УДК 538.9

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ НЕСОРАЗМЕРНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ОДНОКОМПОНЕНТНОГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

Березовский С.В.,
Клепиков В.Ф.,
Корда В.Ю.,
Середа Ю.В.,
Шляхов Н.А.

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

В рамках φ^4 -модели полевой теории фазовых переходов, учитывающей градиенты высшего порядка, проведено численное исследование распределений однокомпонентного параметра порядка в температурной области существования несоразмерной фазы.

В работах [1-4] в рамках модели, обобщающей теорию Ландау фазовых переходов, был развит аналитический подход, позволивший найти новые приближенные решения для пространственных распределений однокомпонентного параметра порядка в системах с конкурирующими взаимодействиями. Достоинством этого подхода является, в частности, то, что он предоставляет "рецепт" построения существенно нелинейных решений вариационного уравнения, выражаемых через известные специальные функции, а не в виде ряда Фурье, который для рассматриваемой задачи, вообще говоря, может быть бесконечным [5]. При этом развитый в [1-4] подход дает алгоритм последовательного поиска решений, все более приближающихся к точному.

Вместе с тем, вариационное уравнение для данной задачи является нелинейным дифференциальным уравнением, точное аналитическое решение которого в общем случае не известно. Это обстоятельство служит причиной использования численных методов решения вариационной задачи [6].

Данная работа посвящена численному изучению свойств равновесных распределений однокомпонентного параметра порядка (ПП) в несоразмерной фазе при изменении температуры. Такое исследование представляется необходимым для оценки точности приближенных аналитических решений, получаемых в рамках подхода [1-4], детального прояснения их физического смысла. Кроме того, получение в процессе численного решения данных о структуре термодинамического потенциала (ТП) в окрестности абсолютного минимума является важным предварительным этапом изучения релаксационных свойств рассматриваемой системы.

Несоразмерные состояния однокомпонентного ПП могут быть описаны с помощью следующего выражения для ТП системы [1-4]:

$$\Phi = \Phi_0 \cdot \int_0^L [(\varphi'')^2 - g(\varphi\varphi')^2 - (\varphi')^2 + q\varphi^2 + \frac{p}{2}\varphi^4]\,dx\,, \qquad (1)$$

где $\varphi(x)$ — параметр порядка; $\varphi'(x) \equiv d\varphi(x)/dx$; L — длина кристалла вдоль оси модуляции OX ; g , q , p — приведенные материальные параметры среды. Предполагаем, что фазовые переходы в системе обусловлены изменением температуры, при этом

$q = q_0(T - T_0)$, где q_0, T_0 — некоторые константы. Отметим, что все величины в (1) являются безразмерными.

Вариационным уравнением для функционала (1) является следующее нелинейное дифференциальное уравнение четвертого порядка:

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

При численном решении вариационных уравнений, описывающих несоразмерные структуры ПП, обычно используют либо метод конечных разностей (см., например, [7]), либо метод усеченного ряда Фурье, когда периодическое распределение ПП $\varphi(x)$ представляется в виде гармонического ряда с конечным числом слагаемых, волновое число b и коэффициенты разложения которого изначально предполагаются неизвестными [8-9].

Практическое использование указанных методов показало, что, по-видимому, метод конечных разностей дает более надежные результаты, поскольку, например, для систем с двухкомпонентным ПП предсказывает, что переходы из несоразмерной фазы в соразмерную могут быть переходами как первого, так и второго рода [6,7]. В то же время метод ряда Фурье всегда предсказывает переходы второго рода [6,8], что противоречит экспериментальным данным [5].

В данной работе вариационная задача (1)-(2) поиска равновесных распределений ПП $\varphi(x)$ решалась в три этапа. На первом этапе разностным методом Рунге-Кутта 4-го порядка [10] находилось решение уравнения (2), соответствующее некоторому набору начальных условий $S_0 = \{\varphi(0),\ \varphi'(0),\ \varphi''(0),\ \varphi'''(0)\}$. Далее для найденного решения вычислялось значение ТП (1). На заключительной стадии определялся абсолютный минимум потенциала (1) на совокупности условий S_0.

Исследование производилось для различных значений материальных параметров. При этом параметр p всегда полагался равным единице, что при изучении свойств несоразмерного состояния не является существенным ограничением общности [6,9,11]. Параметр g предполагался отрицательным [1-4,9]. При заданном значении параметра g эффективная температура q изменялась в пределах от $q_I = 1/4$ (точки, в которой неупорядоченная фаза $\varphi \equiv 0$ теряет устойчивость и переходит в несоразмерное состояние) и до температур, при которых становится энергетически предпочтительной соразмерная фаза $\varphi = \pm\varphi_0 = const(x)$ [4].

Для системы (1) распределение ПП в несоразмерной фазе не должно зависеть от выбора направления оси пространственной модуляции ПП OX и от выбора направления оси OY, вдоль которой происходит упорядочение. Кроме того, физически эквивалентными являются распределения, отличающиеся только значением фазы x_0 (ТП инвариантен относительно сдвига фазы — свойство "скольжения" [6,12]). Мы также полагаем, что функция $\varphi(x)$ является гладкой периодической функцией. Следствием отмеченных свойств является то, что всегда можно выбрать такую систему координат, в которой решения, описывающие распределение ПП в несоразмерной фазе, являются четными или нечетными функциями пространственной координаты и, кроме того, смещением на четверть периода четность этих решений изменяется на противоположную.

Такая "четно-нечетная" симметрия [13] позволяет занулить при численном решении задачи два из четырех начальных условий (т.е. рассматривать только наборы $S_{01} = \{0.0,\ \varphi'(0),\ 0.0,\ \varphi'''(0)\}$ или $S_{02} = \{\varphi(0),\ 0.0,\ \varphi''(0),\ 0.0\}$). В то же время при исследовании периодических распределений в несоразмерной фазе использование наборов S_{01} и S_{02} должно приводить к физически эквивалентным состояниям. Однако пространственно-однородное распределение ПП в соразмерной фазе может быть получено только для набора S_{02}. Последнее обстоятельство делает использование S_{02} предпочти-

Таблица. **Результаты численного иследования несоразмерной фазы, $g = -10$, $p = 1$.**

Эффе к ивная мпе-ура q	Термоди-намичес-кий потенциал, модель (3)	Термоди-намичес-кий потенциал, модель (4)	Термоди-намичес-кий потенциал, численный расчет	φ(0)			φ''(0)		
				мо-дель (3)	мо-дель (4)	числе-нный расчет	модель (3)	модель (4)	числен ный расчет
0.2	-1.952 E-4	-1.962 E-4	-2.010 E-4	0.126	0.126	0.126	0.060	0.059	-0.058
0	-5.240 E-3	-5.409 E-3	-5.401 E-3	0.297	0.298	0.299	0.116	0.097	-0.096
-0.2	-1.877 E-2	-2.086 E-2	-2.110 E-2	0.437	0.457	0.460	0.114	0.031	-0.021

тельным. Сразу отметим, что специально выполненные расчеты подтверждают с точностью до ошибки локализации по начальным условиям высказанное здесь утверждение о физической эквивалентности решений для четных S_{02} и нечетных S_{01} начальных условий.

Потенциал (1) и уравнение (2) обладают также симметрией относительно операции отражения $\varphi \to -\varphi$. Это означает, что если $\varphi(x)$ является решением уравнения (2), то и $\varphi_1(x) = -\varphi(x)$ также есть решение (2). Данное свойство позволяет еще вдвое сократить объем фазового пространства S_0, подлежащего рассмотрению при поиске физически различных распределений ПП.

Как показали расчеты, численная устойчивость решений, соответствующих минимуму ТП, меняется при понижении температуры, т.е. с увеличением амплитуды ПП. Модификации метода интегрирования уравнения (2) (повышение порядка, уменьшение шага) ситуацию не изменяют. Поэтому излагаемые ниже результаты носят отчасти предварительный характер.

В таблице представлены некоторые результаты, полученные при реализации описанной вычислительной процедуры. Приведены также значения ТП, рассчитанные в одногармоническом приближении [9]

$$\varphi(x) = a \cdot \sin[b(x + x_0)] \tag{3}$$

и для распределения

$$\varphi(x) = a \cdot \mathrm{sn}[b(x + x_0), k], \tag{4}$$

полученного в подходе [1-4] ($\mathrm{sn}(x, k)$ — эллиптический синус Якоби).

Как следует из таблицы, модель (4) является хорошим приближением при описании равновесного распределения ПП в несоразмерной фазе, в том числе и в окрестности точки перехода в соразмерную фазу. В частности, равновесное значение $\varphi''(0) \sim a \cdot b^2$, предсказываемое моделью (4), гораздо ближе к численным значениям $\varphi''(0)$, чем величины $\varphi''(0)$, рассчитанные в приближении (3). Это различие носит принципиальный характер и обусловлено различием механизмов изменения волнового числа b, а, следовательно, и периода модуляции $P \sim b^{-1}$ ПП, в подходе (3) [9] и в подходе [1-4]. В модели (3) увеличение периода модуляции $P = 2\pi / b$ при понижении температуры описывается путем учета в ТП нелинейного инварианта ($- g \cdot \varphi'^2 \varphi^2$), $g < 0$, что делает волновое число b зависящим от температуры согласно соотношению

$$b^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{8} g \cdot a^2, \tag{5}$$

где $a = a(T)$ — амплитуда ПП [9].

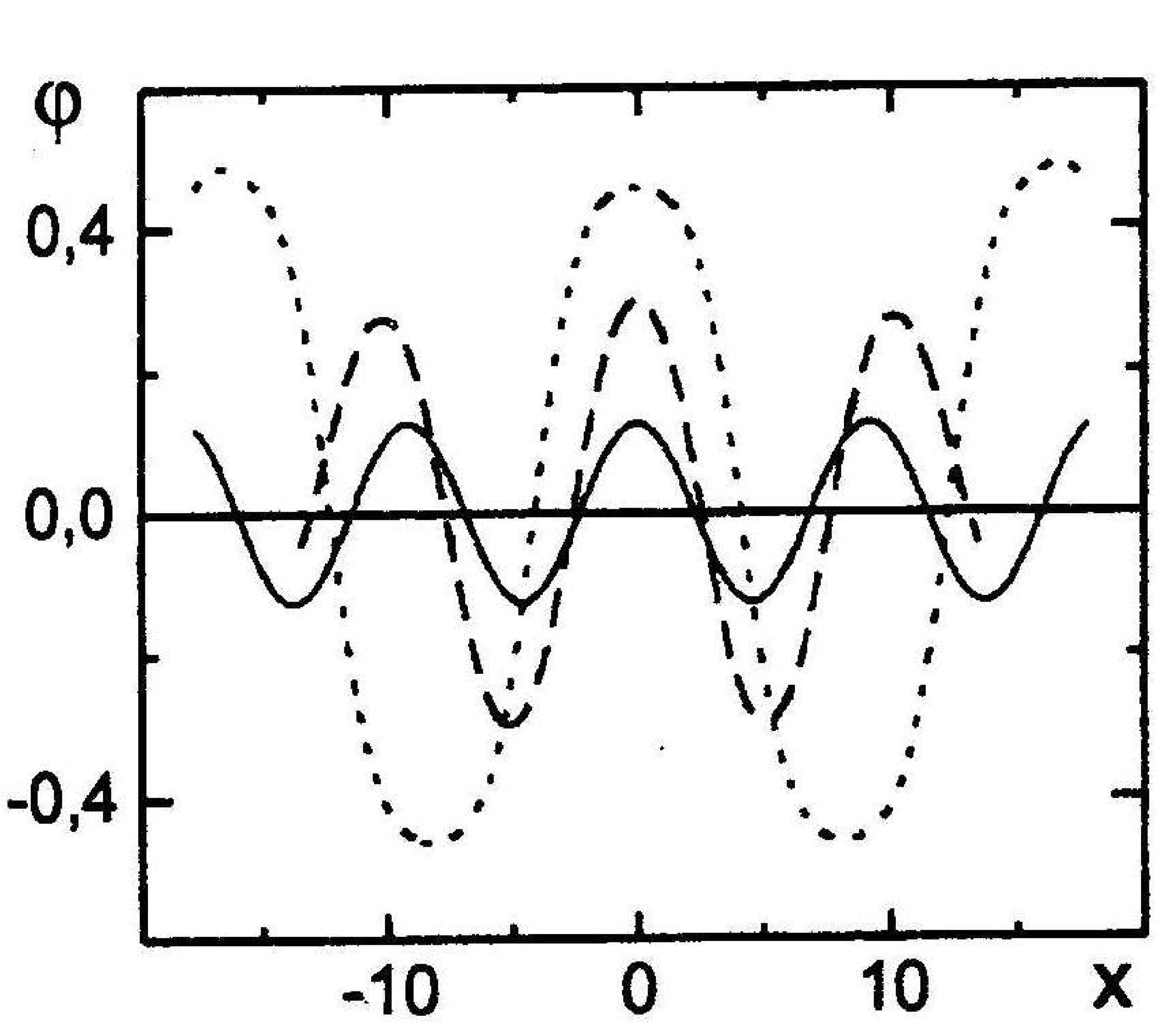
В подходе [1-4] изменение периода модуляции $P = 4K(k)/b$ ($K(k)$ — полный эллиптический интеграл первого рода) обусловлено нелинейными свойствами самого распределения (4) и может иметь место и в отсутствие инварианта $\sim \varphi'^2\varphi^2$ ($g = 0$). Отмеченное свойство распределения (4) расширяет возможности модели (1) при описании пространственно-неоднородных состояний в системах различной природы, характеризующихся разной величиной взаимодействия типа $\sim \varphi'^2\varphi^2$.

На рис. 1 показана зависимость ПП от координаты для трех значений эффективной температуры q: сплошная кривая — $q = 0.2$, штриховая — $q = -0.0$, пунктирная $q = -0.2$ — ($g = -10$). Рис. 1 наглядно демонстрирует основные черты параметрической эволюции рапределения ПП в несоразмерной фазе при понижении температуры, а именно: рост амплитуды ПП, увеличение периода модуляции, повышение роли высших гармоник (структурирование в решетку доменных стенок).

Характерной особенностью изученных численных распределений является то, что в большей части случаев их можно представить как суперпозицию двух колебаний с различными амплитудами и различными периодами (рис. 2, $q = 0.0$, $g = -10$, $\varphi(0) = 0.2215$, $\varphi''(0) = -0.1493$). С математической точки зрения такое поведение понятно. Действительно, характеристическое уравнение для линеаризованного варианта уравнения (2) является биквадратным. Поэтому в общем случае периодическое решение линеаризованного вариационного уравнения имеет вид суммы двух гармонических колебаний с разными волновыми числами b_1, b_2:

$$\varphi(x) = a_1 \cdot \cos[b_1(x + x_{01})] + a_2 \cdot \cos[b_2(x + x_{02})],\ b_{1,2} = \frac{1}{2}\left[1 \pm \sqrt{1 - 4q}\right]. \tag{6}$$

Наличие двух "частот" отчетливо проявляется и вдали от точки q_I, в окрестности которой справедливо линейное приближение для уравнения (2).



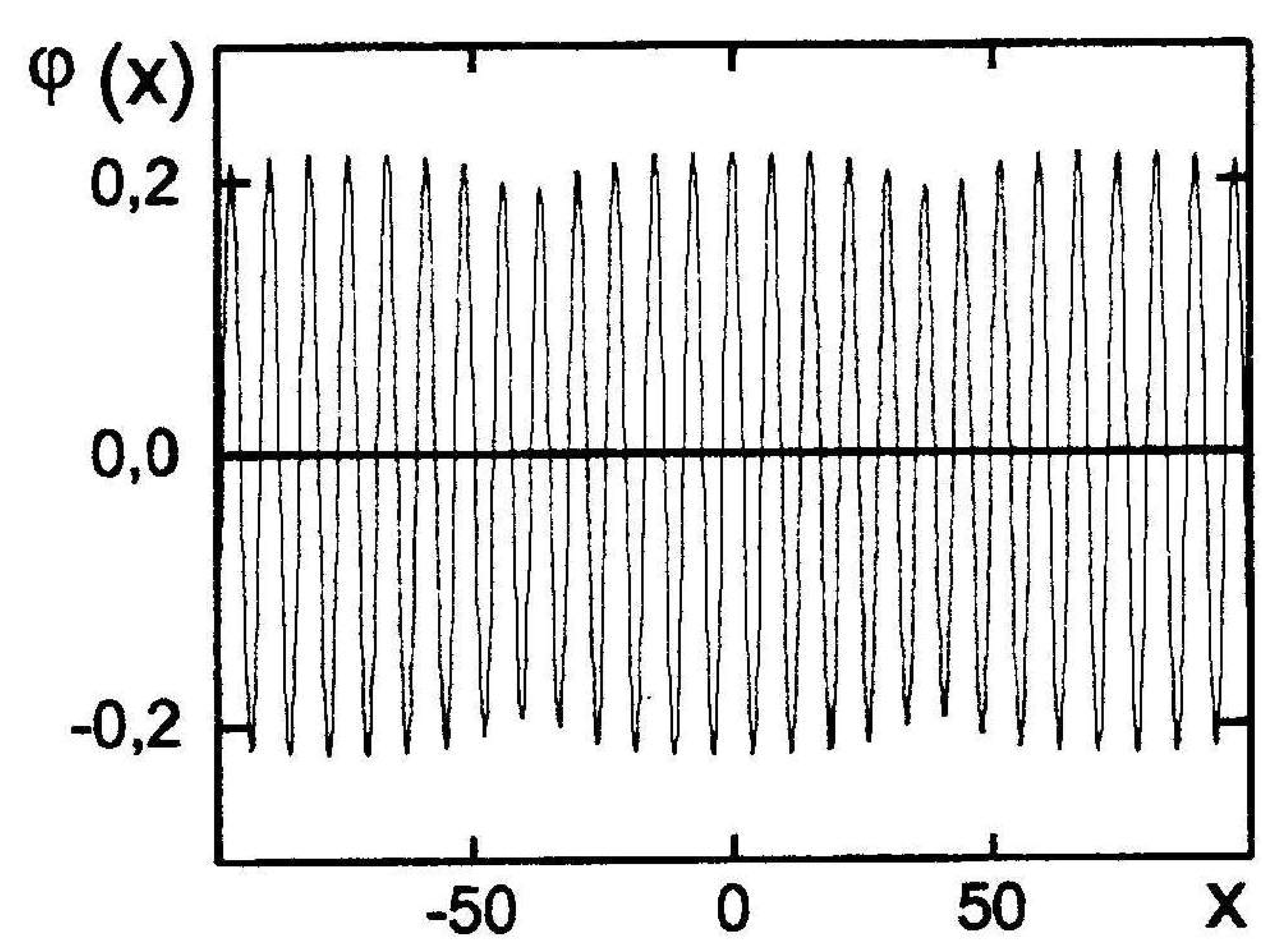


Рис. 1.

Рис. 2.

Вместе с тем, модельные равновесные распределения ПП (3) и (4) представляют собой одну нелинейную волну и могут характеризоваться одним волновым числом. Аналитические исследования и численные расчеты [14] показывают, что учет дополнительных волн с волновыми числами, не удовлетворяющими соотношению $b_2 = (2n + 1) \cdot b_1$, $n = 0,1,2\ldots$, где b_1 — волновое число исходной функции, приводит к увеличению величины ТП.

Таким образом, абсолютному минимуму ТП отвечает решение, имеющее вид одной нелинейной волны (а не суперпозиции двух или более колебаний). Однако, даже для идеального кристалла всегда есть факторы, из-за которых такое одночастотное распределение не реализуется и реально возникают структуры типа изображенных на рис. 2, имеющие большую энергию, чем равновесное распределение. Действительно, в экспериментальных условиях упорядоченное состояние системы достигается обычно в результате закалки системы из однофазного неупорядоченного состояния. При этом система, как правило, оказывается в некотором метастабильном состоянии с замедленными временами релаксации [11,15,16].

Как мы уже отмечали, ТП (1) инвариантен относительно сдвига фазы x_0 распределения ПП $\varphi(x+x_0)$. Такими же свойствами обладает и ПП в высокосимметричной фазе $\varphi(x)\equiv 0$. При переходе из неупорядоченного состояния в несоразмерное состояние фаза x_0 распределения ПП фиксируется: $x_0 = x_{0F}$. Поскольку изменение фазы не требует изменения энергии системы, то спонтанное нарушение непрерывной симметрии ведет к возникновению дополнительной ветви возбуждений — голдстоуновской моды диффузионного типа [12,17]. Эти элементарные возбуждения (фазоны) представляют собой колебания фазы ПП $x_0 = x_{0F} + \Delta x_0(t)$, t — время, и, как правило, передемпферированы [5].

Рассмотренное выше дополнительное пространственное колебание (рис. 2), происходящее на фоне пространственно-периодических волн основного состояния, представляет собой статическое возмущение равновесного распределения ПП и имеет характер периодических структур нетопологических темных солитонов [18]. Отметим, что решения типа представленного на рис. 2 характеризуются большей численной устойчивостью, чем одноволновые решения вблизи минимума ТП.

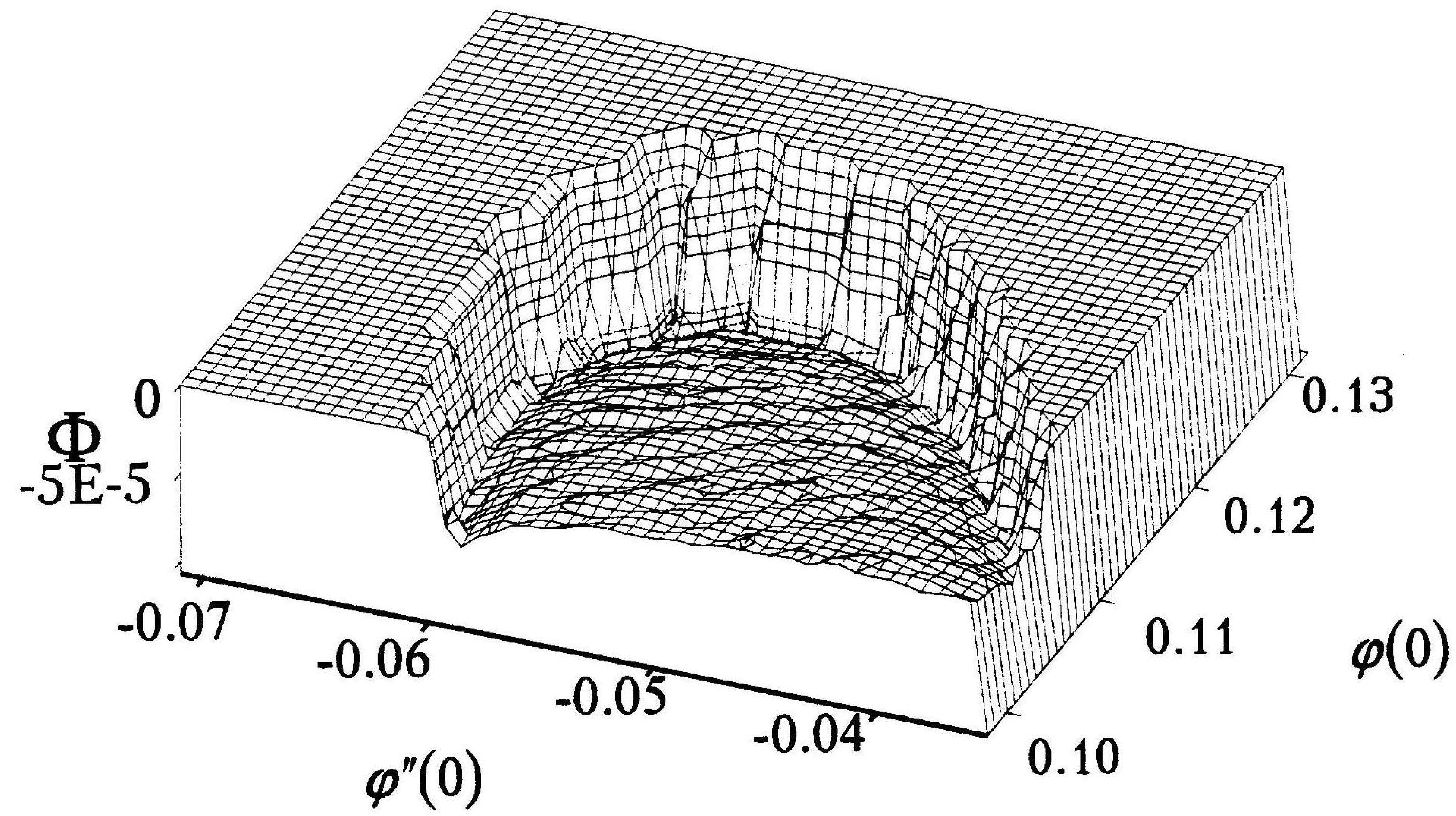


Рис. 3.

Характерная зависимость ТП от начальных условий показана на рисунке 3. На рис. 3 для решений с расходящимися амплитудами значение ТП полагалось равным нулю.

Как видно из рис. 3, в пространстве начальных условий поверхность значений функционала ТП не является уединенной “ямкой”, а имеет линии как резких, так и плавных изменений величины потенциала. Исходя из этого можно предположить, что при выведении системы из положения равновесия она будет релаксировать к статическому состоянию в два этапа. На первом этапе, практически независимо от параметров исходного неравновесного состояния, система относительно быстро перейдет в некоторую (квази)потенциальную долину минимумов. На втором этапе идет относительно медленная релаксация вдоль линии плавного изменения. Такое поведение (эффект “быстрой реки”) является достаточно обычным для нелинейных релаксационных уравнений [19,20]. Заметим, что описание пространственно-неоднородных состояний с помощью модели (1) слабо зависит от микроскопических деталей рассматриваемой системы и носит единообразный характер для сред разной природы (сегнетоэлектрики, магнетики, бинарные сплавы и др.). Поэтому отмеченное релаксационное поведение может рассматриваться как одно из проявлений универсальности фазовых переходов [19,21,22]. Однако детальное рассмотрение данной проблемы требует использования подходов, явно учитывающих кинетические процессы, и выходит за рамки данной статьи.

Таким образом, численное исследование вариационной задачи (1)-(2) показало, что подход [1-4] количественно правильно описывает распределение параметра порядка в несоразмерной фазе, в том числе и вблизи точки перехода в соразмерную фазу. Слабое возмущение равновесного распределения параметра порядка имеет вид периодических структур типа темных солитонов на фоне пространственно-периодических волн основного состояния. Релаксация к равновесному состоянию предположительно должна происходить в два этапа — "быстрый" и "медленный".

Работа выполнена при частичной поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Украины (грант №2.4/691), а также Министерства Украины по делам науки и технологий (стипендия для молодых ученых 235/96).

ЛИТЕРАТУРА

[1] Klepikov V. F., Berezovsky S. V. //Condensed matter physics **8**, 69 (1996).
[2] Klepikov V. F., Olemskoi A. I., Berezovsky S. V. // Металлофизика и новейшие технологии **19**, 32 (1997).
[3] Березовский С.В., Клепиков В.Ф., Корда В.Ю. // УФЖ **42**, 889 (1997).
[4] Berezovsky S.V., Klepikov V.F., Korda V.Yu., Shlyakhov N.A. // Int. J. Mod. Phys. **B12**, 465 (1998).
[5] Cummins H.Z. // Phys. Rep. **185**, 211 (1990).
[6] Толедано Ж.-К., Толедано П. *Теория Ландау фазовых переходов.* М: Мир, (1994), 461 с.
[7] Jacobs A.F., Walkers M.B. // Phys. Rev. **B21**, 4132 (1980).
[8] Shiba H., Ishibashi Y. // J. Phys. Soc. Jpn. **44**, 1592 (1978);
[9] Ishibashi Y., Shiba H. // J. Phys. Soc. Jpn. **45**, 409 (1978).
[10] Арушанян О.Б., Залеткин С.Ф. *Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений на Фортране.* М.: Изд-во МГУ, (1990), 336с.
[11] Olemskoi A.I., Klepikov V.F., Koplyk I.V., Krutko O. B., Khomenko A. V. // Met. Phys. Adv. Tech. **16**, 125 (1996).
[12] Bruce A.D., Cowley R.A. // J. Phys. **C11**, 3609 (1978).
[13] Klepikov V.F. // Sov. Phys. — Low Temp. Phys. **17**, 1166 (1991).
[14] Bruce A.D.,Cowley R.A.,Murrey A.F.// J. Phys. **C11**,3591 (1978).
[15] Олемской А.И., Коплык И.В. // УФН **165**, 1105 (1995).
[16] Олемской А.И., Торопов Е.А. // ФММ **74**, 5 (1991)
[17] Overhauser A.W. // Phys. Rev. **B3**, 3173 (1971).
[18] Косевич А.М., Ковалев А.С. *Введение в нелинейную физическую механику.* Киев: Наук. думка, (1989), 304 с.
[19] Зельцер А.С., Соболева Т.К., Филиппов А.Э. // ЖЭТФ **108**, 356 (1995).
[20] Филиппов А.Э. // ЖЭТФ **108**, 1422 (1995).
[21] Olemskoi A.I., Khomenko A.V., Klepikov V.F. // УФЖ **41**, 756 (1996).
[22] Olemskoi A.I., Khomenko A.V., Klepikov V.F. // УФЖ **41**, 762 (1996).