

位移型无公度相的场论描述

郭 儒 杨振青

(南开大学物理系)

1983年10月6日收到 1983年12月25日收到修改稿

提 要

在此简讯中,我们用类似力学中处理单摆问题的方法,对一个简单模型导出了无公度相的多谱调制解.它在高温端退化为单谱调制;它在低温端转化为扭折解.它的基波波矢随温度而单调地下降,与实验观察到的现象一致.

近几年来,对多种晶体中的无公度(Incommensurate)相的研究,(其中包括对铁电体中无公度相的研究),十分活跃.铁电体中无公度相的调制结构可以是单谐的^[1],也可以是多谐的,甚至是扭折结构的^[2,3].虽然进行了许多理论工作^[4,5],但还缺乏对三种类型调制结构作统一的描述,也还没有适用于上述三种调制形式的统一波矢公式.众所周知,单摆动力学方程依不同初始条件而有三种类型的解^[6].这三种类型正好与上述无公度相的调制的三种类型相似.这就使我们想到,无公度相的不同类型的调制,必须要从弹性势(对应单摆问题中的动能)的边界条件中去寻找.从这一思想出发,我们果然得到随温度变化相继出现的三种类型调制.

下面,我们以 $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ 的模型为例来阐明理论,其他情况不难作相似处理. $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ 的无公度相的诱导模式是布里渊区 X 点的一个二维不可约表示.锁相波矢 $k_s = \frac{a^*}{2}$, a^* 是倒格基矢.系统的拉氏密度可表为

$$\mathcal{L} = -\frac{c_0^2}{2}(R_x^2 + R^2\phi_x^2) - \frac{\omega^2}{2}R^2 - \frac{g}{4}R^4 + \frac{\lambda^2 m^2}{4}R^2(\cos 2\phi + 1), \quad (1)$$

其中 R 和 ϕ 是位移场极坐标分量,它们是在垂直于 x 轴的平面内. R_x 和 ϕ_x 是它们对于调制方向 x 的导数. λ^2 是各向异性参数, c_0^2 和 g 是与温度无关的常数.

将软模频率平方表为

$$\omega^2(k_s) = m_0^2 \left(\frac{T}{T_l} - 1 \right) + c_0^2 |q_s - k_s|^2, \quad (2)$$

其中 q_s 是软模色散曲线极小值.并令

$$m^2 = m_0^2 \left(1 - \frac{T}{T_l} \right), \quad (3)$$

$$|q_s - k_s|^2 = \delta^2 = \frac{\lambda^2 m_0^2}{c_0^2} \equiv \frac{\lambda^2 m_0^2}{c_0^2} \left(1 - \frac{T_c}{T_l} \right), \quad (4)$$

其中 T_l 和 T_c 各是某个确定温度.可化(1)式为

$$\mathcal{L} = -\frac{c_0^2}{2}(R_x^2 + R^2\phi_x^2) + \frac{m^2}{2}R^2 - \frac{g}{4}R^4 + \frac{\lambda^2 m^2}{2}R^2 \cos^2\phi - \frac{\lambda^2 m_c^2}{2}R^2. \quad (1)$$

由(1)'式可得离子位移经典分布的尤拉方程为

$$c_0^2(R_{xx} - R\phi_x^2) + m^2R - gR^3 + \lambda^2 m^2 R \cos^2\phi - \lambda^2 m_c^2 R = 0, \\ c_0^2(R^2\phi_{xx} + 2RR_x\phi_x) - \frac{\lambda^2 m^2}{2} \sin 2\phi = 0. \quad (5)$$

当 $T > T_i$, $m^2 < 0$, (5)式有平庸解 $R = 0$, 对应顺电相. 当 $T < T_i$, $m^2 > 0$, (1)'式中的单体势发展为双阱势. 势的分布有一个极大、一对极小(双阱)和鞍点, 三者的位置和所在点的势的数值 V_M 、 V_m 、和 V_s 分别为

$$R_M = 0; \quad V_M = 0. \quad (6)$$

$$2\phi_m = 2n\pi, \quad R_m = \frac{m}{\sqrt{g}} \left(1 + \lambda^2 - \frac{m_c^2}{m^2} \lambda^2 \right)^{1/2}; \\ V_m = -\frac{m^4}{4g} \left(1 + \lambda^2 - \frac{m_c^2}{m^2} \lambda^2 \right)^2. \quad (7)$$

$$2\phi_s = (2n+1)\pi, \quad R_s = \frac{m}{\sqrt{g}} \left(1 - \frac{m_c^2}{m^2} \lambda^2 \right)^{1/2}; \\ V_s = -\frac{m^4}{4g} \left(1 - \frac{m_c^2}{m^2} \lambda^2 \right)^2. \quad (8)$$

假定 $\lambda \leq 0.5$, 近似有

$$R \cong \frac{m}{\sqrt{g}}. \quad (9)$$

于是(5)式简化为

$$c_0^2\phi_x^2 - m^2 + gR^2 - \lambda^2 m^2 \cos^2\phi + \lambda^2 m_c^2 = 0; \quad (10-1)$$

$$c_0^2\phi_{xx} - \frac{\lambda^2 m^2}{2} \sin 2\phi = 0. \quad (10-2)$$

将(10-2)式改写为

$$c_0^2\phi_x \frac{\partial}{\partial\phi} \phi_x = -\frac{\lambda^2 m^2}{2} \frac{\partial}{\partial\phi} \cos^2\phi, \quad (11)$$

从鞍点 ϕ_s 到任意 ϕ 积分(11)式并移项, 得到

$$\frac{1}{2} c_0^2\phi_x^2 + \frac{\lambda^2 m^2}{2} \cos^2\phi = \frac{1}{2} c_0^2\phi_{sx}^2 \equiv C. \quad (12)$$

显见 C 是一个大于或等于 0 的与温度无关的常数. 由(12)式可求得: 若 $C = 0$, 则 ϕ 无稳定非平庸实数解, 即不存在调制相; 同理, 若 $C > 0$, 则存在调制相. 因此, C 大于或等于 0 是有无调制相的一种依据. 另外, δ^2 大于或等于 0 也是这样一种依据. 因此, 自然想到将 C 与 δ^2 联系起来. 比较 C 与 (1)'式中 δ^2 项的量纲, 可取

$$\frac{1}{2} c_0^2\phi_{sx}^2 \equiv C = \frac{1}{2} \lambda^2 m_c^2. \quad (13)$$

同时, 引进从鞍点算起的角位移变量

$$\phi' = \phi \pm \frac{\pi}{2}. \quad (14)$$

用(13)和(14)式代入(12)式,得到

$$\phi'_x = \frac{\lambda m_c}{c_0} (1 - \kappa^2 \sin^2 \phi')^{1/2}, \quad (15)$$

其中

$$\kappa^2 = \left(\frac{m}{m_c}\right)^2. \quad (16)$$

(15)式可积分得到

$$\frac{\lambda m_c}{c_0} \chi = F(\phi', \kappa), \quad (17)$$

其中 F 是第一类椭圆积分. 将椭圆积分反演, 得到

$$\sin \phi' = \operatorname{sn} \left(\frac{\lambda m_c}{c_0} \chi \right), \quad (18-1)$$

$$\cos \phi' = \operatorname{cn} \left(\frac{\lambda m_c}{c_0} \chi \right), \quad (18-2)$$

其中 sn 和 cn 分别是椭圆正弦和椭圆余弦. 根据“特殊函数表”, sn 和 cn 可展开为级数, 于是得到

$$\sin \phi' = \sum_{n=1}^{\infty} A_{2n-1} \sin(2n-1)kx, \quad (19-1)$$

$$\cos \phi' = \sum_{n=1}^{\infty} B_{2n-1} \cos(2n-1)kx, \quad (19-2)$$

其中

$$A_{2n-1} = \frac{\pi}{\kappa K(\kappa)} \operatorname{csch} \left[(2n-1) \frac{\pi}{2} \frac{K(\kappa')}{K(\kappa)} \right], \quad (20-1)$$

$$B_{2n-1} = \frac{\pi}{\kappa K(\kappa)} \operatorname{sech} \left[(2n-1) \frac{\pi}{2} \frac{K(\kappa')}{K(\kappa)} \right], \quad (20-2)$$

而

$$k = \frac{\lambda m_c}{c_0} \frac{\pi}{2} \frac{1}{K(\kappa)} \quad (21)$$

是基波波矢. K 是第一类完全椭圆积分, κ' 是 κ 的补模. (19)式即多谐波调制解.

在高温端 $T = T_I$, $m^2 = 0$. 有 $\kappa = 0$, $K(0) = \frac{\pi}{2}$. 于是有

$$A_{2n-1} = B_{2n-1} = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{4}{\kappa} (e^{-K(\kappa')})^{2n-1} = \begin{cases} 1 & \text{当 } n=1, \\ 0 & \text{当 } n>1; \end{cases} \quad (22)$$

$$k = k_I = \frac{\lambda m_c}{c_0} = \delta. \quad (23)$$

因此(19)式退化为单谐波调制. 单谐波调制解也可由以 $\kappa = 0$ 代入(15)式直接得到.

在低温端 $T = T_c$, $m^2 = m_c^2$. 有 $\kappa = 1$, 于是(15)式可积分得到

$$\ln \tan \frac{\phi}{2} = \frac{\lambda m_c}{c_0} x \quad (24)$$

或

$$\phi = 2 \tan^{-1} \exp \left(\frac{\lambda m_c}{c_0} x \right). \quad (24)'$$

同时有 $k = 0$ 且(19)式发散. 将(24)式代入(10-1)式, 得到较(9)式精确的 R 表达式为

$$R \cong \frac{m_c}{\sqrt{g}} [1 - \lambda^2 \sin^2 \phi]. \quad (25)$$

(24)', (25)式即扭折解.

最后, 根据 $K(1) \rightarrow \infty$ 由(21)式可看出, 当温度由 T_i 降到 T_c , k 单调地由 k_i 降到 0. 在宽广区间内, k 只降低几分之一, 只有当趋近 T_c 时, k 才急剧地降到 0, 这些正是实验观察到的调制波矢温度曲线的主要特征^[7-9].

由上可以看出, 软模色散曲线极小值偏离锁相波矢时, 就产生一有限的单体势, 结果使得双阱势阱谷处的弹性势不为 0. 这一非 0 弹性势阻止离子均匀分布于阱谷而导致调制的出现. 双阱势阱深随温度的变化引起阱谷处弹性势与单体势相对消涨, 从而导致调制形式和表征调制特性的基波波矢随温度变化.

参 考 文 献

- [1] Y. Yamada and T. Yamada, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **21**(1966), 2167.
- [2] A. H. Moudden, F. Denoyer, J. P. Benoit and W. Fitzgerald, *Solid State Commu.*, **28**(1978), 575.
- [3] M. Iizumi, J. D. Axe, G. Shirane, K. Shimaoka, *Phys. Rev. B*, **15**(1977), 4392.
- [4] Y. Ishibashi, *Ferroelectrics*, **24**(1980), 119.
- [5] A. D. Bruce, R. A. Cowley and A. F. Murray, *J. Phys. C*, **11**(1978), 3591.
- [6] W. Hauser, *Introduction to the Principles of Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., New York, (1965), p. 129.
- [7] M. Iizumi and K. Gesi, *Solid State Commu.*, **22**(1977), 37.
- [8] K. Gesi and M. Iizumi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **45**(1977), 1777.
- [9] K. Gesi and M. Iizumi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **46**(1977), 697.

FIELD THEORY OF THE DISPLACIVE INCOMMENSURATE PHASE

GUO RU YANG ZHEN-QING

(Department of Physics, Nankai University)

ABSTRACT

In this letter, we derive a multi-harmonic modulation solution of the incommensurate phase of a simple model by a method like that used to solve pendulum problem in mechanics. This solution reduces to single-harmonic modulation at the of high temperature limit and transforms into kink solution at the of low temperature limit. The basic wave-vector decreases monotonously with temperature as observed in experiment.