ЖЭТФ, 2007, том 132, вып. 1 (7), стр. 40–44

НЕОДНОРОДНЫЕ УПОРЯДОЧЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ И ТРАНСЛЯЦИОННАЯ ПРИРОДА КАЛИБРОВОЧНОЙ ГРУППЫ В КОНТИНУАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ЛАНДАУ I. ОБЩЕЕ РАССМОТРЕНИЕ

А. Я. Брагинский [*]

НИИ физики Ростовского государственного университета
344090, Ростов-на-Дону, Россия

Показано, что континуальная феноменологическая теория фазовых переходов в глобально неоднородное состояние с необходимостью должна учитывать компенсирующие поля, являющиеся потенциалом поля напряжений, обусловленные дислокациями, возникающими на стыке локально однородных областей. Компенсирующие поля в теории являются следствием требования трансляционной инвариантности потенциала Ландау относительно операций трансляции и входят в теорию через удлиненные производные локально однородных параметров порядка по макроскопическим координатам локально однородных областей кристалла. Удлинение производных приводит к тому, что теория фазовых переходов в неоднородное состояние с необходимостью включает теорию упругости, в которой потенциал поля напряжений дислокаций, индуцированных фазовым переходом, пропорционален величине компенсирующего поля. Уравнение Кренера, описывающее состояние дислокаций, индуцированных пространственно-неоднородным упорядочением, в такой теории является следствием минимизации потенциала Ландау по отношению к компенсирующим полям.

PACS: 61.50.Ks

1. ВВЕДЕНИЕ. НЕОДНОРОДНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Многие твердые растворы и даже конгруэнтно плавящиеся соединения при изменении внешних условий претерпевают фазовые переходы в пространственно-неоднородные состояния. К таким веществам относятся упорядочивающиеся сплавы типа ($Cu_{1-x}Au_x$); диэлектрики, упорядочивающиеся в состояния, не соответствующие стехиометрии начального состава ($PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$); жидкие кристаллы в поле внешних напряжений; сверхпроводники второго рода в магнитном поле; квазикристаллы в поле внешних напряжений и т. п. Так, в упорядочивающихся сплавах типа $Cu_{1-x}Au_x$ вблизи $x = 0.5$ проявляется фаза CuAu(II). В одном образце CuAu(II) при одних и тех же фиксированных температуре и давлении наблюдаются упорядоченные состояния с разной мультипликацией примитивной ячейки неупорядоченной фазы. Проявление различных периодов упорядоченных фаз в дифракционных экспериментах возможно только тогда, когда участки кристалла, характеризующиеся разными периодами, пространственно разделены и имеют достаточно большие размеры, чтобы была возможна дифракция на доменах кристалла с постоянным периодом. Именно такие пространственно-неоднородные состояния составляют предмет нашего обсуждения.

Первое теоретическое оправдание возможности существования неоднородных упорядоченных фаз было дано Лифшицем [1] в рамках теории фазовых переходов Ландау. В [1] указывалось, что при определенных симметриях многокомпонентного параметра порядка (ПП) $\boldsymbol{\eta}(\eta_1 \ldots \eta_m) \equiv \{\eta_i\}_m$ уравнения состояния, полученные путем минимизации функционала Ландау $(\boldsymbol{\eta}, \partial\boldsymbol{\eta}/\partial\mathbf{x})$, зависящего от компонент ПП и их пространственных производных по макроскопическим координатам, могут иметь неоднородные решения. В работе Дзялошинского [2] впервые была рассмотрена модель перехода, в которой векторы $\mathbf{k}_l$, характеризующие первую гармонику в разложении $\eta_l(\mathbf{x})$ в ряд Фурье, изменялись

[*] E-mail: a.braginsky@mail.ru

в зависимости от внешних условий, оставаясь в области зоны Бриллюэна, имеющей постоянную симметрию, а ПП характеризовался одним и тем же малым представлением звезды вектора $\mathbf{k}_l$. Последнее предположение сохранится и в нашем рассмотрении. Фактически Дзялошинский [2] пытался найти для величины ПП точное периодическое решение уравнений состояния в виде

$$\eta_l = r_l \sin(q_l x), \tag{1}$$

пригодное для описания длиннопериодических геликоидальных структур. Однако для анизотропных потенциалов точные решения в виде (1) получены не были. Очевидно, что приближенные решения, полученные в работе [2], не могут быть использованы для симметрийной классификации низкосимметричного состояния, так как симметрия — понятие точное, а разложение произвольной непрерывной функции $\eta_l = \eta_l(\mathbf{x})$ имеет бесконечное число несоразмерных гармоник и, следовательно, симметрия функции может не совпадать с симметрией первой гармоники. Более того, в работе [3] было доказано, что геликоидальные решения уравнений состояния вида (1) не имеют области стабильности на фазовой диаграмме, и в окрестности фазового перехода второго рода стабильны существенно-неоднородные решения, которые нельзя интерпретировать как длиннопериодические фазы.

В теории Ландау изначально предполагается, что ПП преобразуется по некоторому неприводимому представлению пространственной группы и, следовательно, трансформационные свойства компонент ПП под действием операций трансляций на целое число периодов решетки $(E/\mathbf{a})$ определяются лучами одной звезды вектора $\mathbf{k}_l$. Если вектор $\mathbf{k}_l$, определяющий звезду неприводимого представления, оканчивается не в точке зоны Бриллюэна с выделенной симметрией, то число компонент ПП четное. Это позволяет записать компоненты ПП в комплексном виде, причем так, что каждая из компонент ПП является собственной функцией оператора трансляций:

$$(E/\mathbf{a})\eta_l = \exp(i\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{a}) \cdot \eta_l. \tag{2}$$

Введем понятие локальности в феноменологической теории Ландау [4]. Будем считать, что $\mathbf{x}$ нумерует макроскопически малый объем с достаточно большим числом ячеек, в котором возможно существование равновесного состояния. В этом объеме физическое состояние с достаточной точностью определяется ПП с фиксированным значением вектора $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$. В континуальном приближении такой объем будем считать физической точкой. Предположим, что при переходе от одной физической точки к другой может изменяться не только величина ПП, но и вектор $\mathbf{k}^l = \mathbf{k}^l(\mathbf{x})$.

В работе [5] был рассмотрен случай ПП, который описывает локальное распределение плотности $\delta\rho(\mathbf{x})$ с вектором $\mathbf{k} = \mathbf{k}(\mathbf{x})$, заканчивающимся в точке зоны Бриллюэна, не имеющей выделенной симметрии, т. е. предполагалось, что локально, в каждой точке $\mathbf{x}$, можно построить однородный потенциал Ландау, который описывает фазовый переход в макроскопически малом объеме с координатой $\mathbf{x}$. Другая ситуация реализуется в деформированном смектике A(SmA) [6, 7]. Согласно работам [6, 7] ПП, определяющий распределение плотности в SmA, характеризуется вектором $\mathbf{k}(\mathbf{x}) = 2\pi\mathbf{n}(\mathbf{x})/d$ (в работах [6, 7] полагалось, что $d = \text{const}$). Для нас существенно, что де Жен впервые ввел представление о локальных трансформационных свойствах ПП по отношению к оператору трансляций[1)].

Локальный потенциал Ландау также был использован в известной модели Гинзбурга – Ландау. Обоснование для его введения было заимствовано из теории поля, но, по сути, также подразумевалась локальная однородность в каждом физически малом объеме.

2. ЛОКАЛЬНАЯ ТРАНСЛЯЦИОННАЯ СИММЕТРИЯ И КОМПЕНСИРУЮЩИЕ ПОЛЯ

Чтобы формализовать подход положим:

1) трансформационные свойства ПП определены, согласно уравнению (2) в макроскопически малом объеме, характеризующемся координатой $\mathbf{x}$;

2) такой макроскопически малый объем будем считать материальной точкой;

3) оператор $(E|\mathbf{a})$ на $\mathbf{x}$ не действует, т. е. под действием оператора $(E|\mathbf{a})$ объем с координатой $\mathbf{x}$ переходит сам в себя: $(E|\mathbf{a})(d\mathbf{x}) = d\mathbf{x}$;

4) величина компонент ПП η_l и волновой вектор $\mathbf{k}_l$ могут непрерывно меняться вместе с $\mathbf{x}$. Мы получим модель с локальной трансляционной симметрией, где в каждом физически малом объеме, характеризующемся координатой $\mathbf{x}$, $\eta_l(\mathbf{x})$ преобразуется

1) Как известно, де Жен пытался ввести в теорию калибровочные поля, пропорциональные вариации $\delta\mathbf{n}(x)$ [6, 7]. Это положение [6, 7] подверглось серьезной критике [8–10]. Однако и в [6, 7], и в [8–10] упругая энергия SmA записывалась не как функция поля напряжений [11, 12], а в виде модифицированной энергии Франка для нематиков [12]. Положение было исправлено в [13].

по некоторому неприводимому представлению подгруппы трансляций, согласно формуле (2) с $\mathbf{k}_l(\mathbf{x})$.

В такой модели градиенты $\partial\eta_l/\partial x_l$ не являются собственными функциями оператора трансляции [14, 15]:

$$(E|\mathbf{a}_p)\frac{\partial\eta_l}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\exp\{2\pi i\mu_p^l(\mathbf{x})\}\eta_l(\mathbf{x})\right) = \\ = \exp\{2\pi i\mu_p^l(\mathbf{x})\}\left[2\pi i\frac{\partial\mu_p^l(\mathbf{x})}{\partial x_j}\eta_l(\mathbf{x}) + \frac{\partial\eta_l(\mathbf{x})}{\partial x_j}\right], \quad (3)$$

где $\mu_p^l(\mathbf{x})$ — координаты компонент векторов $\mathbf{k}_l$ в обратном пространстве.

Для того чтобы градиент ПП был собственной функцией оператора трансляции, удлиним производные путем введения звезды компенсирующих тензорных полей $A_{pj}^l(\mathbf{x})$, которые компенсируют изменение координат волновых векторов $\mu_p^l(\mathbf{x})$ так, что

$$(E|\mathbf{a}_p)D_j^l\eta_l = e^{2\pi i\mu_p^l}D_j^l\eta_l, \quad (4)$$

где

$$D_j^l\eta_l = \left(\frac{\partial}{\partial x_j} - i\gamma\sum_p A_{pj}^l\right)\eta_l \quad (5)$$

и

$$(E|\mathbf{a}_q)(\gamma A_{pj}^l) = \gamma A_{pj}^l + 2\pi\delta_{pq}\frac{\partial\mu_p^l}{\partial x_j}. \quad (6)$$

В формулах (5), (6) γ — псевдоскалярный феноменологический заряд — постоянный размерный множитель, характеризующий взаимодействие компенсирующего поля и ПП. Диагонализация представления ПП и его градиентов по отношению к подгруппе трансляций необходима для построения инвариантов неравновесного функционала Ландау (см. ниже выражение (8)).

В случае сохранения локальной точечной симметрии, когда в каждом макроскопически малом объеме состояние характеризуется одним и тем же ПП, т. е. одним и тем же неприводимым представлением (НП) с фиксированной звездой $\{\mathbf{k}^l\}$, звезда полей $A_{pj}^l(\mathbf{x})$, компенсирующих компоненты $\mu_p^l(\mathbf{x})$ волновых векторов $\mathbf{k}^l(x)$, может быть выражена через один тензор второго ранга $A_{pj}(\mathbf{x})$.

Поскольку все векторы в звезде могут быть получены из одного вектора $\mathbf{k}^l$, принадлежащего $\{\mathbf{k}^l\}$, и компоненты тензора звезды связностей A_{pj}^l могут быть получены из одного тензора $A_{pj}(\mathbf{x})$. Действительно, если тензор $A_{pj}(\mathbf{x})$ компенсирует $\partial\mu_p(x)/\partial x_j$, то при повороте g_{pq}^l тензор $A_{pi}^l = g_{pq}^l g_{ij}^l A_{qj}$ компенсирует изменения $\mu_p^l = g_{pq}^l\mu_q$.

Единый тензор $A_{pj}(\mathbf{x})$ можно также ввести и как тензор, компенсирующий изменение базисных векторов $\mathbf{e}_p(\mathbf{x})$ обратного пространства, тогда сами координаты векторов μ_p^l можно считать не зависящими от $\mathbf{x}$.

3. УРАВНЕНИЯ КРЕНЕРА И ТЕОРИЯ УПРУГОСТИ

Функционал Ландау Φ по определению является функцией обобщенных координат, характеризующих состояние системы, причем Φ инвариантен относительно преобразований группы симметрии высокосимметричной фазы G_0. Обобщенными координатами системы в рассматриваемом случае являются компоненты ПП (η_l), компенсирующие поля и их пространственные производные, определенные для ПП согласно формулам (4)–(6). В G_0 всегда можно выделить абелеву подгруппу трансляций: $G_0 \equiv T \times K$ [4]. Поэтому инварианты G_0, составленные из обобщенных координат, являются функциями инвариантов подгруппы трансляций T [16]. Заметим, что из пространственных производных $A_{pj}(x)$ можно составить линейные комбинации, инвариантные относительно операций трансляции:

$$\sigma_{pj} = e_{jki}(\partial A_{pi}/\partial x_k). \quad (7)$$

Здесь e_{jki} — полностью антисимметричный тензор.

Подчеркнем, что ПП $\eta_l(\mathbf{x})$ и соответствующее компенсирующее поле $A_{pj}(\mathbf{x})$ симметрийно обусловлено взаимодействуют через удлиненные производные (5) (минимальное взаимодействие по [14]), а плотность потенциала Ландау $\varphi(\mathbf{x})$ — функция инвариантов группы T:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \varphi(\eta_l\eta_l^*, D_j^l\eta_l D_j^l\eta_l^*(x), \sigma_{pi}(x)). \quad (8)$$

Варьируя $\Phi(\mathbf{x})$ по $\eta_l(\mathbf{x})$ и $A_{pj}(\mathbf{x})$, получим систему уравнений состояния

$$\delta\Phi/\delta\eta_l = 0, \quad \delta\Phi/\delta\eta_l^* = 0, \quad (9а)$$

$$\delta\Phi/\delta A_{pj} = 0. \quad (9б)$$

Учитывая (7), (8), вторая пара уравнений (9) имеет вид

$$\frac{\delta\Phi}{\delta A_{pj}} = \frac{\partial\Phi}{\partial A_{pj}} - e_{jki}\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\sigma_{pi}}\right) = 0. \quad (10)$$

Если в соседних макрообластях разный период, то там, соответственно, и разное число ячеек. На границе этих макрообъемов, очевидно, возникнут несовместности в виде дислокаций. На аналогию при описании явлений магнитостатики и континуальной теории стационарных дислокаций впервые указал Кренер [11]. Предположим, что инварианты (7) $\sigma_{pi}(\mathbf{x})$ соответствуют тензору напряжений, а $A_{pj}(\mathbf{x})$ — потенциалу поля напряжений, и покажем, что такое определение не противоречит стандартной теории упругости[2)]. Согласно сделанному предположению, переменная, сопряженная $\sigma_{pi}(\mathbf{x})$ в (10), — это тензор упругой дисторсии:

$$w_{pi} = \partial\Phi/\partial\sigma_{pi}. \tag{11}$$

Тогда, в соответствии с общими представлениями, переменная, сопряженная $A_{pj}(\mathbf{x})$, — это плотность дислокаций:

$$\rho_{pj} = \partial\Phi/\partial A_{pj}. \tag{12}$$

Подставляя (11) и (12) в уравнение состояния (10), мы получаем основное уравнение континуальной теории дислокаций [12]:

$$\rho_{pi} = e_{ikj}\partial w_{pj}/\partial x_k. \tag{13}$$

В своей теории Кренер не использовал симметрию кристалла и не описывал состояние параметром порядка. Поэтому он подбирал потенциал тензора напряжений в виде

$$\sigma_{pi} = e_{pmn}e_{ikj}\partial^2 A^K_{nj}/\partial x_m\partial x_k \tag{14}$$

для получения пары уравнений, аналогичных уравнениям Максвелла:

$$\partial\sigma_{pi}/\partial x_i = 0. \tag{15}$$

Уравнения (13), (15) и составляют эту пару, причем (15) есть условие равновесия.

В нашей модели уравнение (15) есть следствие определения тензора напряжений как инвариантных комбинаций, составленных из градиентов компенсирующего поля (7), а (13) есть результат минимизации Φ, т. е. представляет собой уравнения состояния.

Введенный нами потенциал поля напряжений можно связать с потенциалом Кренера $A^K_{pj}(\mathbf{x})$ соотношением $A_{pj}(\mathbf{x}) = e_{pmn}\partial A^K_{nj}/\partial x_m$. Как известно [1, 12], в континуальной теории дислокаций тензор напряжений и тензор упругой дисторсии не являются симметричными тензорами. Определение (14), которое ввел Кренер для перехода к симметризованной записи тензора напряжений, не является необходимым условием для получения уравнений, аналогичных уравнениям Максвелла. Мы пришли к уравнениям (13) и (15) из конструктивного построения инвариантного потенциала Ландау для состояний с локальной трансляционной симметрией и можем сделать важный вывод, что введенное нами компенсирующее поле ПП $A_{pj}(\mathbf{x})$, определенное с точностью до градиента по второму индексу (6), соответствует потенциалу поля напряжений (7).

Покажем, что построенный нами локальный потенциал Ландау (8) в отсутствии ПП — функция тензора напряжений $\sigma_{pi}(\mathbf{x})$ и соответствует стандартной теории упругости. Решение системы уравнений (9) для потенциала (8) при условии

$$\eta_l(\mathbf{x}) = 0, \quad \tilde{\eta}_l(\mathbf{x}) = 0 \tag{16}$$

соответствует состоянию без индуцированных фазовым переходом дислокаций. Поскольку $\Phi(\mathbf{x})$ зависит от $A_{pj}(\mathbf{x})$ только в сумме с пространственными производными $D^l_j\eta_l(\mathbf{x})$ и $D^{l*}_j\eta^*_l(\mathbf{x})$, из (8), (12) и (16) следует, что $\rho_{pi}(\mathbf{x}) = 0$. В этом случае система уравнений состояния (9б), согласно (13), имеет вид

$$e_{ikj}\partial w_{pj}/\partial x_k = 0. \tag{17}$$

Уравнения (17) для тензора упругой дисторсии означают, что его можно представить в виде градиента векторной функции. Обозначим ее $u_p(\mathbf{x})$, тогда очевидное решение уравнений (17)

$$w_{pi} = \partial u_p/\partial x_i \tag{18}$$

приводит к стандартному определению дисторсии через пространственные производные вектора смещений u_p [12]. Векторную функцию $u_p(\mathbf{x})$ можно ассоциировать со смещением, так как в отсутствие дислокаций смещение существует и его можно определить. Покажем, что стандартная формулировка теории упругости, в которой потенциал Ландау является функционалом $u_p(\mathbf{x})$,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \Phi(\partial u_p/\partial x_i), \tag{19}$$

соответствует формулировке теории упругости в терминах компенсирующего поля, которое является потенциалом поля напряжений (7) при условии (16).

Предположим, что нам удалось из системы уравнений (11) выразить тензор напряжений через тензор упругой дисторсии при условии (18) (в (11) $\Phi(\mathbf{x}) = \Phi(\sigma_{pi}(x))$ — функция инвариантов точечной группы тензора $\sigma_{pi}(\mathbf{x})$), тогда

$$\sigma_{pi}(\mathbf{x}) = \sigma_{pi}(\partial u_q/\partial x_j) \tag{20}$$

[2)] В отличие от более ранних работ Кренера, де Вита, Эшлби и др., здесь σ_{pi} зависит от компонент ПП.

и для определения пространственного распределения $u_p(\mathbf{x})$ подставим (20) в уравнение равновесия (15), которое является следствием определения (7)

$$\partial\sigma_{pi}(\partial u_q/\partial x_j)/\partial x_i = 0. \tag{21}$$

Стандартная формулировка теории упругости приводит к этим же уравнениям в результате прямой вариации функционала (19):

$$\frac{\delta\Phi}{\delta u_p} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial(\partial u_p/\partial x_i)}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_i}(\sigma_{pi}) = 0. \tag{22}$$

Таким образом, мы получили две формулировки теории упругости. При первой формулировке варьируемой переменной выступает поле смещений $u_p(\mathbf{x})$. При второй формулировке варьируемая переменная — это потенциал поля напряжений $A_{pj}(\mathbf{x})$. В отличие от стандартного подхода [12], при котором (18) является следствием определения тензора упругой дисторсии, в нашем случае (18) — это решение уравнений состояния (9) при условии (16). С другой стороны, уравнения равновесия (15) являются уравнениями состояния для стандартного подхода (22), а не следствием определения (7).

Как известно, в состоянии с дислокациями смещение $u_p(\mathbf{x})$ не является однозначной функцией координат [12], и поэтому Кренер [11] предложил для описания состояний с дислокациями в качестве основной упругой переменной использовать потенциал тензора напряжений (14). Как уже отмечалось выше, используемый нами потенциал поля напряжений отличается от кренеровского потенциала (14). В качестве потенциала поля напряжений мы предложили использовать компенсирующее поле ПП A_{pi}, которое вошло в число варьируемых переменных теории Ландау фазовых переходов в неоднородно упорядоченное состояние из-за требования трансляционной инвариантности потенциала Ландау, а не как следствие определения (7).

Мы показали, что построенный локальный потенциал Ландау (8) содержит упругую энергию и интерпретация $A_{pj}(\mathbf{x})$ как потенциала поля напряжений (7) приводит к основным уравнениям (13), (15) континуальной теории стационарных дислокаций [11, 12], аналогичным уравнениям Максвелла для магнитостатики.

Обратимся к уравнениям состояния (9) в случае, когда ПП не равен нулю. В отличие от уравнений Кренера и Максвелла, где уже заданные плотности дислокаций или тока создают поле внешних напряжений или напряженности, мы получили теоретикополевую модель, где плотность дислокаций, индуцированных фазовым переходом в неоднородное состояние, является функцией локальных состояний, т. е. функцией ПП. Дислокации, являющиеся функциями состояния, правильно называть упругими. Очевидно, что система уравнений (9) должна содержать уравнения, аналогичные уравнениям Лондонов, которые приводят к эффекту экранировки дислокациями внешнего поля напряжений. Этот результат проявляет глубокую аналогию между ρ_{pj} и плотностью тока в модели Гинзбурга–Ландау [17].

Автор признателен Ю. М. Гуфану за плодотворные дискуссии. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 06-05-64938а).

ЛИТЕРАТУРА

1. Е. М. Лифшиц, ЖЭТФ **11**, 255, 269 (1941).
2. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **48**, 1420 (1964).
3. А. Я. Брагинский, ФТТ **32**, 10 (1990).
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1995).
5. А. Я. Брагинский, ФТТ **32**, 2121 (1990).
6. P. G. De Geness, Sol. St. Comm. **10**, 753 (1972).
7. P. G. De Geness, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press., Oxford (1974).
8. B. I. Halperin and T. C. Lubensky, Sol. St. Comm. **14**, 997 (1974).
9. T. C. Lubensky and J.-H. Chen, Phys. Rev. B **17**, 366 (1974).
10. T. C. Lubensky, S. G. Dunn, and J. Isaacson, Phys. Rev. Lett. **47**, 1609 (1981).
11. R. De Wit, Sol. St. Phys. **10**, 249 (1960).
12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, т. 7, Наука, Москва (1987).
13. A. Ya. Braginsky, Phys. Rev. B **67**, 174113 (2003).
14. Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, *Квантовые поля*, Наука, Москва (1980).
15. A. Ya. Braginsky, Phys. Rev. B **66**, 054202 (2002).
16. Ю. М. Гуфан, *Структурные фазовые переходы*, Наука, Москва (1982).
17. В. Л. Гинзбург, Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **20**, 1064 (1950).