Расчет характеристик фазовых переходов магнитоупорядоченной системы методом ренормализационной группы

О. Г. Карчев[a], А. М. Савченко[b]

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра квантовой статистики и теории поля. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.
E-mail: [a] kog@taisu.ru, [b] a.m.savchenko@gmail.com

Статья поступила 14.04.2010, подписана в печать 05.06.2010

Исследуется фазовый переход — «схлопывание» магнитных моментов подрешеток в сегнетоантиферромагнетике в сильном магнитном поле. Показано, что флуктуации в данном случае играют существенную роль и определяют характер фазового перехода. Последовательный учет флуктуаций методом ренормализационной группы и ε-разложения приводит к тому, что фазовый переход в сегнетоантиферромагнетике в сильном магнитном поле оказывается фазовым переходом первого рода, близким ко второму, при отличной от нуля релятивисткой константе магнитоэлектрической связи и произвольной диэлектрической проницаемости.

Ключевые слова: фазовый переход, ренормализационная группа, сегнетоантиферромагнетик.
УДК: 538.91. PACS: 73.43.Nq.

В последние годы значительный интерес вызывают исследования фазовых переходов в упорядоченных структурах. Надо отметить, что вблизи фазового перехода флуктуации параметра порядка нельзя считать малыми, они растут с приближением к точке перехода и их необходимо корректно учитывать.

Мы рассмотрим связанные магнитную, сегнетоэлектрическую и упругую подсистемы и покажем, что в «срыве» фазового перехода — превращения фазового перехода второго рода в фазовый переход первого рода, близкий ко второму, релятивистская магнитоэлектрическая связь играет большую роль, чем обменная магнитоупругая энергия [1, 2].

Для исследования поведения веществ в области фазовых переходов вблизи критической точки Уильсоном и Фишером [3–5] был развит аппарат ε-разложения, который на основе метода ренормализационной группы [6–8] успешно применяется для описания фазовых переходов.

Идея метода ренормализационной группы и ε-разложения заключается в сокращенном описании системы, содержащей большое число степеней свободы, т. е. набор исходных микроскопических степеней свободы заменяется на меньший набор эффективных степеней свободы. Основное предположение этого метода заключается в том, что в области фазового перехода поведение физических величин можно описывать только взаимодействием длинноволновых флуктуаций, а следовательно, рассмотрение системы в областях с размером L, много меньшим корреляционной длины r_C, дает правильный размер области, в которой свойства вещества правильно передают свойства всего микроскопического образца. Корреляционная длина определяется состоянием системы $r_C \approx |H - H_C|^{-\nu}$, $\nu > 0$ и если фазовый переход характеризуется некоторой критической точкой, то в области вблизи этой точки корреляционная длина r_C много больше межатомного расстояния, а в самой точке $r_C \to \infty$. В области с размером r_C содержится поэтому большое число степеней свободы и решить задачу прямо не представляется возможным.

В работах [9–11] при рассмотрении магнитной структуры было предложено разбить систему спинов на блоки, сгруппированные из нескольких спинов. Вблизи точки фазового перехода r_C очень велика и все спины в маленьком блоке должны быть сильно скоррелированы, т. е. можно перейти от рассмотрения отдельных спинов к рассмотрению спиновых блоков. Эффективная корреляционная длина, таким образом, уменьшилась: $r_C^{(1)} = \frac{l_0}{l_1} r_C^{(0)}$, где $r_C^{(0)}$ и l_0 — соответственно корреляционная длина и расстояние между спинами в исходной микроскопической системе, l_0 — расстояние между спиновыми блоками после первого «огрубления», $l_j > l_0$.

Повторное применение процедуры группирования соседних блоков приводит к дальнейшему уменьшению эффективной корреляционной длины: $r_C^{(2)} = \frac{l_1}{l_2} r_C^{(1)} = \frac{l_0}{l_2} r_C^{(0)}$, $l_2 > l_1 > l_0$. В конце концов задача сведется к эффективной $r_C \approx 1$, $r_C^{(n)} = \frac{l_0}{l_n} r_C^{(0)}$, $l_n \gg l_0$.

Рассмотрим систему свободных спинов. Переходя к Фурье-представлению, гамильтониан системы свободных спинов можно записать в виде

$$H^{(0)} = \frac{1}{2} \int \frac{d^\alpha \boldsymbol{q}}{(2\pi)^\alpha} (\tau^{(0)} + q^2) \boldsymbol{S}^{(0)}(\boldsymbol{q}) \boldsymbol{S}^{(0)}(-\boldsymbol{q}),$$

где α — размерность пространства, $\tau^{(0)} = 1 - H_C/H$. Область интегрирования здесь $0 \leqslant |\boldsymbol{q}| \leqslant q_0$, q_0 — импульс обрезания $q_0 \approx a^{-1}$. По идее метода ренормализационной группы и ε-разложения спиновые блоки зависят только от длинноволновых спиновых компонент $S(q)$ с малыми q. Разобьем область интегрирования на две: $0 \leqslant |\boldsymbol{q}| \leqslant \lambda q_0$ и $\lambda q_0 \leqslant |\boldsymbol{q}| \leqslant_0$, $\lambda < 1$. Тогда первая область соответствует как раз малым q длинноволновых компонент $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{q})$, а вторая — большим q коротковолновых. По второй области изменения $\boldsymbol{q}$ можно проинтегрировать. Это будет интегрирование быстро флуктуирующих компонент спинового поля $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x})$. Тогда получим

$$H^{(0)} = \frac{1}{2} \int\limits_{0 \leqslant |\boldsymbol{q}| \leqslant \lambda q_0} \frac{d^\alpha \boldsymbol{q}}{(2\pi)^\alpha} (\tau^{(0)} + q^2) \boldsymbol{S}^{(0)}(\boldsymbol{q}) \boldsymbol{S}^{(0)}(-\boldsymbol{q}) \cdot C. \quad (1)$$

Появление в (1) мультипликативной постоянной C, не зависящей от спиновых полей, а зависящей только от температуры, при вычислении флуктуационной свободной энергии можно игнорировать, так как C дает некоторую постоянную свободную энергию. Таким образом, эффективный гамильтониан имеет вид

$$H^{(1)} = \frac{1}{2} \int\limits_{0 \leqslant |\boldsymbol{q}| \leqslant \lambda q_0} \frac{d^\alpha \boldsymbol{q}}{(2\pi)^\alpha} (\tau^{(0)} + q^2) \boldsymbol{S}^{(0)}(\boldsymbol{q}) \boldsymbol{S}^{(0)}(-\boldsymbol{q}). \quad (2)$$

Чтобы получившееся эффективное взаимодействие (2) имело тот же вид, что и исходное, изменим масштаб импульсов. Введем $\boldsymbol{q}' = \lambda^{-1}\boldsymbol{q}$. Тогда $\boldsymbol{q}'$ изменяется в пределах $0 \leqslant |\boldsymbol{q}'| \leqslant \lambda q_0$, т. е. точно так же, как и в исходном гамильтониане. Кроме того, изменим масштаб спинового поля: $\boldsymbol{S}^{(0)}(\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{S}^{(0)}(\lambda \boldsymbol{q}') = \alpha^{-1}\boldsymbol{S}^{(1)}(\boldsymbol{q}')$. Тогда

$$H'^{(1)} = \frac{1}{2}\alpha^{-2}\lambda^{\alpha+2} \int\limits_{0 \leqslant |\boldsymbol{q}| \leqslant \lambda q_0} \frac{d^\alpha \boldsymbol{q}'}{(2\pi)^\alpha} (\tau^{(1)} + q'^2) \boldsymbol{S}^{(1)}(\boldsymbol{q}') \boldsymbol{S}^{(1)}(-\boldsymbol{q}'),$$

где $\tau^{(1)} = \lambda^{-2}\tau^{(0)}$. Чтобы получить гамильтониан, по виду совпадающий с исходным, определим $\alpha = \lambda^{(\alpha+2)/2}$. Окончательно получим

$$H'^{(1)} = \frac{1}{2} \int\limits_{0 \leqslant |\boldsymbol{q}| \leqslant \lambda q_0} \frac{d^\alpha \boldsymbol{q}'}{(2\pi)^\alpha} (\tau^{(1)} + q'^2) \boldsymbol{S}^{(1)}(\boldsymbol{q}') \boldsymbol{S}^{(1)}(-\boldsymbol{q}').$$

Корреляционная длина r_c, соответствующая $H'^{(1)}$, определяется выражением $r_C^{(1)} = 1/\sqrt{\tau^{(1)}} = \lambda 1/\sqrt{\tau^{(0)}} = \lambda r_C^{(0)}$.

Появление такой связи между $r_C^{(1)}$ и $r_C^{(2)}$ есть следствие масштабного преобразования от q к q'.

Преобразование A, переводящее $H^{(0)}$ в $H^{(1)}$, есть преобразование ренормализационной группы. Идея метода ренормализационной группы состоит в итерационном преобразовании A. $AH^{(0)} = H^{(1)}$, $AH^{(1)} = H^{(2)}$, … . При этом $r_C^{(1)} = \lambda r_C^{(0)}$, $r_C^{(2)} = \lambda^2 r_C^{(0)}$, … .

Задача приобретает особый интерес, если у преобразования A существует одна или несколько неподвижных точек. Иначе говоря, если последовательность $H^{(n)}$ сходится к некоторому $H^{(*)}$, то существует неподвижная точка преобразования A, удовлетворяющая условию $AH^{(*)} = H^{(*)}$. Это уравнение есть уравнение для нахождения всех неподвижных точек. Оно практически не зависит от выбора исходного гамильтониана.

Можно показать, что если размерность пространства $d > 4$, $d = 4 - \varepsilon$, то $\tau^* \approx \frac{4}{9}\varepsilon \ln \lambda$, и для небольших ε значение τ^* тоже невелико.

Для сегнетоантиферромагнетика с гамильтонианом

$$H = H_M + H_F + H_U + H_{MF} + H_{MU},$$

$$\begin{aligned} H_M = \int d\boldsymbol{x} \Bigg[& \delta(\boldsymbol{M}^1\boldsymbol{M}^2) + \alpha \frac{\partial \boldsymbol{M}^1}{\partial x_i} \frac{\partial \boldsymbol{M}^2}{\partial x_i} + \\ & + \frac{\alpha'}{2} \left[\left(\frac{\partial \boldsymbol{M}^1}{\partial x_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial \boldsymbol{M}^2}{\partial x_i} \right)^2 \right] + \\ & + \beta M_z^1 M_z^2 + \frac{\beta'}{2}(M_z^{12} + M_z^{22}) - (\boldsymbol{H}_0, \boldsymbol{M}^1 + \boldsymbol{M}^2) \Bigg], \end{aligned}$$

$$H_F = \int d\boldsymbol{x} \left[-\frac{1}{2}xP^2 + \frac{1}{4}xP^4 + \frac{1}{2}s\left(\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial x_i}\right)^2 \right],$$

$$H_U = \frac{1}{2}\int d\boldsymbol{x}\, c_{ii} u_{ii}^2,$$

$$H_{MF} = \int d\boldsymbol{x}\, \gamma_1 P^2 (\boldsymbol{M}^1, \boldsymbol{M}^2),$$

$$H_{MU} = \int d\boldsymbol{x}\, \gamma_{zii} u_{ii} (\boldsymbol{M}^1, \boldsymbol{M}^2).$$

где $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{n}P_0(1 + p)$ — спонтанная поляризация, p — отклонение поляризации от спонтанного значения, обусловленное наличием флуктуаций, аналогично $u_{ii} = u_{ii}^0 + \tilde{u}_{ii}$, u_{ii}^0 — спонтанная деформация, $\tilde{u}_{ii}$ — отклонение деформации от спонтанной, уравнения ренорм-группы имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau}{\partial x} &= \left[2 - \frac{n+2}{n+8}k_n\Gamma_1\right]\tau, \\ \frac{\partial \omega}{\partial x} &= -\frac{1}{2}\frac{n}{n+8}k_n\Gamma_2^2, \\ \frac{\partial c}{\partial x} &= -\frac{3}{2}\frac{n}{n+8}k_n\Gamma_3^2, \\ \frac{\partial \Gamma_1}{\partial x} &= \varepsilon\Gamma_1 - k_n\Gamma_1^2, \\ \frac{\partial \Gamma_2}{\partial x} &= \left[\frac{\varepsilon}{2} - \frac{n+2}{n+8}k_n\Gamma_1\right]\Gamma_2, \\ \frac{\partial \Gamma_3}{\partial x} &= \left[\frac{\varepsilon}{2} - \frac{n+2}{n+8}k_n\Gamma_1\right]\Gamma_3. \end{aligned} \quad (3)$$

С начальными условиями $\tau(0) = \tau_0$, $\omega(0) = \omega_0$, $c(0) = c_0$, $\Gamma_1(0) = \Gamma_{10} - \frac{\Gamma_{20}^2}{\omega_0} - \frac{3\Gamma_{30}^2}{c_0} \equiv \tilde{\Gamma}_{10}$, $\Gamma_2(0) = \Gamma_{20}$, $\Gamma_3(0) = \Gamma_{30}$, где

$$\tau_0 = 1 - \frac{H_C}{H_0}, \quad s_0 = \frac{(\alpha' - \alpha)M_0}{H_0}, \quad \omega_0 = \frac{2\chi P_0^4}{H_0 M_0}, \quad c_{ii}^0 = \frac{c_{ii}}{H_0 M_0},$$

$$\Gamma_{10} = \frac{1}{16}, \quad \Gamma_{20} = -\frac{2\gamma_1 P_0^2 M_0}{H_0}, \quad \Gamma_{30} = -\frac{\gamma_{2ii} M_0}{H_0},$$

решения (3) имеют вид

$$\tau(x) = \tau_0 e^{\left(2 - \frac{4-n}{n+8}\varepsilon\right)x} \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon e^{-\varepsilon x} + k_n\Gamma_{10}(1 - e^{-\varepsilon x})}\right]^{\frac{n+2}{n+8}},$$

$$\begin{aligned} \omega(x) = \omega_0 - & \frac{n\Gamma_{20}^2}{2(4-n)\tilde{\Gamma}_{10}\varepsilon^{\frac{4-n}{n+8}}} \times \\ & \times \left\{ \left[\varepsilon - k_n\tilde{\Gamma}_{10}(1 - e^{\varepsilon x})\right]^{\frac{4-n}{n+8}} - \varepsilon^{\frac{4-n}{n+8}} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c(x) = c_0 - & \frac{3n\Gamma_{30}^2}{2(4-n)\tilde{\Gamma}_{10}\varepsilon^{\frac{4-n}{n+8}}} \times \\ & \times \left\{ \left[\varepsilon - k_n\tilde{\Gamma}_{10}(1 - e^{\varepsilon x})\right]^{\frac{4-n}{n+8}} - \varepsilon^{\frac{4-n}{n+8}} \right\}, \end{aligned}$$

$$\Gamma_1(x) = \frac{\varepsilon\tilde{\Gamma}_{10}}{\varepsilon e^{-\varepsilon x} + k_n\Gamma_{10}(1 - e^{-\varepsilon x})},$$

$$\Gamma_2(x) = \Gamma_{20} e^{\frac{4-n}{2(n+8)}\varepsilon x} \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon e^{-\varepsilon x} + k_n\tilde{\Gamma}_{10}(1 - e^{-\varepsilon x})}\right]^{\frac{n+2}{n+8}},$$

$$\Gamma_3(x) = \Gamma_{30} e^{\frac{4-n}{2(n+8)}\varepsilon x} \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon e^{-\varepsilon x} + k_n\tilde{\Gamma}_{10}(1 - e^{-\varepsilon x})}\right]^{\frac{n+2}{n+8}},$$

$$x = \frac{2}{\varepsilon q_0^{\varepsilon}} \left\{\left(\frac{q_0}{\max[\lambda(\tau), l_0]}\right)^{\varepsilon} - 1\right\}.$$

Фазовый переход в системе будет в том случае, если Γ обратится в нуль и система станет термодинамически неустойчивой. Это произойдет при

$$x^* = \frac{1}{\varepsilon}\ln\left\{1 + \frac{\varepsilon}{k_n\tilde{\Gamma}_{10}}\left\{\left\{\frac{4-n}{2} + \right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left. + \Gamma_{10}\left[\frac{\Gamma_{20}^2}{\omega_0 + \frac{n\Gamma_{20}^2}{2(4-n)}} + \frac{3\Gamma_{30}^2}{c_0 + \frac{3n\Gamma_{30}^2}{2(4-n)\tilde{\Gamma}_{10}}}\right]^{-1}\right\} - 1\right\}^{\frac{n+8}{4-n}}\right\}.$$

В точке фазового перехода параметр порядка претерпевает скачок при $H > H_C^*$, $l_0 = 0$, при $H < H_C^*$, $l_0^2 = \left(\frac{2-\varepsilon}{2+\varepsilon x^*}\right)^{2/\varepsilon}$.

Отсюда следует, что при $\varepsilon \to 0$ величина скачка параметра порядка экспоненциально мала, т. е. фазовый переход происходит в области скейлинга. С ростом ε величина скачка модуля вектора антиферромагнетизма, модуля упругости и частоты мягкой сегнетоэлектрической моды возрастает. Это свидетельствует об усилении влияния флуктуаций на фазовый переход с понижением размерности пространства. Характер фазового перехода остается неизменным — фазовый переход будет фазовым переходом первого рода, близким ко второму.

Список литературы

1. *Чупис И.Е.* // ФНТ. 1975. **1**. С. 183.
2. *Савченко М.А., Стефанович А.В.* // Физика металлов и металловедение. 1978. **45**. С. 926.
3. *Wilson K.G.* // Phys. Rev. B. 1971. **4**. P. 3174.
4. *Wilson K.G., Fisher M.E.* // Phys. Rev. Lett. 1972. **28**. P. 240.
5. *Wilson K.G., Kogut P.* // Phys. Rev. C. 1974. **12**. P. 75.
6. *Gell-Mann M., Low F.E.* // Phys. Rev. 1954. **95**. P. 1300.
7. *Ларкин А.И., Хмельницкий Д.Е.* // ЖЭТФ. 1969. **56**. С. 2087.
8. *Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В.* // Введение в теорию квантованных полей. М., 1976.
9. *Kadanoff L.P.* // Physics. 1966. **2**. P. 263.
10. *Михеенков А.В., Барабанов А.Ф.* // ЖЭТФ. 2007. **132**. С. 392.
11. *Барабанов А.Ф., Максимов Л.А.* // Письма в ЖЭТФ. 2008. **87** С. 433.

Calculation of phase transition characteristics of magnetically ordered system by renormalization group method

O. G. Karchev[a], **A. M. Savchenko**[b]

Department of Quantum Statistics and Field Theory, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

E-mail: [a]*kog@taisu.ru,* [b]*a.m.savchenko@gmail.com.*

The phase transition — «collapse» of magnetic moments of sublattices in segnetoantiferromagnetics in the strong magnetic field is under consideration. It is shown, that spin fluctuations play an essential role and determine characteristics of the phase transition. The consecutive account of spin fluctuations by renormalization group method and ε-expansion leads to the result that the phase transition in segnetoantiferromagnetics in the strong magnetic field occurs to be phase transition of the first order close to the second one.

Keywords: phase transition, renormalization group, segnetoantiferromagnetic.
PACS: 73.43.Nq.
Received 14 April 2010.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 6(2010).

Сведения об авторах

1. Карчев Олег Геннадьевич — аспирант; тел.: (495) 932-80-10, e-mail: kog@taisu.ru.
2. Савченко Александр Максимович — докт. физ.-мат. наук, доцент, ст. преподаватель; тел.: (495) 932-80-10, e-mail: a.m.savchenko@gmail.com.