

Ренормализационная группа и структурный фазовый переход в фуллерите C_{60}

К. Б. Варнашев

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)
k.varnashev@mail.ru

Аннотация. Методом ренормализационной группы (РГ) в пространстве физической размерности $D=3$ исследуется критическое поведение теоретико-полевой модели, описывающей структурный фазовый переход типа ориентации в твёрдом фуллерене C_{60} при температуре 260 К. Ренормгрупповые функции модели, включая разложения для критических индексов, вычисляются в рамках двухпетлевого приближения перенормированной теории возмущения и полученные ряды пересуммируются методом Паде–Бореля. В рамках проделанных вычислений показано, что модель испытывает только фазовые переходы первого рода. Однако, хорошо известно, что индуцированные флуктуациями параметра порядка переходы первого рода являются слабыми, т.е. близкими к непрерывным фазовым переходам, и в критическом поведении модели могут наблюдаться некоторые кроссоверные режимы, управляемые эффективными критическими индексами. Показано, что численные оценки критических индексов, полученные в нетривиальных фиксированных точках уравнений РГ в рамках нашего подхода, являются более точными по сравнению с аналогичными оценками, полученными в рамках существенно иных теоретических подходов.

Ключевые слова: фуллерен, ренормализационная группа, структурный фазовый переход, критическое поведение, критические индексы

Исследование ориентационного фазового перехода в фуллерите C_{60} при температуре 260 К представляет собой актуальную физическую проблему, которая активно изучается как экспериментально, так и теоретически. Для описания этого слабого структурного перехода I-го рода было предложено несколько микроскопических моделей [1–4]. Также были предприняты попытки изучить основные особенности данного явления феноменологически, т.е. на основе теории Ландау [5–7]. В частности, было установлено, что параметр порядка (ПП) соответствующей флуктуационной модели Ландау–Вильсона имеет достаточно сложную структуру, а разложение для свободной энергии содержит члены третьего порядка (кубические) по полю ПП, которые могут быть ответственны за «срыв» непрерывных фазовых переходов в твёрдом фуллерене, обращая их в переходы I-го рода.

С другой стороны, известно, что обсуждаемый фазовый переход в фуллерите управляется короткодействующими межмолекулярными силами и, следовательно, критическая область в твёрдом C_{60} должна быть достаточно широкой. Это означает, что тепловые флуктуации ПП должны играть заметную роль в формировании критического поведения фуллерита в довольно широкой температурной области вблизи T_c . В частности, они могут превращать непрерывные фазовые переходы в переходы I-го рода даже тогда, когда вклад

кубических членов в соответствующем гамильтониане Ландау–Вильсона оказывается пренебрежимо малым или вообще нулевым. Корректно учесть взаимодействие флуктуаций ПП, лавинообразно нарастающих при приближении к T_c , и их влияние на критическую термодинамику исследуемых веществ, позволяет метод ренормализационной группы (РГ) – мощный современный инструмент теоретического исследования критического поведения совершенно различных по своей природе реальных физических систем.

Ранние исследования критических явлений в твёрдом фуллерене C_{60} методом РГ были выполнены в рамках низших приближений (одно- и двухпетлевые разложения на языке квантовой теории поля) метода ε -разложения Вильсона–Фишера (см, например, [5] и ссылки там же). Эти аппроксимации, однако, дают довольно грубые численные оценки исследуемых физических величин, а, иногда, могут приводить к неправильным качественным предсказаниям относительно рода фазового перехода в случае сложных трёхмерных систем. Последнее, например, имеет место при исследовании киральных фазовых переходов в геликоидальных магнетиках и слоистых треугольных антиферромагнетиках методом ε -разложения (см. детали в работах [8, 9]). Следовательно, представляется целесообразным изучить критическое поведение модели, описывающей ориентационный фазовый переход в фуллерите C_{60} , в рамках альтернативного РГ подхода.

В настоящей работе мы анализируем критическое поведение теоретико-полевой модели, описывающей структурный фазовый переход в твёрдом фуллерене [5], методом РГ в пространстве физической размерности $D=3$. Конкретно, мы вычисляем РГ функции (β -функции и критические индексы) модели. Полученные РГ разложения мы пересуммируем методом Паде–Бореля. Далее мы определяем координаты фиксированных точек (решения) β -функций модели и строим вблизи них глобальную картину фазовых траекторий РГ потоков. В завершении мы даём численные оценки значений критических индексов для всех нетривиальных решений уравнений РГ. Мы показываем, что применяемая нами процедура, а именно двухпетлевые РГ вычисления в пространстве физической размерности в комбинации с надлежащей техникой пересуммирования расходящихся теоретико-полевых рядов, обеспечивает достаточно надёжные качественные предсказания и даёт хорошие количественные результаты [8, 9].

Запишем флуктуационный гамильтониан Ландау–Вильсона исследуемой модели в виде [5]:

$$H = \int d^3x \left\{ \frac{1}{2} (m_0^2 + \vec{\nabla}^2) \Phi_\alpha^2 + \frac{u_0}{4!} (\Phi_\alpha^2)^2 + \frac{v_0}{4!} \Phi_\alpha^4 + t_0 \Phi_1 \Phi_2 \Phi_3 \Phi_4 \right\}, \quad (1)$$

где Φ_α – четырёхкомпонентное вещественное поле ПП, а $m_0^2 \square T - T_c^{(0)}$ ($T_c^{(0)}$ – температура фазового перехода в приближении среднего поля, без учёта флуктуаций параметра порядка в критической области). u_0, v_0, t_0 – константы связи (затравочные заряды), являющиеся количественными характеристиками соответствующих взаимодействий в гамильтониане (1).

Заметим, что в рамках метода ϵ -разложения данный гамильтониан использовался ранее только для описания фазовых переходов в некоторых антиферромагнетиках [10, 11].

Ниже мы приводим РГ разложения для β -функций модели (1) как функций безразмерных эффективных констант связи u, v и t в рамках двухпетлевого приближения

$$\begin{aligned} \beta_u &= u - u^2 - \frac{uv}{2} - 3t^2 + \frac{59}{162}u^3 + \frac{25}{81}u^2v + \frac{23}{324}uv^2 + \frac{131}{54}ut^2 + \frac{vt^2}{2}, \\ \beta_v &= v - uv - \frac{3}{4}v^2 + 3t^2 + \frac{77}{162}u^2v + \frac{52}{81}uv^2 + \frac{77}{324}v^3 - 2ut^2 - \frac{31}{54}vt^2, \\ \beta_t &= t \left(1 - u + \frac{77}{162}u^2 + \frac{23}{162}uv - \frac{1}{81}v^2 + \frac{23}{54}t^2 \right), \end{aligned} \quad (2)$$

где константы взаимодействия нормированы так, чтобы коэффициент перед u^2 в выражении для β^u был равен единице.

Известно, что РГ разложения представляют собой части расходящихся рядов с асимптотикой вида

$$F(g) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n g^n \quad \text{и} \quad f_n = (-a)^n n! n^b \left[1 + O\left(\frac{1}{n}\right) \right], \quad n \rightarrow \infty$$

Здесь q – обобщённая константа связи, параметр разложения в ряд; a и b – асимптотические параметры. Видно, что теоретико-полевые ряды расходятся как минимум факториально. Однако они содержат важную физическую информацию о поведении исследуемых систем, которую можно из них извлечь путём применения подходящей техники пересуммирования.

Для устранения факториальной расходимости ряда применяется интегральное преобразование Бореля

$$f_n \rightarrow f_n \frac{n!}{n!}, \quad \text{где} \quad n! = \int_0^{\infty} e^{-\xi} \xi^n d\xi.$$

Следовательно, в случае наших рядов с тремя константами связи интегральное преобразование Бореля имеет вид

$$f(u, v, t) = \sum_{i,j,k} c_{ijk} u^i v^j t^k = \int_0^{\infty} e^{-\xi} F(u\xi, v\xi, t\xi) d\xi. \quad (3)$$

Для вычисления интеграла в выражении (3) необходимо выполнить аналитическое продолжение борелевского образа

$$F(x, y, z) = \sum_{i,j,k} \frac{c_{ijk}}{(i+j+k)!} x^i y^j z^k$$

на весь интервал интегрирования. Для этого можно использовать так называемый резольвентный ряд

$$\tilde{F}(x, y, z; \lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \sum_{l=0}^n \sum_{m=0}^{n-l} \frac{c_{l,m,n-l-m} x^l y^m z^{n-l-m}}{n!} = \sum_{m=0}^{\infty} A_n \lambda^n,$$

который в действительности является рядом по степеням λ с коэффициентами, представляющими собой однородные полиномы n -го порядка по константам связи u, v и t . Далее борелевский образ $\tilde{F}(x, y, z; \lambda)$ представляется в виде обобщённых аппроксимант Паде

$$\tilde{F}(x, y, z; \lambda) = A_n = [L/M] = \frac{P_L(\lambda)}{Q_M(\lambda)} \Big|_{\lambda=1},$$

которые, как известно, обеспечивают достаточно хорошие результаты в случае моделей, содержащих несколько констант взаимодействия (например, [8] и ссылки в этой статье).

Из практических вычислений нам известно, что наиболее подходящим для обработки двухпетлевых РГ разложений является аппроксимант Паде [2/1]. Его мы и будем использовать в применяемой нами процедуре пересуммирования.

Для устранения расходимости типа $n!n^b$ используется более общее преобразование Бореля–Леруа

$$f(u, v, w) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^b F(ut, vt, wt) dt \quad (4)$$

с борелевским образом вида

$$F(x, y, z) = \sum_{i,j,k} \frac{c_{ijk}}{\Gamma(i+j+k+b+1)} x^i y^j z^k.$$

Далее, аналитическое продолжение на всю область интегрирования в выражении (4) осуществляется с помощью аппроксимант Паде в соответствии с описанной выше процедурой. При этом численные результаты оптимизируются по асимптотическому параметру b .

Применяя описанную выше процедуру суммирования асимптотических рядов к разложениям (2), мы вычисляем координаты всех фиксированных точек модели и определяем характер их устойчивости. Вблизи найденных решений мы изучаем глобальную структуру РГ потоков. Результаты нашего исследования таковы: все найденные фиксированные точки оказываются неустойчивыми (точки типа «седло» или «седло-узел») в трёхпараметрическом пространстве констант связи (u, v, t) . Следовательно, изучаемый нами фазовый переход в фуллерите C_{60} должен быть переходом I-го рода. В то же время на фазовой диаграмме РГ потоков мы обнаружили

фиксированную точку, которая представляет собой устойчивый узел в плоскости (u, v) . Эта точка должна соответствовать некоторому анизотропному режиму критического поведения. Численные значения её координат таковы:

$$u_c = 1.017, \quad v_c = 0.836. \quad (5)$$

Несмотря на то, что, в целом, исследуемая модель не проявляет настоящего универсального критического поведения, некоторые кроссоверные режимы всё же могут быть обнаружены в области сильных флуктуаций ПП. Как правило, такие режимы управляются РГ потоками, очень медленно проходящими вблизи неустойчивых фиксированных точек. Это означает, что в достаточно широкой области температур система может имитировать похожее на скейлинг поведение, определяемое соответствующим набором эффективных критических индексов. Поэтому представляется целесообразным дать численные оценки значений критических индексов для найденных неустойчивых фиксированных точек.

В критической области индексы, определяющие степенные законы аномального поведения термодинамических функций, связаны друг с другом скейлинговыми соотношениями. Это означает, что через какие-либо два известных индекса мы можем выразить весь набор критических индексов, характеризующих поведение вещества вблизи критической точки. Приведём эти скейлинговые соотношения

$$\begin{aligned} \gamma &= (2 - \eta) \cdot \nu, \quad \alpha = 2 - D \cdot \nu, \quad \alpha + 2\beta + \gamma = 2 \\ \beta \cdot \delta &= \beta + \gamma, \quad \delta = \frac{D + 2 - \eta}{D - 2 + \eta}, \end{aligned} \quad (6)$$

где D – пространственная размерность системы.

Вычисленные нами РГ разложения для индекса восприимчивости γ и индекса аномальной размерности (индекс Фишера) η модели (1) имеют следующий вид

$$\begin{aligned} \gamma^{-1} &= 1 - \frac{1}{8}(2u + v) + \frac{1}{48}(2u^2 + 2uv + v^2 + 6t^2), \\ \eta &= \frac{1}{162}(2u^2 + 2uv + v^2 + 6t^2). \end{aligned} \quad (7)$$

Подставляя координаты (5) в разложения (7) и применяя далее описанную выше пересуммировочную технику, мы можем дать численные оценки значений критических индексов в интересующей нас точке. Они таковы:

$$\gamma = 1.409, \quad \eta = 0.028.$$

Остальные индексы могут быть вычислены на основе соотношений (6):

$$\alpha = -0.142, \quad \beta = 0.367, \quad \nu = 0.714.$$

Данные оценки значений критических индексов были получены при обработке достаточно коротких рядов перенормированной теории возмущения для модели, не имеющей малого параметра (см. числа (5)). Насколько

точны эти оценки? Для ответа на этот вопрос, сравним значения критических индексов для $O(N)$ -симметричной (изотропной или «Гейзенберговской») фиксированной точки, найденные в рамках нашего приближения (2L, 2-loop approximation) с теми оценками, которые следуют из наиболее точных на сегодняшний день шестипетлевых расчётов (6L, 6-loop approximation) в рамках РГ в фиксированной размерности пространства при $N=4$ [12]. Ниже приводится сравнительная таблица результатов вычислений.

ТАБЛИЦА I ОЦЕНКИ ЗНАЧЕНИЙ КРИТИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ $O(4)$ -СИММЕТРИЧНОЙ ФИКСИРОВАННОЙ ТОЧКИ, ПОЛУЧЕННЫЕ НА ОСНОВЕ ДВУХ- И ШЕСТИПЕТЛЕВЫХ РГ РАЗЛОЖЕНИЙ, СООТВЕТСТВЕННО.

	γ	η	α	β	ν
2L	1.435	0.027	-0.182	0.374	0.727
6L	1.449	0.036	-0.213	0.382	0.738

Видно, что интересующие нас значения отличаются друг от друга не более чем на 0.014, кроме индекса теплоёмкости α , для которого отклонение составляет величину, немного превышающую значение 0.03. Таким образом, точность вычислений, даваемая нашей аппроксимационной схемой, может считаться достаточно хорошей. В то же время очевидно, что вычисления, выполненные в более высоком РГ приближении, например, в рамках трёхпетлевого приближения, смогут существенно повысить точность полученных результатов [8] и, следовательно, будут крайне желательными. Такие вычисления планируется выполнить в самом ближайшем будущем.

Отметим также, что РГ анализ модели (1), выполненный в рамках двухпетлевого приближения методом ε -разложения (в $4 - \varepsilon$ мерном пространстве) даёт значительно более грубые оценки значений критических индексов. Так, например, для изотропной $O(4)$ -симметричной фиксированной точки суммирование методом Паде–Бореля двухпетлевых ε -разложений для индекса γ^{-1} приводит к результату $\gamma = 1.649$ ($\varepsilon=1$), который, как это хорошо видно из приведённой выше таблицы, отличается от наиболее точного (шестипетлевого) значения $\gamma = 1.449$ примерно на 0.02.

В заключение данной работы перечислим коротко достигнутые результаты. Изучено статическое критическое поведение упрощённой теоретико-полевой модели, описывающей структурный фазовый переход в чистом фуллерите C_{60} при температуре 260 К. Анализ модели выполнен методом РГ в фиксированной ($D=3$) размерности пространства в рамках двухпетлевого приближения. Пересуммирование полученных РГ разложений для β -функций методом Паде–Бореля позволило получить достаточно точные оценки координат фиксированных точек, а также детально изучить глобальную структуру РГ потоков вблизи этих точек. Установлено, что тепловые флуктуации ПП разрушают непрерывный фазовый переход в твёрдом фуллерите, превращая его в переход первого рода. Поскольку такой переход I-го рода является слабым, т. е. близким к непрерывному фазовому переходу, система может демонстрировать почти универсальное критическое поведение в достаточно широкой области температур вблизи T_c . Такое поведение управляется некоторым набором эффективных критических индексов. Численные оценки значений индексов γ и η получены путём суммирования методом Паде–Бореля соответствующих двухпетлевых РГ разложений.

Остальные критические индексы α , β и ν вычислены на основе известных скейлинговых соотношений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Michel K.H., Copley J.D.R., Neumann D.A. // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P.2929.
- [2] Harris A.B., Sachidanandam R. // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P.4944.
- [3] Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S. // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P.2143.
- [4] Lapinskas S., Tornau E.E., Rosengren A. // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P.9372.
- [5] Rasolt M. // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P.1944.
- [6] Harris A.B. // Physica A. 1994. V. 205. P.154.
- [7] Rapcewicz K., Przystawa J. // Phys.Rev. B. 1994. V. 49. P.13193.
- [8] Antonenko S.A., Sokolov A.I. // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P.15901.
- [9] Antonenko S.A., Sokolov A.I., Varnashev K.B. // Phys. Lett. A. 1995. V. 208. P.161.
- [10] Brazovskii S.A., Dzyaloshinskii I.E. // Pis'ma y ZhETF. 1975. V. 21. P.360.
- [11] Mukamel D., Krinsky S. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P.5078.
- [12] Antonenko S.A., Sokolov A.I. // Phys. Rev. E. 1995. V. 51. P.1894.