

НЕЛИНЕЙНЫЕ ПЕРИОДИЧЕСКИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СКАЛЯРНОГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА В СИСТЕМАХ С ЭФФЕКТИВНЫМ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЕМ

Березовский С.В.

Научно-технический центр электрофизической обработки Национальной академии наук Украины. 310002 Харьков, ул. Чернышевского 28, а/я 8812, Украина.

Исследованы свойства длиннопериодических распределений скалярного параметра порядка $\varphi(x)$, удовлетворяющих соотношению $[\partial \varphi(x) / \partial x]^2 = \sum a_n \varphi^{2n}$, $n = 0, 1, 2$. Показано, что по сравнению с моделью, в которой распределение параметра порядка аппроксимируется гармоническим рядом, решение с варьируемыми параметра-

ми a_n полнее и корректнее воспроизводит характерные, в том числе нелинейные, свойства модулированных структур однокомпонентного параметра порядка. Изучена зависимость $\varphi(x)$ от параметров термодинамического потенциала. Результаты иллюстрируются на примере сегнетоэлектрика NaNO_2 .

В системах с дальнедействующими взаимодействиями, например, некоторых сегнетоэлектриках, магнетиках, возможно существование устойчивых пространственно неоднородных состояний параметра порядка (ПП) [1,2]. Дальнедействие может сильно подавлять критические флуктуации. Это обстоятельство позволяет эффективно исследовать фазовые превращения в указанных средах с помощью моделей, обобщающих теорию Ландау фазовых переходов [3].

Среди систем такого рода выделяются среды, характеризующиеся скалярными ПП. Из-за относительной простоты описания, исследование таких сред позволяет сформулировать и апробировать важнейшие положения теории [3]. Получаемые результаты имеют весьма универсальный характер и оказываются применимыми при изучении как основных, так и возбужденных неоднородных состояний в различных физических системах (см., например [3-5]).

В работах [6-8] был развит подход, позволивший найти новые нелинейные длиннопериодические распределения однокомпонентного ПП $\varphi(x)$ в системах с эффективным дальнедействием.

С математической точки зрения суть подхода [6-8] состоит в переходе от нелинейного дифференциального уравнения четвертого порядка — вариационного уравнения для ПП $\varphi(x)$ — к представлению

$$\left[\frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \right]^2 \equiv [\varphi'(x)]^2 = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi^{2n}(x), \quad (1)$$

где коэффициенты a_n определяются из бесконечной системы зацепляющихся алгебраических уравнений [6,7]. В рамках подхода (1) были найдены точные частные решения, выражаемые через эллиптические функции Якоби. Но общее точное решение задачи (1) не известно. Вместе с тем, заменяя верхний бесконечный предел суммирования конечным значением N , получаем некоторый N -тый класс пробных функций вариационной задачи. В этом случае коэффициенты a_n могут быть определены посредством варьирования термо-

динамического потенциала (ТП) по ним. Возможны и другие способы приближенного решения, опирающиеся на положения изложенного подхода [9].

Проведенное в предыдущих работах аналитическое исследование задачи (1) ставит вопрос об отборе физически значимых распределений из общей совокупности найденных точных и приближенных решений [7,9]. При этом на первом этапе естественно рассмотреть распределения, описывающие основные состояния системы. Такие решения должны соответствовать абсолютному минимуму ТП [3].

Данная работа посвящена количественному изучению некоторых решений задачи (1) в случае $N = 2$. В частности, рассмотрены решения, параметрическая эволюция которых допускает возникновение распределений ПП типа периодической решетки доменных стенок.

Рассмотрим систему, описываемую однокомпонентным ПП и характеризуемую ТП вида [3,5,6-8]:

$$\Phi = \frac{1}{L} \int_0^L [\kappa(\varphi'')^2 - \eta(\varphi\varphi')^2 - \sigma(\varphi')^2 + A\varphi^2 + \frac{B}{2}\varphi^4 + \frac{C}{3}\varphi^6] dx, \quad (2)$$

где L — длина кристалла вдоль оси модуляции OX ; $\kappa, \eta, \sigma, A, B, C$ — материальные параметры среды, $\kappa > 0, \sigma > 0, C > 0$. Предполагаем, что фазовые переходы в системе происходят при изменении температуры и $A = A_0(T - T_0)$.

Если параметр $\sigma > 0$, конкуренция и компромисс градиентных слагаемых в ТП (2) делают возможным существование устойчивых пространственно неоднородных состояний ПП [2,3]. При понижении температуры зависимость модулированного ПП от координаты x обычно видоизменяется. Вблизи точки перехода из высокосимметричной фазы в модулированную фазу она является синусоидальной. Но в окрестности точки перехода в соразмерную фазу она трансформируется в нелинейную зависимость, т.е. растет вклад высших гармоник [1].

Перенормируя ПП и изменяя масштаб длин согласно $\varphi(x) \rightarrow \sqrt{\sigma} / (\kappa C)^{1/4} \cdot \varphi(\sqrt{\kappa} / \sigma \cdot x)$, преобразуем ТП (2) к виду:

$$\Phi = \frac{\Phi_1}{L_1} \int_0^{L_1} [(\varphi'')^2 - g(\varphi\varphi')^2 - (\varphi')^2 + q\varphi^2 + \frac{p}{2}\varphi^4 + \frac{1}{3}\varphi^6] dx, \quad (3)$$

где $\Phi_1 = \sigma^3 / (\kappa\sqrt{\kappa C})$, $L_1 = L \cdot \sqrt{\sigma} / \kappa$, $g = \eta / \sqrt{\kappa C}$, $q = \kappa A / \sigma^2$, $p = B / \sigma \cdot \sqrt{\kappa} / C$, ПП φ и величина x — безразмерны. Итак, ТП (3) зависит от трех безразмерных обобщенных параметров — эффективной температуры q , величины локального нелинейного взаимодействия p и величины g взаимодействия поля $\varphi(x)$ с полем градиентов $\nabla\varphi(x)$.

Вариационное уравнение для функционала (3) имеет вид:

$$\varphi^{(IV)} + g[\varphi^2\varphi'' + \varphi(\varphi')^2] + \varphi'' + q\varphi + p\varphi^3 + \varphi^5 = 0. \quad (4)$$

Как сказано выше, ряд периодических решений уравнения (4) может быть найден согласно подходу [6-8]. Из этих решений рассмотрим следующие три.

А. $N = 1$, $[\varphi'(x)]^2 = a_0 + a_1\varphi^2$ — гармоническое приближение:

$$\varphi(x) = a \cdot \sin(bx), \quad (5)$$

параметры a, b определяются путем минимизации ТП [2,3,10].

Чтобы описать в модели (5) распределения ПП, отличающиеся от синусоидальных, необходимо учесть высшие кратные гармоники [11]. Коэффициенты такого разложения находятся путем минимизации ТП. Существенно нелинейные зависимости аппроксимируются гармоническим рядом лишь при большом (в пределе — бесконечном) числе членов. Таким

образом, при использовании подхода (5) в общем случае имеем большое количество варьируемых параметров.

Б. $N = 2$, $[\varphi'(x)]^2 = a_0 + a_1 \varphi^2 + a_2 \varphi^4$. Решениями данного уравнения являются эллиптические функции Якоби, из которых конечны на оси OX следующие три: $\operatorname{sn}(x, k)$, $\operatorname{cn}(x, k)$, $\operatorname{dn}(x, k)$ [12]. Из них в свою очередь выделим эллиптический синус $\operatorname{sn}(x, k)$, так как эволюция его функциональной зависимости от координаты при изменении модуля k^2 от нуля до единицы качественно согласуется с идеальной температурной трансформацией распределения ПП в модулированной фазе [1-3]. Таким образом, полагаем:

$$\varphi(x) = a \cdot \operatorname{sn}(bx, k). \quad (6)$$

Из параметрического семейства функций (6) рассмотрим два случая.

- а) Точное частное решение уравнения (4), параметры a , b , k которого определяются согласно формулам работы [7].
- б) Приближенное решение вариационной задачи (3)-(4). Параметры a , b , k находятся путем минимизации ТП (3).

Нами была исследована зависимость параметров a , b , k , периодов модуляции и термодинамических потенциалов для точного и варьируемого решений (6) от значений параметров среды q , g , p . Для сравнения рассчитывались также аналогичные величины в модели (5) [10]. В случае варьируемого распределения (6) минимизация ТП по a , b , k выполнялась численно, так как аналитическое решение соответствующих вариационных уравнений при произвольном $0 \leq k^2 \leq 1$ отсутствует. При $p > 0$ часть расчетов выполнялась без учета инварианта φ^6 , поскольку при положительном параметре p добавление этого инварианта качественно не меняет результатов.

В проведенных расчетах параметр g изменялся в пределах $-10 \div 0$. При $g > 0$ в общем случае нарушается глобальная устойчивость системы, и появляются "решения" с бесконечно возрастающими амплитудами и волновыми числами [5]. Кроме того, решения (5) и точное (6) имеют физический смысл только при $g < 0$ [7, 14].

При понижении температуры зависимости $a^2(q)$ и $k^2(q)$ представляют собой монотонно возрастающие функции. Зависимость $b^2(q)$ также является монотонной. Но в отличие от модели (5) в случае варьируемого распределения (6) параметр b может не только убывать (как это имеет место, например, при $g = -10$, $p = 1$), но и возрастать (как при $g = -1$, $p = 1$). Однако, период модуляции $T = 4K(k) / b$ варьируемого решения (6) при уменьшении температуры всегда растет, причем быстрее, чем для решения (5) ($K(k)$ — полный эллиптический интеграл 1 рода [12]).

На рисунках 1, 2 показаны характерные зависимости периода модуляции T и ТП Φ / Φ_1 от эффективной температуры q . Сплошной линией изображены результаты расчетов для варьируемого решения (6), штриховой линией — для решения (5), штрих-пунктирной линией — для точного решения (6). Материальные параметры среды: $g = -1,0$, $p = 0,2$, инвариант φ^6 в данных расчетах не учитывался. Пунктирной линией показан ТП для соразмерной фазы: $\Phi / \Phi_1 = -q^2 / 2p$. Точка пересечения ТП для варьируемого решения (6) с ТП для соразмерной фазы: $q_L = -0,322$, $k_L^2 = 0,823$.

Точка перехода в модулированную фазу для варьируемого распределения (6) не зависит от величины параметров g , p и равна $q_L = 1 / 4$, модуль $k_L^2 = 0$. Вместе с тем, температура перехода q_L в соразмерную фазу повышается при увеличении абсолютного значения параметра $|g|$. При этом значения модуля k_L и период модуляции T вблизи q_L также возрастают. В частности, при $g = -1$, $p = 1$: $q_L = -0,69$, $k_L^2 = 0,59$, $T(q_L) / T(q_I) = 1,24$ (в модели (5) период изменяется в 1,15 раз); при $g = -10$, $p = 1$: $q_L = -0,212$, $k_L^2 = 0,932$, $T(q_L) / T(q_I) = 2,1$ (в модели (5) — в 1,4 раза).

Увеличение параметра $p > 0$ (и/или учет инварианта φ^6) качественно эквивалентно уменьшению $|g|$.

Температурный интервал существования $|q_1 - q_0|$ точного решения (6) сильно зависит от параметров g и p [7] (q_0, q_1 — верхняя и нижняя границы существования точного решения (6) соответственно). При некоторых их значениях область $q_1 \leq q \leq q_0$ для точного решения (6) вообще лежит вне интервала $q_L \leq q \leq q_1$ для модулированной фазы варьируемого распределения (6). Такое положение имеет место, например, при $g = -1, p = 1$.

При $p < 0$ возникает новый момент в поведении точного решения (6) (рис. 3). Используемые при построении рис. 3 величины параметров $g = -9,51$ и $p = -0,651$ соответству-

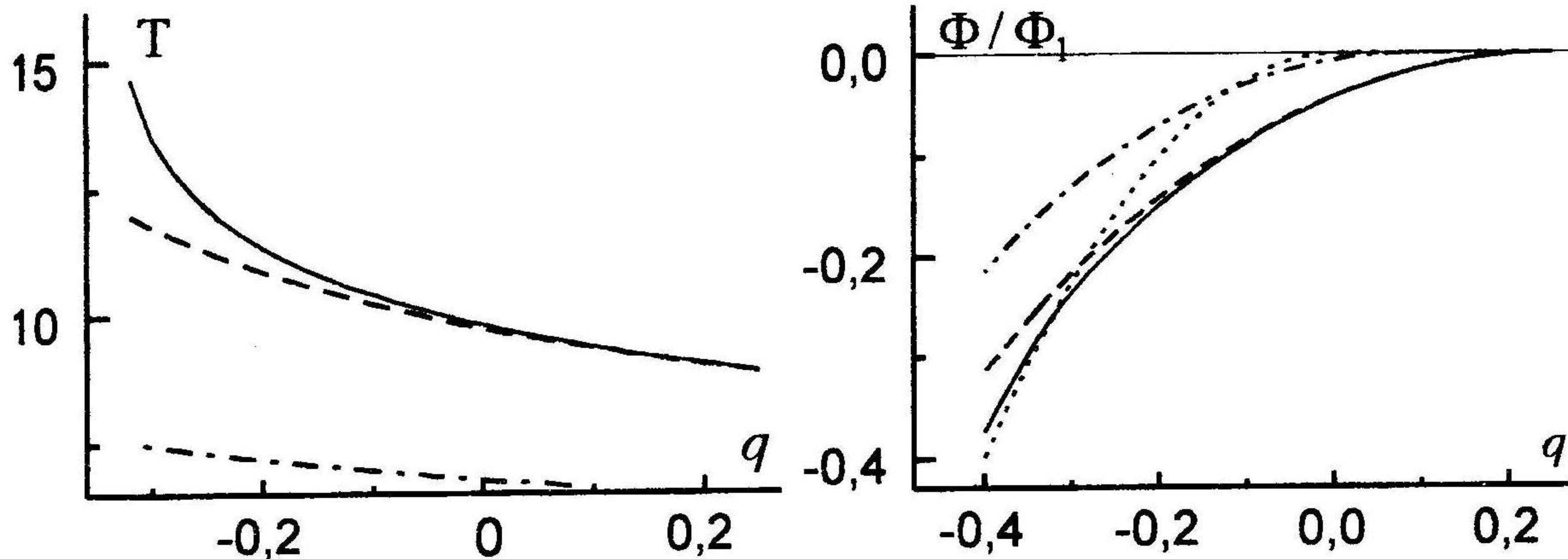


Рис. 1.

Рис. 2.

ют значениям, найденным в работе [10] для нитрита натрия $NaNO_2$ в рамках модели (5). В данных расчетах инвариант φ^6 учтен. Обозначения как на рис. 2. Левая ветвь для точного решения (6) соответствует выбору амплитуды со знаком плюс перед радикалом, а правая — со знаком минус [7]. Точка пересечения ТП для варьируемого решения (6) с ТП для соразмерной фазы $q_L = 0,0685, k_L^2 = 0,347$.

Как видно из рис. 3, ТП для точного решения (6) меняет знак и переходит в область положительных значений при $q \rightarrow q_1$ ($k_1^2 \rightarrow 1$). Анализ выражений для ТП [7] показывает, что отмеченное поведение ТП возможно при таких значениях параметров $g < 0, p < 0$, когда выполняется соотношение $q_1 > 0$.

Обсудим физические аспекты полученных результатов.

Проведенные расчеты подтверждают выводы качественного анализа свойств распределения (6) [7,8]. Результаты вычислений согласуются также с основными заключениями, сделанными в рамках подхода (5) [10,13].

Вместе с тем, варьируемое распределение (6) полнее и корректнее описывает нелинейные, в частности, свойства систем со скалярным ПП. Так, экспериментальные данные [1] и гармонический анализ [13] показывают, что в таких системах сильно подавлены высшие гармоники ПП. Этот вывод непосредственно следует из свойств распределения (6). Например, при $k_L^2 = 0,35$ отношения амплитуд второй и третьей гармоник к амплитуде основной гармоники (5) приблизительно равны 0,026 и 0,0007 соответственно, при $k_L^2 = 0,6, 0,05$ — и 0,003 [12].

Далее, фазовый переход в соразмерную фазу в рассматриваемых системах является переходом 1 рода [1-3]. Рост $|g|$ делает этот переход все более похожим на переход второго рода [13]. В модели (6) это означает следующее. Увеличение $|g|$ ведет к возрастанию $k_L^2 \rightarrow 1$.

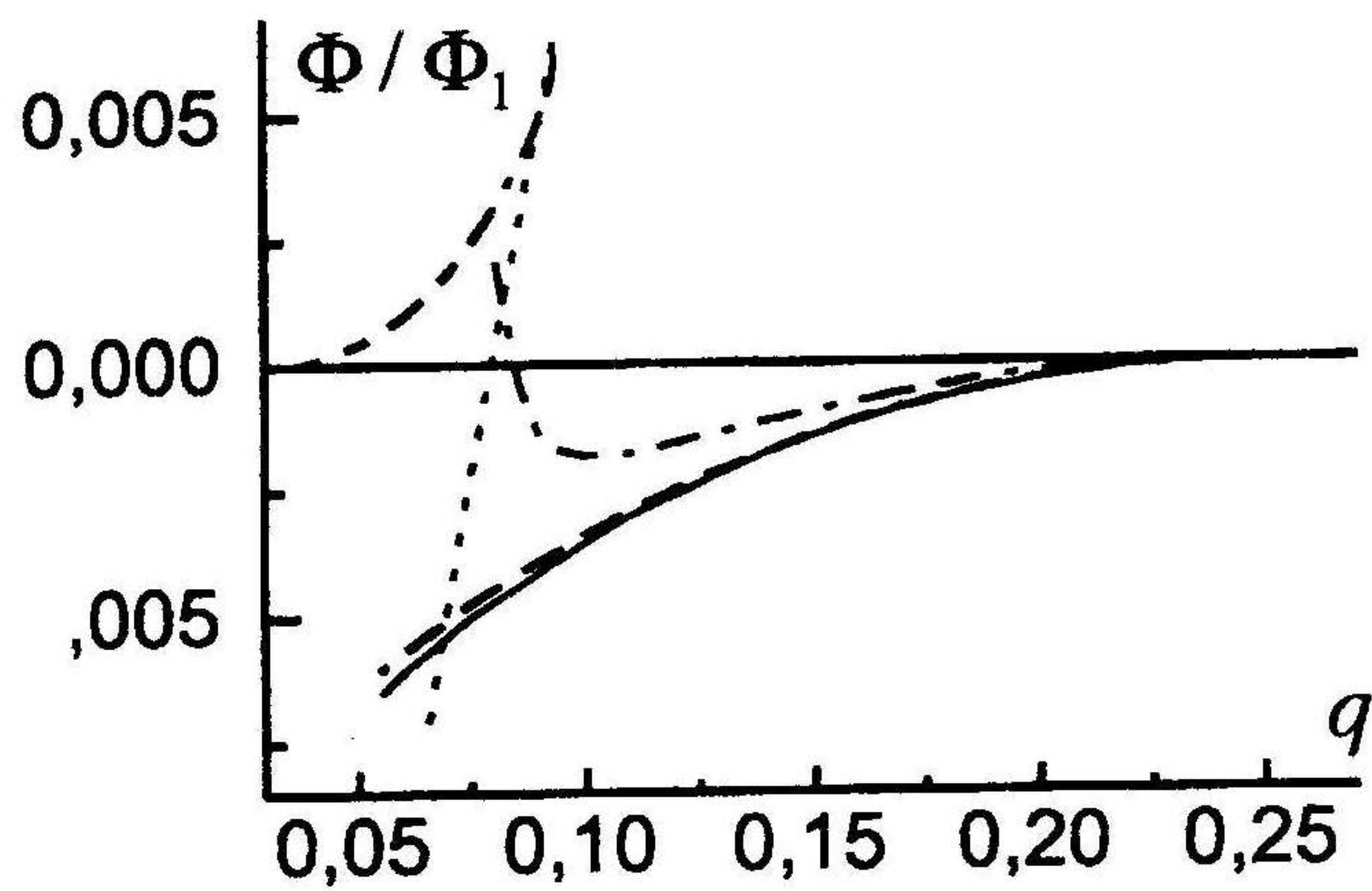


Рис. 3.

При этом вблизи точки перехода q_L период модуляции резко растет. Зависимость ПП от координаты приобретает вид областей соразмерности $\varphi = \pm \varphi_0 \approx const$, разделенных относительно узкими границами. В пределе $k_L^2 = 1$ переход в соразмерную фазу может происходить фактически непрерывно. Такое поведение аналогично свойствам известных решений теории систем с двухкомпонентным ПП [14].

Из сказанного следует также, что модель (6) при достаточно большом относительном вкладе нелокального нелинейного взаимодействия $g \varphi'^2 \varphi^2$ позволяет описывать

мультисолитонные состояния в системах, симметрия которых не допускает существования инвариантов Лифшица. Вместе с тем, даже при $k_L^2 \approx 1$ существенно нелинейное поведение распределения (6) проявляется лишь в относительно узкой окрестности точки перехода q_L . Отметим также, что в проведенном исследовании не было обнаружено петлеобразного (возвратного) поведения ПП для варьируемого решения (6) вблизи точки перехода в соразмерную фазу, как это имеет место для систем с двухкомпонентным ПП [2,3]. Возможно, такое поведение проявляется в окрестности q_L меньшей, чем точность выполненных расчетов.

Особенностью модели (6) является другой по сравнению с подходом (5) механизм изменения периода модуляции. Равновесный период модуляции для распределения (6) определяется не только величиной параметра b , но и значением модуля k .

Таким образом, по сравнению с моделью, в которой распределение ПП аппроксимируется гармоническим рядом, решение с варьируемыми параметрами a_n полнее и корректнее воспроизводит характерные, особенно нелинейные, свойства модулированных структур однокомпонентного ПП.

С другой стороны, точные решения (6), как показали расчеты, не реализуют абсолютный минимум ПП системы во всей области существования модулированной фазы (если вообще попадают в эту область) и не могут описывать равновесные состояния. Вопрос о том, каким состояниям могут соответствовать точные решения (6), выходит за рамки данной работы и составляет предмет дальнейших исследований.

Автор искренне благодарен В.Ф. Клепикову и В.Ю. Корде (НТЦ ЭФО) за плодотворное обсуждение, а также Н.А. Шляхову (ННЦ ХФТИ) за разработку необходимых компьютерных программ.

Работа выполнена при частичной поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Украины (грант №2.4/691), а также ГКННТ Украины (стипендия для молодых ученых 235/96).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] H.Z. Cummins // Phys. Rep. **185**, 5,6, 211 (1990).
- [2] Ю.А. Изюмов, *Дифракция нейтронов на длиннопериодических структурах*. Энергоатомиздат. М. (1987), 200 с.

- [3] Ж.-К. Толедано, П. Толедано, *Теория Ландау фазовых переходов. Приложение к структурным, несоизмерным, магнитным и жидкокристаллическим системам*. Мир. М. (1994), 461 с.
- [4] Ю.Е. Кузовлев, Т.К. Соболева, А.Э. Филиппов // *ЖЭТФ* **103**, 5, 1742 (1993).
- [5] S.V. Goryachev // *Phys. Rev. Lett.* **72**, 12, 1850 (1994).
- [6] V.F. Klerikov, S.V. Berezovsky // *Condensed matter physics* **8**, 69 (1996).
- [7] В.Ф. Клепиков, А.И. Олемской, С.В. Березовский // *Металлофизика и новейшие технологии* **19**, 6, 32 (1997).
- [8] С.В. Березовский, В.Ф. Клепиков, В.Ю. Корда // *УФЖ* **42**, 7, 889 (1997).
- [9] А.И. Олемской, В.Ф. Клепиков, И.В. Коплык, О.Б. Крутько, А.В. Хоменко // *Металлофизика и новейшие технологии* **18**, 2, 3 (1996).
- [10] S.L. Qiu, Mitra Dutta, and H.Z. Cummins, J.P. Wicksted and S.M. Shapiro // *Phys. Rev.* **B34**, 11, 7901 (1986).
- [11] Ю.А. Изюмов, В.М. Лагтев, С.Б. Петров // *ФТТ* **26**, 3, 734 (1984).
- [12] *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами* / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. Наука. М. (1979), 830 с.
- [13] Y. Ishibashi and H. Shiba // *J. Phys. Soc. Jap.* **45**, 2, 409 (1978).
- [14] А.П. Леванюк, Д.Г. Санников // *ФТТ* **18**, 2, 423 (1976).