 | 0,829620 | 0 | 0 | 0,6813 | 0,1315 | 0,2173 |
| G2 | 0,829620 | 0,022909 | 0 | 0,6813 | -0,1311 | -0,0518 |
| G3 | 0,829620 | 0,022909 | 0,022909 | 0,6813 | -0,1311 | -0,2170 |
| G4 | 0 | 1/6 | 0 | -1 | 1 | 1 |
| G5 | 0 | 1/6 | 1/6 | -1 | 1 | -1 |

лежали в правой комплексной полуплоскости. Фиксированная точка с $v^* = 0$, соответствующая трикритическому поведению, является седловой точкой и должна быть устойчивой в направлениях, задаваемых переменными $z, w$, и неустойчивой в направлении, определяемом переменной $v$. Стабилизация трикритической фиксированной точки в направлении, задаваемом переменной $v$, осуществляется в результате учета в эффективном гамильтониане модели членов шестого порядка по флуктуациям параметра порядка. Фиксированная точка с $z^* = w^*$, соответствующая трикритическому поведению второго типа, является также седловой точкой и должна быть устойчивой в направлениях, задаваемых переменными $v, z$, и неустойчивой в направлении, определяемом переменной $w$. Ее стабилизация может осуществляться за счет влияния ангармонических эффектов. Полученная система просуммированных $\beta$-функций содержит широкое разнообразие фиксированных точек. В таблице 1 приведены наиболее интересные для описания критического и трикритического поведения фиксированные точки для модели Изинга ($n = 1$), XY-модели ($n = 2$) и модели Гейзенберга($n = 3$), лежащие в физической области значений вершин с $v, z, w \geq 0$. В таблице приведены также собственные значения матрицы устойчивости для соответствующих фиксированных точек.

Анализ значений фиксированных точек и их устойчивости позволяет сделать ряд выводов. Гауссовы фиксированные точки I0, X0, G0 являются трикритическими и неустойчивы относительно влияния упругих деформаций. Критическое поведение несжимаемых систем относительно деформационных степеней свободы неустойчиво для модели Изинга (I1) и устойчиво для модели Гейзенберга (G1). Для XY-модели (X1) собственное значение $b_2 < 0$, но по порядку величины сравнимо с точностью вычислений, вследствие чего нельзя сделать однозначного вывода об устойчивости данной фиксированной точки. По-видимому, сложности в описании XY-модели связаны с близостью критической размерности параметра порядка $n_c$ к двум. Согласно критерию, полученному в работе [1], $n_c < 2$, тогда как двухпетлевое приближение дает $n_c = 2,011$. Для изинговских систем оказывается устойчивой фиксированная точка при постоянной деформации (I2), для гейзенберговских систем соответствующая точка неустойчива (G2), для XY-модели нельзя дать однозначный ответ в силу все той же близости критической размерности к двум. Фиксированные точки I3, X3, G3 описывают первый тип трикритического поведения сжимаемых систем, наблюдаемый при постоянном давлении. Фиксированные точки I4, X4, G4 являются трикритическими для систем, исследуемых при постоянном объеме. Точки I5, X5, G5 являются критическими точками четвертого порядка, в них пересекаются две трикритические линии.

Полученные в двухпетлевом приближении значения вершин в фиксированных точках, соответствующих критическому и трикритическому поведению сжимаемой модели Изинга, позволяют вычислить критические индексы для данных систем на основе просуммированных методом Паде-Бореля выражений для индексов $\nu$ и $\eta$:

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{1}{2}\Big(1 + \frac{n+2}{12}v^* + nz^* - nw^* - \frac{11(n+2)}{3888}v^{*2}\Big), \\ \eta &= \frac{2(n+2)}{243}v^{*2}. \end{aligned} \tag{11}$$

Значения остальных критических индексов могут быть получены из скейлинговых соотношений, связывающих их с индексами $\nu, \eta$.

Критическое поведение сжимаемых изинговских систем при постоянном давлении (I2) характеризуется перенормированными индексами согласно теории Фишера о влиянии дополнительных термодинамических переменных [10]:

$$\nu^{(I)} = 0,632; \eta^{(I)} = 0,028; \alpha^{(I)} = 0,103; \beta^{(I)} = 0,325; \gamma^{(I)} = 1,247.$$

Для трикритического поведения первого типа (I3, X3, G3) гамильтониан (5) изоморфен гамильтониану однородной несжимаемой модели, поэтому и критические индексы совпадают с индексами несжимаемой модели:

$$\begin{aligned} \nu^{(I)} &= 0,708; \eta^{(I)} = 0,028; \alpha^{(I)} = -0,125; \beta^{(I)} = 0,364; \gamma^{(I)} = 1,397; \\ \nu^{(XY)} &= 1; \eta^{(XY)} = 0; \alpha^{(XY)} = -1; \beta^{(XY)} = 0,5; \gamma^{(XY)} = 2; \\ \nu^{(G)} &= 1; \eta^{(G)} = 0; \alpha^{(G)} = -1; \beta^{(G)} = 0,5; \gamma^{(G)} = 2. \end{aligned}$$

Трикритическое поведение второго типа (I4, X4, G4) соответствует критическому поведению сферической модели и определяется соответствующими индексами:

$$\begin{aligned} \nu^{(I)} &= 1; \eta^{(I)} = 0; \alpha^{(I)} = -1; \beta^{(I)} = 0,5; \gamma^{(I)} = 2; \\ \nu^{(XY)} &= 1; \eta^{(XY)} = 0; \alpha^{(XY)} = -1; \beta^{(XY)} = 0,5; \gamma^{(XY)} = 2; \\ \nu^{(G)} &= 1; \eta^{(G)} = 0; \alpha^{(G)} = -1; \beta^{(G)} = 0,5; \gamma^{(G)} = 2. \end{aligned}$$

Фиксированные точки четвертого порядка (I4, X4, G4) характеризуются среднеполевыми значениями критических индексов:

$$\begin{aligned} \nu^{(I)} &= 0,5; \eta^{(I)} = 0; \alpha^{(I)} = 0,5; \beta^{(I)} = 0,25; \gamma^{(I)} = 1; \\ \nu^{(XY)} &= 0,5; \eta^{(XY)} = 0; \alpha^{(XY)} = 0,5; \beta^{(XY)} = 0,25; \gamma^{(XY)} = 1; \\ \nu^{(G)} &= 0,5; \eta^{(G)} = 0; \alpha^{(G)} = 0,5; \beta^{(G)} = 0,25; \gamma^{(G)} = 1. \end{aligned}$$

Проведенные исследования показали существенность влияния упругих деформаций на критическое поведение сжимаемых систем, проявляющееся как в изменении значений критических индексов для изинговских систем, так и появлении мультикритических точек на фазовых диаграммах всех трех моделей. Мы надеемся, что выявленные эффекты и определенные значения индексов найдут подтверждение в экспериментальных исследованиях.

## Литература


1. Ларкин А.И., Пикин С.А. // ЖЭТФ. 1969. Т.56. С.1664.
2. Imry Y. // Phys. Rev. Lett. 1974. V.33. P.1304.
3. Белим С.В., Прудников В.В. // ФТТ. 2001. Т.45. С.1299.
4. Laptev V.M., Skryabin Yu.N. // Phys. Stat. Sol. 1979. **B91**, K143.
5. Skryabin Y.N., Shchanov A.V. // Phys. Lett. 1997. **A234**, 1. P.147.
6. Bergman D.J., Halperin B.I. // Phys. Rev. 1976. **B13**, 4. P.2145.
7. Amit D. *Field theory the renormalization group and critical phenomena.* New York: McGraw-Hill, 1976.
8. Zinn-Justin J. *Quantum field theory and critical phenomena.* Oxford: Clarendon Press, 1989.
9. Sokolov A.I., Varnashev K.B. // Phys.Rev. 1999. **B59**, 13. P.8363.
10. Fisher M.E. // Phys.Rev. 1976. **176**, 1. P.257.