УДК 548.571;548.5.01


# ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СОСТОЯНИЯ С ЛОКАЛЬНОЙ СИММЕТРИЕЙ

*А. Я. Брагинский*

В рамках феноменологической теории фазовых переходов с неоднородной плотностью потенциала Ландау развит формализм, позволяющий описывать деформированное состояние кристалла, в котором есть ближний порядок и отсутствует дальний. В отличие от моделей, где изменяется лишь величина параметра порядка (ПП), в настоящей работе предполагается изменение трансформационных свойств ПП с пространственной координатой кристалла. В качестве примера рассмотрен фазовый переход типа смещения. Деформированному состоянию отвечает пара: ПП, обладающий локальными трансляционными свойствами, и связность ПП, компенсирующая изменение волнового вектора с пространственной координатой кристалла. Калибровочная структура локального потенциала Ландау, обусловленная его трансляционной инвариантностью, позволяет теоретико-групповым образом определить тензоры напряжения, дисторсии и плотности дислокаций ПП. Показано, что система уравнений Эйлера—Лагранжа функционала Ландау содержит уравнения Крёнера континуальной теории стационарных дислокаций.

В работе [1] Лифшиц, исследуя в окрестности точки фазового перехода второго рода устойчивость однородных низкосимметричных состояний по отношению к неоднородным искажениям величины ПП, доказал, что если неприводимое представление (НП) не допускает квадратичной антисимметричной комбинации, линейной как по компонентам ПП, так и по его пространственным градиентам, то возможен фазовый переход второго рода в однородную низкосимметричную фазу. При этом предполагалось следующее: 1) разновесным распределениям ПП по кристаллу отвечают экстремали функционала $F=\int \Phi dV$; 2) локальный потенциал Ландау $\Phi$ зависит инвариантным образом от компонент ПП и его пространственных градиентов; 3) переход в каждом макроскопически малом физическом объеме, характеризующемся координатой $\mathbf{x}$, индуцируется одним и тем же НП с волновым вектором $\mathbf{k}=\mathbf{k}_0$, отвечающим симметричной точке зоны Бриллюэна.

Подход Лифшица был использован Дзялошинским в работе [2] для описания фазовых переходов второго рода в неоднородные состояния. Он показал, что в случае, когда НП допускает инвариант Лифшица, высокосимметричная фаза переходит в неоднородную путем фазового перехода второго рода выше точки Кюри возможного фазового перехода в однородное низкосимметричное состояние. Тем самым была доказана необходимость учета неоднородных состояний в феноменологической теории фазовых переходов и исследования локального потенциала Ландау.

В работе [2] неоднородные решения интерпретировались как несоразмерные фазы (однородные состояния $\eta_j=\mathrm{const}\,(\mathbf{x})$ с волновым вектором, не соразмерным периоду обратной решетки кристалла) по первой гармонике разложения в ряд Фурье. Такая интерпретация эквивалентна симметричной классификации неоднородных состояний по первой гармонике ряда Фурье. Она является неудовлетворительной, поскольку точных периодических решений в модели Дзялошинского получено не было, а приближенными решениями для симметрийной классификации пользоваться нельзя. В работе [3] получено точное периодическое решение, отвечающее геликоидальному упорядочению кристалла, и показано, что в окрестности точки фазового перехода второго рода преобладают существенно неоднородные состояния, не эквивалентные несоразмерным фазам.

По сути дела в работе [1] было высказано предположение о макроскопической локальности фазового перехода, а в работе [2] доказано, что такой переход возможен.

## 1. Локальная симметрия

Развитие концепции локальности фазового перехода состоит в отказе от п. 3 модели Лифшица. Предположим, что не только величина ПП может изменяться от точки к точке, но и его трансформационные свойства зависят от $\mathbf{x}$. Т. е. предполагается не только локальная однородность в каждом физически малом объеме с координатой $\mathbf{x}$, но и локальная симметрия в низкосимметричном состоянии, фиксированная в каждом физически малом объеме. При этом локальная симметрия характеризуется трансформационными свойствами конденсата.

В данной работе исследуется ситуация, когда ПП обладает локальными трансляционными свойствами, т. е. когда волновой вектор НП зависит от макроскопических координат и не отвечает симметричной точке зоны Бриллюэна $\mathbf{k}=\mathbf{k}(\mathbf{x})$. Используемый ниже математический аппарат вариационного исчисления накладывает ограничения на возможные изменения локальных характеристик низкосимметричного состояния. Они выражаются в непрерывной зависимости $\eta_j=\eta_j(\mathbf{x})$, $\mathbf{k}_l=\mathbf{k}_l(\mathbf{x})$. Кроме того, будем считать, что дискретные индексы ПП, такие как группа волнового вектора $G_\mathbf{k}$, размерность представления и др., не меняются и являются глобальными характеристиками низкосимметричного состояния.

В качестве примера рассмотрим случай, когда ПП описывает структурные изменения самой кристаллической решетки. Тогда волновой вектор $\mathbf{k}(\mathbf{x})$ характеризует изменение трансляционной симметрии в низкосимметричной фазе $\mathbf{k}(\mathbf{x})\mathbf{a}'(\mathbf{x})=2\pi$. Здесь $\mathbf{a}'(\mathbf{x})$ — новый период ячейки кристалла в физически малом объеме с координатой $\mathbf{x}$. В общем случае при неоднородном изменении трансляционной симметрии в низкосимметричном состоянии с необходимостью возникнут разрывы кристаллической решетки. Они приводят к появлению плотности дислокаций в твердом теле, а также к деформациям и напряжениям, обусловленным дислокациями. Покажем, что феноменологическая теория Ландау с локальным ПП содержит уравнения Крёнера континуальной теории стационарных дислокаций [4].

## 2. Связность ПП

Пусть переход индуцируется двумерным НП двухлучевой звезды $\mathbf{k}=[1+\mu_3(\mathbf{x})]\mathbf{b}_3$, где $\mathbf{b}_3$ — период обратной решетки. Тогда $\hat{a}_3\eta=\eta\exp\times(2\pi i\mu_3)$, $\hat{a}_3\tilde{\eta}=\tilde{\eta}\exp(-2\pi i\mu_3)$. Здесь $\hat{a}_3$ — оператор трансляции группы симметрии высокосимметричной фазы в направлении оси $z$. Так как $\mu_3=\mu_3(\mathbf{x})$, то $\eta\tilde{\eta}$ — единственный инвариант подгруппы трансляций, составленный из компонент ПП, не зависящий от $\mathbf{x}$. При построении градиентных инвариантов подгруппы трансляций заметим, что $\partial\eta/\partial x_j$, $\partial\tilde{\eta}/\partial x_j$ не являются собственными функциями оператора трансляции $\hat{a}_3$

$$\hat{a}_3\left(\frac{\partial\eta}{\partial x_j}\right)=\frac{\partial}{\partial x_j}(\hat{a}_3\eta)=2\pi i\,\frac{\partial\mu_3}{\partial x_j}\,e^{2\pi i\mu_3}\eta+e^{2\pi i\mu_3}\frac{\partial\eta}{\partial x_j}.$$

Оператор трансляции высокосимметричной фазы $\hat{a}_3$ коммутирует с оператором $\partial/\partial x_j$, так как $\hat{a}_3\,dx_j=dx_j$. Аналогично

$$\hat{a}_3\left(\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_j}\right)=\frac{\partial}{\partial x_j}(\hat{a}_3\tilde{\eta})=-2\pi i\frac{\partial\mu_3}{\partial x_j}e^{-2\pi i\mu_3}\tilde{\eta}+e^{-2\pi i\mu_3}\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_j}.$$

Диагонализуем представление подгруппы трансляций путем введения связности ПП $\mathcal{A}$ (x) [5]. Потребуем, чтобы

$$\hat{a}_3A_{3j}=A_{3j}+2\pi(\partial\mu_3/\partial x_j),$$

тогда

$$\hat{a}_3D_j\eta=e^{2\pi i\mu_3}D_j\eta,\qquad \hat{a}_3\tilde{D}_j\tilde{\eta}=e^{-2\pi i\mu_3}\tilde{D}_j\tilde{\eta},$$

где $D_j=\partial/\partial x_j-iA_{3j}$, $\tilde{D}_j=\partial/\partial x_j+iA_{3j}$. Инварианты представления подгруппы трансляций на $\eta$, $\tilde{\eta}$, $D_j\eta$, $\tilde{D}_l\tilde{\eta}$ имеют вид

$$\eta\tilde{\eta},\qquad \eta\tilde{D}_l\tilde{\eta},\qquad D_j\eta\tilde{\eta},\qquad D_j\eta\tilde{D}_l\tilde{\eta}. \tag{1}$$

Зависимость от $A_{3j}$ содержится в $D_j$ и $\tilde{D}_j$, а градиентные инварианты подгруппы трансляций поля $A_{3j}$ имеют вид

$$e_{ijk}=(\partial A_{3k}/\partial x_j), \tag{2}$$

здесь $e_{ijk}$ — полностью антисимметричный тензор.

Связность $\mathcal{A}$ ПП преобразуется по тензорному представлению точечной группы. Действительно, при отражении в плоскости, перпендикулярной оси $z$: $\hat{\sigma}_z\eta=\tilde{\eta}$, $\hat{\sigma}_z\tilde{\eta}=\eta$, $\hat{\sigma}_zD_1=\tilde{D}_1$, $\hat{\sigma}_zD_2=\tilde{D}_2$, $\hat{\sigma}_zD_3=-\tilde{D}_3$, а потому $\hat{\sigma}_zA_{31}=-A_{31}$, $\hat{\sigma}_zA_{32}=-A_{32}$, $\hat{\sigma}_zA_{33}=A_{33}$. В общем случае многолучевой звезды $\{\mathbf{k}_l\}$ поля $\mathcal{A}_l$ по построению компенсируют изменение векторного поля $\mathbf{k}_l$. При преобразованиях из точечной группы симметрии, не принадлежащих $G_\mathbf{k}$, векторы $\mathbf{k}_l$ преобразуются вместе с соответствующими компенсирующими полями $\mathcal{A}_l$, так что $\mathbf{k}_l\to\mathbf{k}'_l$, $\mathcal{A}_l\to\mathcal{A}'_l$. Координаты $l$-го волнового вектора $\mu^l_n$ преобразуются по векторному представлению, а компенсирующее поле $\mathcal{A}$ преобразуется как $\partial\mu^l_n/\partial x_j$ (тензор второго ранга).

Пусть группа волнового вектора $G_\mathbf{k}$ в нашем примере содержит ось четвертого порядка, тогда, действуя элементами точечной группы симметрии кристалла на инвариантах (1), (2), построим полный базис инвариантов пространственной группы кристалла [6]

$$\eta\tilde{\eta},\quad \eta\tilde{D}_3\tilde{\eta}-\tilde{\eta}D_3\eta,\quad D_3\eta\tilde{D}_3\tilde{\eta},\quad D_1\eta\tilde{D}_1\tilde{\eta}+D_2\eta\tilde{D}_2\tilde{\eta},\quad D_1\eta\tilde{D}_1\tilde{\eta}D_2\eta\tilde{D}_2\tilde{\eta}, \tag{3}$$

$$\left(e_{3jk}\frac{\partial A_{3k}}{\partial x_j}\right)^2,\quad \left(e_{1jk}\frac{\partial A_{3k}}{\partial x_j}\right)^2+\left(e_{2jk}\frac{\partial A_{3k}}{\partial x_j}\right)^2,\quad \left(e_{1jk}\frac{\partial A_{3k}}{\partial x_j}\right)^2\left(e_{2jk}\frac{\partial A_{3k}}{\partial x_j}\right)^2. \tag{4}$$

Переписывая инварианты (3) в явном виде, получаем

$$\eta\tilde{\eta},\qquad \eta\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_3}-\tilde{\eta}\frac{\partial\eta}{\partial x_3}+2iA_{33}\eta\tilde{\eta},$$

$$\frac{\partial\eta}{\partial x_3}\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_3}+iA_{33}\left(\eta\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_3}-\tilde{\eta}\frac{\partial\eta}{\partial x_3}\right)+A^2_{33}\eta\tilde{\eta},$$

$$\frac{\partial\eta}{\partial x_1}\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_1}+\frac{\partial\eta}{\partial x_2}\frac{\partial\eta}{\partial x_2}+iA_{31}\left(\eta\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_1}-\tilde{\eta}\frac{\partial\eta}{\partial x_1}\right)+iA_{32}\left(\eta\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_2}-\tilde{\eta}\frac{\partial\eta}{\partial x_2}\right)+(A^2_{31}+A^2_{32})\eta\tilde{\eta},$$

$$\left[\frac{\partial\eta}{\partial x_1}\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_1}+iA_{31}\left(\eta\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_1}-\tilde{\eta}\frac{\partial\eta}{\partial x_1}\right)+A^2_{31}\eta\tilde{\eta}\right]\left[\frac{\partial\eta}{\partial x_2}\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_2}+\right.$$

$$\left.+iA_{32}\left(\eta\frac{\partial\tilde{\eta}}{\partial x_2}-\tilde{\eta}\frac{\partial\eta}{\partial x_2}\right)+A^2_{32}\eta\tilde{\eta}\right]. \tag{5}$$

Инварианты (4) содержат только связность ПП, инварианты (5) — инварианты компонент ПП и взаимодействия ПП со связностью $\mathcal{A}$. Локальный потенциал Ландау Ф — функция инвариантов (4) и (5), а симметрийно-обусловленные состояния кристалла определяются из вариации Ф по компонентам ПП и компонентам связности ПП.

Таким образом, в случае, когда ПП обладает локальными трансляционными свойствами, состояние кристалла характеризуется парой взаимодействующих величин: самим ПП и связностью ПП. Компоненты связности $\mathcal{A}$ нельзя рассматривать как компоненты ПП в силу различия их трансформационных свойств.

## 3. Уравнения Крёнера

Изложенный в разделе 2 формализм позволяет в рамках феноменологической теории описывать фазовые переходы не только в состояния с глобальной симметрией, но и в состояния с локальной симметрией, для описания которых потребовалось введение в теорию тензорных компенсирующих полей.

В настоящем разделе предложена физическая интерпретация связности ПП в случае, когда ПП описывает структурные искажения кристаллической решетки.

По построению локальный потенциал Ландау Ф инвариантен относительно однопараметрической группы преобразований

$$\eta \to \exp(2\pi i \mu_3)\,\eta, \qquad \tilde{\eta} \to \exp(-2\pi i \mu_3)\,\tilde{\eta}. \tag{6}$$

Наличие локальной калибровочной структуры (6) потенциала Ф обусловлено требованием инвариантности Ф относительно действия оператора трансляции $\hat{a}_3$, высокотемпературной фазы. Как известно из теоремы Нётер, однопараметрической группе (6) потенциала Ф сопряжен первый интеграл

$$d_{3j} = i\left(\frac{\partial \Phi}{\partial(\partial\tilde{\eta}/\partial x_j)}\tilde{\eta} - \frac{\partial \Phi}{\partial(\partial\eta/\partial x_j)}\eta\right), \tag{7}$$

удовлетворяющий уравнению непрерывности $\partial \alpha_{3j}/\partial x_j = 0$. Введем обозначение

$$\sigma_{3j} = e_{jik}\,(\partial A_{3k}/\partial x_i), \tag{8}$$

тогда градиентные инварианты поля $\mathcal{A}$ (4) будут иметь вид

$$\sigma_{33}^2, \quad \sigma_{31}^2 + \sigma_{32}^2, \quad \sigma_{31}^2\sigma_{32}^2. \tag{9}$$

Запишем уравнения минимизации Ф по $\mathcal{A}$

$$\frac{\delta\Phi}{\delta A_{3j}} = \frac{\partial\Phi}{\partial A_{3j}} - e_{jik}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\sigma_{3k}}\right) = 0. \tag{10}$$

Поскольку $A_{3j}$ входит в инварианты (3) в комбинациях

$$D_j\eta = (\partial/\partial x_j - iA_{3j})\,\eta, \qquad \tilde{D}_j\tilde{\eta} = (\partial/\partial x_j + iA_{3j})\,\tilde{\eta},$$

то

$$\frac{\partial\Phi}{\partial A_{3j}} = \frac{\partial\Phi}{\partial D_j\eta}(-i\eta) + \frac{\partial\Phi}{\partial\tilde{D}_j\tilde{\eta}}(i\tilde{\eta}).$$

В то же время градиентные инварианты ПП входят в инварианты (3) в тех же комбинациях $D_j\eta$ и $\tilde{D}_j\tilde{\eta}$, а потому

$$\frac{\partial\Phi}{\partial D_j\eta} = \frac{\partial\Phi}{\partial(\partial\eta/\partial x_j)}, \qquad \frac{\partial\Phi}{\partial\tilde{D}_j\tilde{\eta}} = \frac{\partial\Phi}{\partial(\partial\tilde{\eta}/\partial x_j)},$$

откуда $\partial\Phi/\partial A_{3j} = \alpha_{3j}$ и уравнения (10) имеют вид

$$\alpha_{3j} - e_{jik}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\sigma_{3k}}\right) = 0. \tag{11}$$

Как отмечалось в разделе 1, состояния с локальной симметрией отвечают определенным образом деформированному состоянию кристалла. Аналогия в описании деформированного состояния твердого тела и явлений магнитостатики отмечалась в [4]. Мы воспользуемся этой аналогией для определения трансляционно-инвариантных (калибровочно-инвариантных) величин нашей модели. Тогда $\alpha_{ij}$ есть не что иное, как плотность дислокаций ПП, связность $\mathcal{A}$ — потенциал поля напряжений, а $\sigma_{ij}$ — тензор напряжений, который в силу определения (8) удовлетворяет соотношению

$$\partial\sigma_{3k}/\partial x_k = 0. \tag{12}$$

Равенство нулю дивергенции тензора напряжений, соответствующее равенству нулю дивергенции магнитной индукции для магнитостатики, отвечает условию равновесия твердого тела в отсутствие объемных сил (в данном случае рассматриваются напряжения, обусловленные структурным ПП), а инварианты (9) — инварианты упругой энергии кристалла. Переходя в (11) от $\sigma_{3k}$ к сопряженному тензору упругой дисторсии

$$w_{3k} = \partial\Phi/\partial\sigma_{3k}, \tag{13}$$

получаем уравнения Крёнера континуальной теории дислокаций [4], [7]

$$\alpha_{3j} - e_{jik}\,(\partial w_{3k}/\partial x_i) = 0. \tag{14}$$

Антисимметричная роторная структура уравнений (14) обусловлена трансляционными свойствами связности ПП. В отличие от работы [4], где исследуются внутренние напряжения в твердом теле с заданными распределениями плотности дислокаций, в настоящей работе плотность дислокаций и тензор упругой дисторсии отвечают рассматриваемому состоянию кристалла и функционально зависят от компонент ПП и связности (7), (13).

Таким образом, интерпретация связности как тензорного потенциала поля напряжений приводит к тому, что уравнения минимизации функционала Ф по $A_{3j}$ есть уравнения Крёнера теории внутренних напряжений, аналогичные уравнениям Максвелла для магнитостатики. Соотношения между плотностью дислокаций и тензором упругой дисторсии (14) подобно соотношениям между плотностью тока и напряженностью магнитного поля являются фундаментальными и должны выполняться независимо от причин появления дислокаций в твердом теле. Наличие уравнений Крёнера в системе уравнений Эйлера—Лагранжа функционала Ф, соответствующего состоянию кристалла с локальной трансляционной симметрией, а также выполнение условия равновесия кристалла (12) свидетельствуют о корректном определении связности $\mathcal{A}$ как тензорного потенциала поля напряжений.

В заключение заметим, что в отличие от теории поля [5], где предполагается инвариантность лагранжиана относительно некоторой локальной калибровочной группы, в настоящей работе группа симметрии высокосимметричной фазы кристалла, относительно которой инвариантен потенциал Ф, глобальна. Это обстоятельство позволяет в рамках предложенной модели описывать фазовые переходы из состояния с глобальной симметрией в состояния с локальной симметрией, в котором есть ближний порядок и отсутствует дальний. Формализм раздела 2 справедлив не только в случае, когда низкосимметричное состояние обладает локальной трансляционной симметрией, но и в случае, когда низкосимметричное состояние характеризуется ПП с локальными трансляционными свойствами. Например, при переходах типа упорядочения с несоразмерным волновым вектором, зависящим от $\mathbf{x}$, низкосимметричное состояние вообще не обладает трансляционной симметрией.

### Список литературы


[1] Лифшиц Е. М. // ЖЭТФ. 1941. Т. 11. № 2. С. 255—268.
[2] Дзялошинский И. Е. // ЖЭТФ. 1964. Т. 46. № 4. С. 1420—1438.
[3] Брагинский А. Я. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 1. С. 10—15.
[4] Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: ИЛ, 1963. с. 197.
[5] Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В. Квантовые поля. М.: Наука, 1980. С. 92.
[6] Гуфан Ю. М. Структурные фазовые переходы. М.: Наука, 1982. Гл. 3.
[7] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М.: Наука, 1987. С. 164.



Ростовский инженерно-строительный институт
Ростов-на-Дону



Поступило в Редакцию
20 октября 1989 г.
В окончательной редакции
23 января 1990 г.