# MECANICA ESTADISTICA DE EXCITACIONES NO LINEALES PERIODICAS EN UN MODELO PARA TRANSICIONES DE FASE ESTRUCTURALES

**A. Dobry y A. Greco**

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, Universidad Nacional de Rosario, Av.Pellegrini 250, 2000 Rosario*

En este trabajo desarrollamos una aproximación punto de ensilladura para la función de partición en representación de la integral de camino del modelo de capas de la dinámica de la red. Este tratamiento es adecuado para tratar efectos no lineales en forma no perturbativa.
La aproximación es aplicada para estudiar una versión unidimensional de un modelo para sistemas que sufren una transición de fase estructural. Investigamos la contribución de soluciones periódicas no lineales (Periodones) a las funciones termodinámicas.

## 1. INTRODUCCION

Es bien conocido que los métodos perturbativos usuales no son válidos para explicar las propiedades de un sólido cerca de una transición de fase estructural. Una característica típica de estos sistemas es la aparición de un pico a frecuencia cero, el llamado "pico central", en la respuesta dinámica a una prueba externa como neutrones o luz[1].

Una posible interpretación del pico central ha sido iniciada por Krumhansl y Schrieffer[2]. Ellos estudiaron un modelo unidimensional con un potencial $\phi^4$ doble pozo en el sitio, y mostraron que el pico central puede asociarse a la dinámica de excitaciones no lineales (paredes de dominio, o kinks).

Por otro lado, la dinámica de diversos materiales que muestran un modo blando ferroeléctrico ha sido descripta en aproximación de fonones autoconsistente por medio de un modelo de capas con una interacción cuártica capa-carozo en el anión, la que corresponde a su polarizabilidad no lineal[3]. Una versión unidimensional de este modelo ha sido estudiada, encontrándose soluciones exactas de las ecuaciones de movimiento (Periodones)[4]. El acoplamiento de los periodones con fonones autoconsistentes lleva a una transición de fase inconmensurada.

La mecánica estadística clásica de este modelo en el régimen displacivo (aproximación del contínuo) ha sido recientemente estudiada[6, 7]. El objetivo de este trabajo es estudiar la mecánica estadística cuántica del modelo en el discreto, incorporando las soluciones tipo periodón. En la Sección II desarrollaremos la aproximación semiclásica para el modelo de capas en general. En la Sección III presentamos el modelo y sus excitaciones dinámicas y calculamos entonces la función de partición cuántica.

## 2. APROXIMACION SEMICLASICA PARA EL MODELO DE CAPAS

La función de partición cuántica del modelo de capas es[8]:

$$Z = \int D\underline{u}\, D\underline{v}\, \mathrm{Det}\left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \underline{u}\, \partial \underline{v}}\right] \delta\left(\frac{\partial \phi}{\partial v}\right) \mathrm{Exp}\left[\frac{1}{\hbar} S(\underline{u},\underline{v})\right] \tag{1}$$

$$= \int D\underline{u}\, D\underline{v}\, D\underline{\lambda}\, \mathrm{Det}\left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial \underline{v}\, \partial \underline{v}}\right] \mathrm{Exp}\left[\frac{1}{\hbar} S(\underline{u},\underline{v}) + \int_o^{B\hbar} \underline{\lambda}^{+} \underline{\chi}\right] \tag{2}$$

donde $\underline{u}$ y $\underline{v}$ es el vector cuyas componentes son los desplazamientos de los núcleos (carozos) y los electrones externos (capas) respectivamente.

Además:

$$S(\underline{u},\underline{v}) + \int_o^{B\hbar} d\tau \left[\frac{1}{2}\left(\frac{d\underline{u}}{d\tau}\right)^{+} \underline{\underline{M}} \left(\frac{d\underline{u}}{d\tau}\right) + \phi(\underline{u},\underline{v})\right] \tag{3}$$

Expandiendo alrededor de los caminos que hacen estacionario el exponente, tenemos:

$$Z \cong \sum_{\alpha} \mathrm{Exp}\left\{\frac{1}{\hbar} S(\underline{u}_a^{\alpha}, \underline{v}_a^{\alpha})\right\} \mathrm{Det}^{-1/2}\left[\underline{\Delta}\right] \tag{4}$$

$\underline{u}^{\alpha}_{ce}$, $\underline{v}^{\alpha}_{ce}$ son las soluciones de las ecuaciones de Euler-Lagrange de $S(\underline{u}, \underline{v})$con condiciones periódicas en el tiempo:

$$\underline{\underline{M}} \frac{d^2 \underline{u}}{d\tau^2} = \frac{\partial \phi}{\partial \underline{u}} \tag{5.a}$$

$$\chi = \frac{\partial\phi}{\partial \underline{v}} = 0 \qquad (5.b)$$

(condición adiabática)

ya que $\lambda_{ce}$O. Por otro lado

$$\mathrm{Det}^{-1/2}\underline{\underline{\Delta}} = \mathrm{Det}^{-1/2}\left[\underline{\underline{\Delta}}_{uu} - \underline{\underline{\Delta}}_{uv}\underline{\underline{\Delta}}_{vv}^{-1}\underline{\underline{\Delta}}_{uv}^{+}\right] \qquad (6)$$

con

$$\underline{\underline{\Delta}}_{uu}(\tau,\tau^1) = \frac{\delta^2 S}{\delta \underline{u}(\tau)\delta \underline{u}(\tau^1)}\Bigg|_{\underline{u}^\alpha_u \underline{u}^\alpha_u}, \qquad \underline{\underline{\Delta}}_{uv}(\tau,\tau) = \frac{\delta^2 S}{\delta \underline{u}(\tau)\,\delta \underline{v}(\tau^1)}\Bigg|_{\underline{u}^\alpha_u \underline{v}^\alpha_u} \qquad (7)$$

(6) es equivalente al término de fluctuación para el modelo de carozos efectivo definido por $\Phi^{ce}(\underline{u}) = \Phi[\underline{u},\underline{v}(\underline{u})]$, donde $\underline{v}(\underline{u})$ es definida a traves de la condición adiabática.

Si tenemos sólo trayectorias independientes del tiempo, (4) toma la forma:

$$Z \cong \sum_\alpha \mathrm{Exp}\left\{-\beta\phi(u^\alpha_u, v^\alpha_u)\right\} Z^\alpha_{fom} \qquad (8)$$

$Z^{\alpha'}_{fom}$ es la función de partición cuántica del modelo de capas armónico cuyas posiciones de equilibrio son dadas por las configuraciones estáticas $\underline{u}^{\alpha'}_{ce}$, $\underline{v}^{\alpha'}_{ce}$.

## 3 EL MODELO DE POLARIZABILIDAD NO LINEAL

a) El modelo y sus excitaciones

El modelo monoatómico unidimensional con polarizabilidad no lineal queda definido por el siguiente potencial:

$$\phi(\underline{u},\underline{v}) = \sum_{n}^{M}\left\{\frac{1}{2}f(u_i - u_{i-1})^2 + \frac{1}{2}f(\underline{v}_i \underline{v}_{i-1})^2 + V(v_i - u_i)\right\} \qquad (9)$$
$$V(\omega) \equiv \frac{1}{2}g_2\omega^2 + \frac{1}{4}g_4\omega^4$$

Las ecuaciones euclídeas[5] tienen soluciones exactas tipo periodón dadas por:

$$U_m(\tau) = B(q)\,\mathrm{sen}\left(\omega\tau - nqa + \delta\right) + C(q)\,\mathrm{sen}\left(\omega\tau - nqa + \delta\right) \qquad (10.a)$$

$$\omega_n(\tau) \equiv v_n(\tau) - u_n(\tau) = A(q)\,\mathrm{sen}\left(\omega\tau - nqa + \delta\right) \qquad (10.b)$$

Con la relación de dispersión:

$$-M\omega^2(q) = \frac{2}{3}\left(f + f'\right)\mathrm{sen}\left(3q/a\right) \qquad (11)$$

Donde A(q), B(q) y C(q) pueden encontrarse en ref. (4).

La solución estática correspondiente (periodón estático), donde la celda unidad está triplicada, está dada por:

$$\omega_n = A\ \mathrm{sen}\left(2\pi n / 3\right) \qquad (12.a)$$

$$u_n = B\ \mathrm{sen}\left(2\pi n / 3\right) \qquad (12.b)$$

La solución es estable cuando

$$3 \le g_2\frac{f + f'}{f f'} \le 4 \qquad (13)$$

Puede verse que los periodones no existen en el régimen displasivo[9].

b) Mecánica estadística de periodones

Las condiciones periódicas en el tiempo nos llevan a:

$$\omega_j = \frac{2\pi}{\beta k} J \qquad J = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \qquad (14)$$

Esto selecciona los periodones que contribuyen a una temperatura dada:

La acción en el camino clásico es:

$$S(u^j_u, v^j_u) = \qquad (15)$$
$$= N\beta\hbar\left\{(f+f')B_j^2\left[\mathrm{sen}^2(q_j a/2) - \mathrm{sen}^2(3q_j a/2)\right] + 2fA_j B_j^2 \mathrm{sen}\left(q_j a/2\right) - \frac{1}{4}g_2 A_j^2 + \frac{3}{32}g_4 A_j^4\right\} \equiv N\beta\hbar F_j$$

Cuando T → O tenemos el estado fundamental, dado por la energía del periodón estático mas fluctuacones de punto cero.

Por lo tanto estamos describiendo una transición de fase estructural a una fase modulada.

La expresión (4) toma la forma:

$$Z = \left\{e^{-\beta E_0}\Delta_0^{-1/2} + \sum_{j\neq 0}\int_0^{\beta\hbar} d\delta\,\Delta_{FP}\mathrm{Exp}\left[-\beta\hbar N F_j\right]\Delta_j^{1-1/2}\right\} \qquad (16)$$
$$= Z_{fom}e^{-\beta E_0}\left\{1 + \sum_{j\neq 0}\int_0^{\beta\hbar} d\delta\,\Delta_{FP}\mathrm{Exp}\left[-\beta\left(NF_j - E_0\right)\right]Z_j / Z_{fom}\right\}$$

En (16) hemos separado la contribución del periodón estático.

$\Delta_{FP}$ es el determinante de Fadeev-Popov, el cual se introduce debido a la existencia de un modo cero en el determinante de fluctuación:

$$\Delta_{FP} \sim \left|\left| \frac{du_{il}}{d\tau} \right|\right| \left\{ \sum_n \int_0^{\beta\hbar} \left( \frac{du_n}{d\tau} \right)^2 d\tau \right\}^{1/2} = \left\{ \frac{N\beta\hbar}{z} \omega^2 \left( B^2 + 9C^2 \right) \right\}^{1/2} \tag{17}$$

(16) es la expresión no perturbativa para Z.

A bajas temperaturas:

$$\chi \equiv \frac{2\pi J}{\beta h} \qquad \text{(variable contínua)}$$

$$Z_j / Z_{fom} \cong 1$$

La energía libre es:

$$F = E_0 + F_{fom} + F_{per} \tag{18}$$

$$F_{per} = \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{(\beta h)^{5/2}}{2\pi} \left( \frac{N}{2} \right)^{1/2} \cdot \left[ \int_{2/3\left(\frac{f_o+f'}{M}\right)^{1/2}}^{2\pi\beta h} + \int_{-2\pi\beta h}^{\frac{3}{3}\left(\frac{f_o+f'}{M}\right)^{1/2}} \right] \cdot \left[ x^2 \left( B^2(x) + 9C^2(x) \right) \right]^{1/2} \exp\left[ \beta (NF - E_0) \right] \right\}$$

El comportamiento en T puede aproximarse por:

$$C_v^{per} = \frac{k_B}{2\pi} \left( \frac{N}{2} \right)^{1/2} \hbar^{5/2} \left( \frac{2}{3} \sqrt{\frac{f+f^1}{M}} \right) \beta^{9/2} \left\{ K(C_1)\, e^{-\beta(NF(C_1) - E_0)} + K(C_2)\, e^{\beta(NF(C_2) - E_0)} \right\} \tag{19}$$

$$K(x) \equiv \left[ x^2 \left( B^2(x) + 9C^2(x) \right) \right]^{1/2} \left[ N F(x) - E_0 \right]^2$$

En este resultado vemos que los fonones dominan la termodinámica.

Una versión más amplia de este trabajo, junto con el estudio cuántico en el régimen del contínuo, se encuentran en referencia (9).

## REFERENCIAS


1. A.Bruce, Crowley; Adv.Phys. 29, 111, 219 (1980)
2. A.Krumhansl, J.Schrieffer; Phys.Rev. B 11 3535 (1975)
3. R.Migoni, H.Bilz, D.Bauerle; Phys. Rev. Lett. 37, 1155 (1976)
4. H.Buttner, H.Bilz: in Recent Developments in Condensed Matter Physics, edited by J.T. Devreese (Plenum, N.Y., 1981) Vol. 1 p.49.
5. H.Bilz, H.Buttner, A.Bussman-Holder, W.Kress, U.Schoroder; Phys. Rev. Lett. 48, 264 (1982)
6. A.Dobry, R.Mogini, A.H.Cecatto; Phys. Rev. B 38, 2801 (1988)
7. A.Dobry, A.Greco, R.Migoni, O.Zandron; Phys. Rev. B 39, 12182 (1989)
8. A.Dobry, A.Greco; J.Phys. A. (1989) (en prensa).
9. A.Dobry, A.Greco (1989) (enviado para su publicación al Phys. Rev. B.)



CEILAP
CITEFA - CONICET
ZUFRIATEGUI Y VARELA
1603 - VILLA MARTELLI
REPUBLICA ARGENTINA