1994 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 36, № 11
1994 SOLID STATE PHYSICS Vol. 36, N 11

УДК 536.36

ДЛИННОВОЛНОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В ОДНОМЕРНЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ ТИПА ПОРЯДОК–БЕСПОРЯДОК

А.Р.Кессель, С.С.Лапушкин

Предложено использовать представление Швингера для выражения спиновых операторов через операторы вторичного квантования при выводе уравнений движения в длинноволновом приближении в физических системах с обменным взаимодействием. Для сегнетоэлектрика типа порядок–беспорядок в рамках этого подхода получена система нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. Найдено ее точное частичное решение в форме бегущих волн.

Многочастичные задачи квантовой теории твердых тел с гамильтонианом, содержащим обменное взаимодействие, допускают точное описание только в исключительных случаях. Один из распространенных подходов к их приближенному решению состоит в применении длинноволнового приближения и довольно естественного расцепления средних от произведения на произведения средних, которое будет пояснено ниже [1–3]. При этом уравнения движения Гейзенберга для операторов, заданных в узлах кристаллических решеток, переходят в системы нелинейных дифференциальных уравнений (НДУ) в частных производных, многие из которых в одномерном случае обладают солитоноподобными частными решениями [4]. Однако в каждом случае для получения таких решений требуется делать дополнительные приближения, соответствующие специфике задачи.

Ниже показывается, что для сегнетоэлектриков типа порядок–беспорядок, главные члены гамильтониана которых содержат операторы анизотропного обменного взаимодействия, возможен вывод НДУ движения с меньшим количеством допущений.

Это усовершенствование теории основано на использовании представления Швингера [5] для спиновых операторов, которое выражает их через две независимые пары операторов вторичного квантования. Обнаружено, что в микроскопической теории сегнетоэлектричества эти пары операторов имеют фундаментальный физический смысл. Вывод НДУ для сегнетоэлектриков сопровождается ниже нахождением решения в виде бегущих волн, которые, по-видимому, могут послужить основой для микроскопической теории электроакустического эха [6].

1. НДУ для сегнетоэлектриков типа порядок–беспорядок в длинноволновом приближении

К классу сегнетоэлектриков типа порядок–беспорядок относятся кристаллы с водородными связями, положительные ионы водорода (протоны) в которых имеют возможность располагаться в одном из двух минимумов потенциала на каждой связи α в ячейке j. При этом положительный полюс электрического дипольного момента связи (j, α), т.е. ориентация диполя может принимать два направления. Электрические свойства сегнетоэлектриков типа порядок–беспорядок определяются упорядочением электрических диполей ячеек кристалла, причем известно, что дипольные моменты соседних ячеек сильно взаимодействуют.

Пусть $a^+_{j\alpha}$ и $a_{j\alpha}$ есть операторы Бозе рождения и уничтожения протона связи α в ячейке j. Тогда из общих соображений квантовой теории следует, что оператор энергии ориентации электрических диполей при их парном взаимодействии в общем виде имеет форму

$$\mathcal{H} = \sum_{j,\alpha} E_{j\alpha} a^+_{j\alpha} a_{j\alpha} + \sum_{j \neq l} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V^{jl}_{\alpha\beta\gamma\delta} a^+_{j\alpha} a_{j\beta} a^+_{l\gamma} a_{l\delta}. \qquad (1)$$

В случаях, представляющих для нас интерес, константы $E_{j\alpha}$ и $V^{jl}_{\alpha\beta\gamma\delta}$ гамильтониана (1) оказываются такими, что оператор (1) может быть представлен в форме [7]

$$\mathcal{H} = -\sum_{j,\alpha} \left[g_1 S^x_{j\alpha} + g_3 S^z_{j\alpha} \right] - \sum_{j \neq l} \sum_{\alpha,\beta=\uparrow\downarrow} \left[J(j-l) S^z_{j\alpha} S^z_{l\beta} + K(j-l) S^x_{j\alpha} S^x_{l\beta} \right], \qquad (2)$$

где символы $S^\mu_{j\alpha}$ обозначают следующие линейные комбинации введенных выше операторов вторичного квантования:

$$S^x_{j\alpha} = \frac{1}{2} \left(a^+_{j\alpha\uparrow} a_{j\alpha\downarrow} + a^+_{j\alpha\downarrow} a_{j\alpha\uparrow} \right),$$

$$S^y_{j\alpha} = \frac{i}{2} \left(a^+_{j\alpha\uparrow} a_{j\alpha\downarrow} - a^+_{j\alpha\downarrow} a_{j\alpha\uparrow} \right),$$

$$S^z_{j\alpha} = \frac{1}{2} \left(a^+_{j\alpha\uparrow} a_{j\alpha\uparrow} - a^+_{j\alpha\downarrow} a_{j\alpha\downarrow} \right). \qquad (3)$$

Здесь индексы $\alpha^\uparrow$ и $\alpha_\downarrow$ обозначают минимумы потенциала на связи α, сдвинутые в положительном и отрицательном направлениях от центра связи. Существует, кроме того, важное условие

$$\langle a^+_{j\alpha\uparrow} a_{j\alpha\uparrow} + a^+_{j\alpha\downarrow} a_{j\alpha\downarrow} \rangle = 1, \qquad (4)$$

накладываемое на квантовомеханические средние операторов и означающие, что на каждой связи α находится один протон. Константы g_1 и g_3 оператора (2) определяют соответственно интенсивность туннельных переходов между минимумами $\alpha^\uparrow$ и $\alpha_\downarrow$ и взаимодействие диполей с электрическими полями. Обменные интегралы J и K задают статическое взаимодействие электрических дипольных моментов и их взаимодействие в процессе туннелирования, при этом интегралы K и J соответственно существенно меньше и существенно больше всех остальных констант гамильтониана (2).

Операторы $S^{\mu}_{j\alpha}$ (3) обладают спиновыми правилами коммутации

$$[S^{\mu}_{j\alpha}, S^{\nu}_{l\beta}]\ \frac{i}{2}\delta_{jl}\delta_{\alpha\beta}\epsilon_{\mu\nu\varepsilon}S^{\varepsilon}_{j\alpha}, \tag{5}$$

где $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ — полностью антисимметричный тензор третьего порядка с $\epsilon_{123} = 1$. Благодаря этому обстоятельству гамильтониан сегнетоэлектрика (2) имеет форму оператора энергии анизотропного обменного взаимодействия спинов, учитывающего их взаимодействие с магнитным полем.

Определение (3) совпадает с представлением Швингера [6] для спиновых операторов, в котором они обычно выражаются через две независимые бозевские пары операторов, введенные абстрактно. Характерно, что в физике сегнетоэлектриков эти пары операторов имеют четкий физический смысл. Кроме того, исходя из физических условий, на их квантовомеханические средние следует наложить условие нормировки (4).

Рассмотрим случай одномерного обменного взаимодействия диполей ближайших ячеек кристалла. В этом случае удобно ввести упрощающие обозначения

$$\{j,\alpha\} \to j, \quad a^{+}_{j\alpha\uparrow} \to a^{+}_{j}, \quad a_{j\alpha\uparrow} \to a_j, \quad J(j-l) \to J,$$

$$l = j \pm 1, \quad a^{+}_{j\alpha\downarrow} \to b^{+}_{j}, \quad a_{j\alpha\downarrow} \to b_j, \quad K(j-l) \to K.$$

Уравнения движения Гейзенберга для операторов вторичного квантования в этом случае принимают вид

$$\begin{aligned}
i\partial_t a_m &= g_3 a_m + g_1 b_m + J a_m \left(S^z_{m+1} + S^z_{m-1}\right) + K b_m \left(S^x_{m+1} + S^x_{m-1}\right),\\
i\partial_t b_m &= -g_3 b_m + g_1 a_m - J b_m \left(S^z_{m+1} + S^z_{m-1}\right) + K a_m \left(S^x_{m+1} + S^x_{m-1}\right),\\
i\partial_t a^{+}_m &= -g_3 a^{+}_m - g_1 b^{+}_m - J a^{+}_m \left(S^z_{m+1} + S^z_{m-1}\right) - K b^{+}_m \left(S^x_{m+1} + S^x_{m-1}\right),\\
i\partial_t b^{+}_m &= g_3 b^{+}_m - g_1 a^{+}_m + J b^{+}_m \left(S^z_{m+1} + S^z_{m-1}\right) - K a^{+}_m \left(S^x_{m+1} + S^x_{m-1}\right).
\end{aligned} \tag{6}$$

Входящие в правую часть системы уравнений (6) спиновые операторы здесь следует рассматривать как комбинации операторов вторичного квантования, заданные соотношениями (3). Умножим обе части уравнения (6) слева и справа на волновую функцию вакуумного состояния $\langle 0|$ и $|0\rangle$ и примем следующее правило расцепления для последних двух членов уравнения (6) [1–3]:

$$\langle 0|N_p(t)a_k(t)|0\rangle \cong \langle 0|a^{+}_p|0\rangle\langle 0|a_p|0\rangle\langle 0|a_k|0\rangle, \tag{7}$$

после чего получим

$$
\begin{aligned}
i\partial_t A_m &= g_3 A_m + g_1 B_m + J A_m \langle 0|S^z_{m+1} + S^z_{m-1}|0\rangle + K B_m \langle 0|S^x_{m+1} + S^x_{m-1}|0\rangle,\\
i\partial_t B_m &= -g_3 B_m + g_1 A_m - J B_m \langle 0|S^z_{m+1} + S^z_{m-1}|0\rangle + K A_m \langle 0|S^x_{m+1} + S^x_{m-1}|0\rangle,\\
i\partial_t A^*_m &= -g_3 A^*_m - g_1 B^*_m - J A^*_m \langle 0|S^z_{m+1} + S^z_{m-1}|0\rangle - K B^*_m \langle 0|S^x_{m+1} + S^x_{m-1}|0\rangle,\\
i\partial_t B^*_m &= g_3 B^*_m - g_1 A^*_m + J B^*_m \langle 0|S^z_{m+1} + S^z_{m-1}|0\rangle - K A^*_m \langle 0|S^x_{m+1} + S^x_{m-1}|0\rangle,
\end{aligned}
\tag{8}
$$

где

$$\langle 0|a_m(t)|0\rangle \equiv A_m(t),\ \langle 0|b_m(t)|0\rangle \equiv B_m(t),\ \langle 0|a^+_m(t)|0\rangle \equiv A^*_m(t) \text{ и т.д.},$$

$$\langle 0|S^z_m|0\rangle = \frac{1}{2}|A_m|^2 - \frac{1}{2}|B_m|^2 \quad \langle 0|S^z_m|0\rangle = \frac{1}{2}A^*_m B_m + \frac{1}{2}B^*_m A_m.$$

Условие нормировки (4) в терминах введенных матричных элементов есть

$$|A_m(t)|^2 + |B_m(t)|^2 = 1. \tag{9}$$

Легко видеть, что из уравнений (8) вытекает

$$\partial_t|A_m(t)|^2 + \partial_t|B_m(t)|^2 = 0, \tag{10}$$

что согласуется с условием (9).

Перейдем к длинноволновому аналогу уравнения (8), положив $A_n(t) = A(x,t)$, $B_n = B(x,t), \ldots$ и используя разложение [1–3]

$$A_{n\pm 1}(t) \cong A(x,t) \pm \partial_x A(x,t) + \frac{1}{2}\partial_{xx}A(x,t) \pm \ldots, \tag{11}$$

где x — безразмерная (в единицах межатомного расстояния) координата. При этом подразумевается, что $\partial_x A(x,t) \ll A(x,t)$. Тогда уравнения (8) переписываются следующим образом:

$$
\begin{aligned}
i\partial_t A(x,t) = {} & g_3 A(x,t) + g_1 B(x,t) + J A(x,t)\left[1 + \frac{1}{2}\partial_{xx}\right]\left[|A(x,t)|^2 - |B(x,t)|^2\right] + \\
& + K B(x,t)\left[1 + \frac{1}{2}\partial_{xx}\right]\left[A^*(x,t)B(x,t) + B^*(x,t)A(x,t)\right],\\
i\partial_t B(x,t) = {} & -g_3 B(x,t) + g_1 A(x,t) - J B(x,t)\left[1 + \frac{1}{2}\partial_{xx}\right]\left[|A(x,t)|^2 - |B(x,t)|^2\right] + \\
& + K A(x,t)\left[1 + \frac{1}{2}\partial_{xx}\right]\left[A^*(x,t)B(x,t) + B^*(x,t)A(x,t)\right],\\
i\partial_t A^*(x,t) = {} & -g_3 A^*(x,t) - g_1 B^*(x,t) - J A^*(x,t)\left[1 + \frac{1}{2}\partial_{xx}\right]\left[|A(x,t)|^2 - |B(x,t)|^2\right] - \\
& - K B^*(x,t)\left[1 + \frac{1}{2}\partial_{xx}\right]\left[A^*(x,t)B(x,t) + B^*(x,t)A(x,t)\right],
\end{aligned}
$$

$$i\partial_t B^*(x,t) = g_3 B^*(x,t) - g_1 A^*(x,t) + J B^*(x,t)\left[1+\frac{1}{2}\partial_{xx}\right]\left[|A(x,t)|^2 - |B(x,t)|^2\right] -$$

$$-K A^*(x,t)\left[1+\frac{1}{2}\partial_{xx}\right]\left[A^*(x,t)B(x,t) + B^*(x,t)A(x,t)\right]. \tag{12}$$

Условие нормировки в терминах непрерывных функций имеет форму

$$|A(x,t)|^2 + |B(x,t)|^2 = 1. \tag{13}$$

Уравнения (12) вместе с условием (13) составляют искомую систему НДУ в частных производных от матричных элементов операторов вторичного квантования, описывающих в длинноволновом приближении ориентацию электрических дипольных моментов на водородных связях сегнетоэлектрика типа порядок–беспорядок.

2. Одно решение НДУ для сегнетоэлектрика типа порядок–беспорядок

Система уравнений (12) для сегнетоэлектрика является слишком сложной, чтобы допустить полное решение. Как всегда в подобных случаях, удается получить только отдельные частные решения. Одно из таких периодических решений будет получено в этом разделе. В общих чертах оно совпадает с решениями известных уравнений Блоха, успешно применяемых для описания эволюции намагниченности парамагнетика в стационарных и импульсных периодических магнитных полях. Поэтому можно ожидать, что найденное решение окажется применимым для описания электроакустического эха [6] и даст тем самым возможность построения микроскопической теории этого явления.

Используем уравнения (12) для описания эволюции следующих действительных функций:

$$z_1 = \frac{1}{2}[A^*B + B^*A], \quad z_2 = \frac{1}{2}[A^*B - B^*A], \quad z_3 = \frac{1}{2}[|A|^2 - |B|^2], \tag{14}$$

которые фактически являются средними значениями операторов (3) по состояниям $|0\rangle$, записанными с учетом независимости операторов $\{a_j^+, a_j\}$ и $\{b^+, b_j\}$ и условия (7). Уравнениями движения для функций (14) являются

$$\partial_t z_1 = \left[g_3 + J\left(1+\frac{1}{2}\partial_{xx}\right)z_3\right]z_2,$$

$$\partial_t z_2 = -\left[g_3 + J\left(1+\frac{1}{2}\partial_{xx}\right)z_3\right]z_1 + \left[g_1 + K\left(1+\frac{1}{2}\partial_{xx}\right)z_1\right]z_3,$$

$$\partial_t z_3 = -\left[g_1 + K\left(1+\frac{1}{2}\partial_{xx}\right)z_1\right]z_2. \tag{15}$$

Рассмотрим случай бегущих волн: $z_i(x,t) = z_i(\xi)$, $\xi = x - Vt$, $V = \text{const}$ и примем, что

$$J\left(1 + \frac{1}{2}\partial_{xx}\right) z_3 = G_3 J, \qquad K\left(1 + \frac{1}{2}\partial_{xx}\right) z_1 = G_1 K, \tag{16}$$

где G_i — константы, подлежащие определению. Тогда уравнения (15) переходят в

$$z_1' = -az_2, \quad z_2' = az_1 - bz_3, \quad z_3' = bz_2, \tag{17}$$

где

$$z_i' = \partial_\xi z_i, \quad a = (g_3 + JG_3)/V, \quad b = (g_1 + KG_1)/V.$$

Уравнения (17) имеют два первых интеграла: $bz_1 + az_3 = \text{const}$, $z_1^2 + z_2^2 + z_3^2 = z_0^2 = \text{const}$. Можно показать, используя условия нормировки (13), что $z_0 = 1/2$. Решения уравнений (16)

$$\begin{aligned} z_1(\xi) &= C_1 \cos\sqrt{2}\xi + S_1 \sin\sqrt{2}\xi + G_1, \\ z_3(\xi) &= C_3 \cos\sqrt{2}\xi + S_3 \sin\sqrt{2}\xi + G_3 \end{aligned} \tag{18}$$

должны согласовываться с решениями уравнений (17)

$$\begin{aligned} z_1(\xi) &= -\frac{a}{\Omega}(S_2 \cos\Omega\xi - C_2 \sin\Omega\xi) + D_1, \\ z_2(\xi) &= C_2 \cos\Omega\xi + S_2 \sin\Omega\xi, \\ z_3(\xi) &= \frac{b}{\Omega}(s_2 \cos\Omega\xi - C_2 \sin\Omega\xi) + D_3, \end{aligned} \tag{19}$$

где $\Omega^2 = a^2 + b^2$, что связывает константы $G_i = D_i$ и дает единственное нетривиальное условие $\sqrt{2} = \Omega$ или $a^2 + b^2 = 2$. Кроме того, из подстановки решений (19) во второе уравнение системы (17) следует $aD_1 = bD_3$. И наконец, условие нормировки $z_0 = 1/2$ накладывает третье ограничение

$$D_1^2 + D_3^2 + C_2^2 + S_2^2 = \frac{1}{4} \tag{20}$$

на свободные параметры V, D_1, D_3, C_2, S_2 полного решения (19) системы уравнений (17).

Список литературы

[1] Davydov A.S., Kislukha N.I. // Phys. Stat. Sol. 1973. V. 59. N 6. P. 465.

[2] Fedyanin V.K., Makhankov V.G., Jakushevich L.V. // Phys. Lett. 61A, 1977. V. 61A. P. 256.

[3] Makhankov V.G., Fedyanin V.K. // Phys. Rep. 1984. V. 101. N 1. P. 1–86.

[4] Уизем Дж. Линейные и нелинейные волны. М.: Мир, 1977.

[5] Schwinger J. // Quantum Theory of Angular Momentum / Ed. L.C. Bredenharn and H.Van Dam. Acad. Press, N.Y., 1965.

[6] Крайник Н.Н., Попов С.Н. // ФТТ. 1970. Т. 12. № 12. С. 3022; Кессель А.Р., Сафин И.А., Гольдман А.М. // ФТТ. 1970. Т. 12. № 12. С. 3070.

[7] Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М., Мир, 1975.

Казанский физико-технический институт
КНЦ РАН

Поступило в Редакцию
13 апреля 1994 г.