# ПРОМЕЖУТОЧНАЯ СТЕКОЛЬНАЯ ФАЗА В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКЕ С ДИСЛОКАЦИЯМИ

### П. Н. Тимонин\*

Научно-исследовательский институт физики Ростовского государственного университета 334090, Ростов-на-Дону, Россия

Поступила в редакцию 24 марта 1999 г.

В приближении эффективного поля рассмотрены фазовые переходы в кубическом упруго-изотропном сегнетоэлектрике со случайным распределением кольцевых дислокаций. Показано, что переходу в сегнетофазу предшествует переход в фазу дипольного стекла с хаотическими спонтанными дипольными моментами элементарных ячеек, характеризуемых нелокальным параметром Эдвардса—Андерсона. Определены особенности термодинамических параметров кристалла в точках фазовых переходов.

PACS: 64.60.-i, 77.80.-e.

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

В результате многочисленных исследований различных фазовых переходов в реальных (дефектных) кристаллах обнаружено существенное влияние дефектов кристаллической структуры на характер и особенности переходов. Так, присутствие в кристалле точечных дефектов может изменить критические индексы перехода второго рода, если индекс теплоемкости идеального кристалла положителен [1, 2]. Изменение критического поведения вызывают и протяженные дефекты [3-5]. Кроме того, такие протяженные дефекты, как дислокации, могут привести к появлению локального упорядочения в своей окрестности выше температуры глобального фазового перехода второго рода в случае короткодействующих флуктуаций параметра порядка [6,7]. Как отмечено в [7], появление и рост вблизи дислокаций упорядоченных областей со случайным знаком параметра порядка должны выглядеть как размытие фазового перехода, что действительно часто наблюдается экспериментально. Наиболее просто такое размытие можно обнаружить в сегнетоэлектриках, где оно проявляется в сглаживании пика диэлектрической проницаемости. Однако выводы работ [6,7], вообще говоря, неприменимы к сегнетоэлектрикам, поскольку в них имеется обычно довольно сильное дальнодействующее диполь-дипольное взаимодействие. Вместе с тем возможность появления и в них индуцированных дислокациями неоднородных структур выше перехода в сегнетофазу представляется весьма вероятной. Качественно механизм их образования можно представить как результат подстройки направлений спонтанных локальных дипольных моментов к флуктуациям собственного электрического поля, вызванным случайными деформациями кристалла с распределенными в нем дислокациями. При этом непараллельное упорядочение локальных дипольных моментов будет более выгодным, до тех

<sup>\*</sup>E-mail: timonin@icomm.ru

пор пока спонтанная поляризация мала и проигрыш в короткодействующей энергии неоднородности не превышает выигрыша в электростатической энергии, так что неоднородные структуры могут существовать в некотором интервале температур в окрестности температуры  $T_c$  перехода в сегнетофазу в идеальном кристалле. Более того, направления поляризации в таких структурах могут оказаться скоррелированными во всем объеме кристалла вследствие дальнодействия флуктуаций поляризации. Тогда появление неоднородного распределения поляризации в окрестности  $T_c$  будет означать переход в промежуточную фазу дипольного стекла, сопровождающийся специфическими аномалиями термодинамических величин [8]. В настоящей работе мы рассмотрим в приближении эффективного поля возможность появления такой промежуточной стекольной фазы в простейшем случае упруго-изотропного кубического сегнтоэлектрика с малой концентрацией случайно распределенных кольцевых дислокаций. Оказывается, что в этом случае переходу в сегнетофазу действительно предшествует переход в фазу дипольного стекла с неоднородной спонтанной поляризацией, характеризуемой нелокальным параметром Эдвардса—Андерсона.

## 2. РЕПЛИЧНЫЙ ФОРМАЛИЗМ ДЛЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА С ДИСЛОКАЦИЯМИ

Термодинамический потенциал Гинзбурга—Ландау для кубического сегнетоэлектрика с дислокациям имеет следующий вид:

$$F = \int_{V} d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \tau \mathbf{P}^{2}(\mathbf{r}) - l^{2} \mathbf{P}(\mathbf{r}) \Delta \mathbf{P}(\mathbf{r}) \right] + \frac{u}{4} \left( \mathbf{P}^{2}(\mathbf{r}) \right)^{2} + \frac{v}{4} \sum_{i=1}^{3} P_{i}^{4} \right\} + \frac{1}{2} \int_{V} d\mathbf{r} \int_{V} d\mathbf{r}' \mathbf{P}(\mathbf{r}) \hat{D} \left( \mathbf{r} - \mathbf{r}' + \mathbf{u}(\mathbf{r}) - \mathbf{u}(\mathbf{r}') \right) \mathbf{P}(\mathbf{r}').$$
(1)

Здесь P(r) — поляризация, u(r) — атомные смещения, вызванные случайно распределенными по кристаллу кольцевыми дислокациями,

$$\tau = (T - T_c)/T_0.$$

В дальнейшем мы будем предполагать малость констант взаимодействия u и v, причем

$$u \ll v.$$
 (2)

Последнее условие означает, что переход в идеальном кристалле происходит в ромбоэдрическую сегнетофазу с изотропной диэлектрической восприимчивостью

$$\chi_{ij} = \frac{\partial P_i}{\partial E_j} = \chi \delta_{ij}.$$

Это обстоятельство существенно упрощает вычисления в сегнетофазе, но не является необходимым для принципиального вывода о существовании промежуточной стекольной фазы. Далее в выражении (1)  $\hat{D}(\mathbf{r})$  — тензор диполь-дипольного взаимодействия, который в отсутствие проводников имеет вид [9, 10]

$$\hat{D}(\mathbf{r}) = -\nabla \nabla \frac{1}{r}.$$

Такой же вид  $\hat{D}(\mathbf{r})$  имеет и при наличии проводников на поверхности сегнетоэлектрика, но на расстояниях, много меньших размеров кристалла,  $r \ll L$ . В этом случае справедливо соотношение [10]

$$\int_{V} d\mathbf{r} \hat{D}(\mathbf{r}) = 0.$$
(3)

Именно этот случай, когда переход в идеальном кристалле происходит в монодоменное состояние, мы и будем рассматривать как наиболее простой. Если же проводники отсутствуют, то имеет место переход в полидоменное состояние, описание которого несколько сложнее [10].

Здесь мы также рассматриваем лишь влияние дислокаций на дальнодействующее взаимодействие, полагая это влияние на короткодействующее взаимодействие много меньшим ввиду обычной малости электрострикционных констант.

В дальнейшем нас будет интересовать поведение корреляторов поляризации на больших расстояниях, много больших параметра решетки *a* и среднего размера дислокационных петель, так как именно оно определяет особенности термодинамических величин в окрестности фазовых переходов. На таких расстояниях от дислокационных петель смещения **u**(**r**) представляются в виде [11]

$$u_i(\mathbf{r}) = -\sum_m \partial_k C_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) \lambda_{jklm} d^a_{lm}, \qquad (4)$$

где вектор  $\mathbf{r}_m$  определяет положение отдельной дислокации,  $\lambda_{jklm}$  — тензор упругих модулей кристалла,  $C_{ij}(\mathbf{r})$  — функция Грина уравнений теории упругости,

$$\lambda_{iklm}\partial_k\partial_l C_{mj}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})\delta_{ij},$$

а  $d_{lm}^a = S_l^a b_m^a$  — дислокационный момент замкнутой дислокации,  $\mathbf{S} = \int_{S_D} d\mathbf{S}, S_D$  —

поверхность, натянутая на контур дислокации, **b** — ее вектор Бюргерса.

Нам необходимо получить парные корреляторы фурье-образов поляризации

$$\mathbf{P}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_{V} d\mathbf{r} \, \mathbf{P}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

усредненные по положениям дислокаций и их моментам, а именно: неоднородную восприимчивость

$$G_{ij}(\mathbf{k}) = \beta \langle P_i(\mathbf{k}) P_j(-\mathbf{k}) \rangle_{T,C}, \quad \beta = T^{-1},$$
(5)

и нелокальный параметр Эдвардса—Андерсона

$$Q_{ij}(\mathbf{k}) = \langle \langle P_i(\mathbf{k}) \rangle_T \langle P_j(-\mathbf{k}) \rangle_T \rangle_C.$$
(6)

Здесь индекс T означает гиббсовское усреднение с потенциалом F из (1), а индекс C — усреднение по случайному распределению дислокаций.

Кроме того, необходимо найти среднее значение плотности равновесного термодинамического потенциала

$$\Phi = -\frac{T}{V}\ln\langle Z\rangle_C, \quad Z = \int D\mathbf{P}e^{-\beta F}.$$

Мы воспользуемся методом реплик [8], согласно которому

$$\Phi = -\frac{T}{V} \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \ln \langle Z^n \rangle_C, \tag{7}$$

т.е. нужно усреднить  $Z^n$  при целых n, продолжить полученное выражение на нецелые n и затем устремить n к нулю. При целых n с учетом (2) получим

$$\langle Z^n \rangle = \int D\mathbf{P}_{\alpha}(\mathbf{r}) e^{-\beta F_n},$$
 (8)

$$F_n = \sum_{\alpha=1}^n \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} \left[ \tau \mathbf{P}_{\alpha}^2(\mathbf{r}) - l^2 \mathbf{P}_{\alpha}(\mathbf{r}) \Delta \mathbf{P}_{\alpha}(\mathbf{r}) \right] + \frac{v}{4} \sum_{i=1}^3 P_{i\alpha}^4 \right\} + F_{dis}, \tag{9}$$

$$F_{dis} = -T \ln \left\langle \exp \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \frac{1}{2T} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \mathbf{P}_{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{D} \left( \mathbf{r} - \mathbf{r}' + \mathbf{u}(\mathbf{r}) - \mathbf{u}(\mathbf{r}') \right) \mathbf{P}_{\alpha}(\mathbf{r}') \right) \right\rangle_{C}.$$
 (10)

При интересующих нас больших  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$  и малой плотности числа дислокаций,  $n_{dis} = N_{dis}/V$ , убывающие на больших расстояниях величины  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  будут малы, так что, разлагая  $F_{dis}$  по малым  $\mathbf{u}(\mathbf{r}) - \mathbf{u}(\mathbf{r}')$ , получим

$$F_{dis} = -\frac{1}{2VT} \sum_{m} \int d\mathbf{r}_{m} \left\langle \left( \sum_{\alpha=1}^{n} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \mathbf{P}_{\alpha}(\mathbf{r}) \left[ \mathbf{u}_{m}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{m}) \nabla \right] \hat{D}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{P}_{\alpha}(\mathbf{r}') \right)^{2} \right\rangle_{C}.$$
 (11)

Здесь  $\mathbf{u}_m(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m)$  — вклад в атомные смещения от одной дислокации, см. (4), а усреднение по положениям дислокаций сводится, ввиду предполагаемой малости  $n_{dis}$ , к интегрированию по векторам  $\mathbf{r}_m$ , определяющим их положение.

Переходя в (11) к фурье-образам и интегрируя по  $\mathbf{r}_m$ , получим окончательно

$$F_{dis} = -\frac{n_{dis}}{2T} V^2 \sum_{\alpha,\beta=1}^n \int \frac{d\mathbf{k} \, d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2}{(2\pi)^9} \left[ \mathbf{P}_\alpha(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1) \hat{D}(\mathbf{q}_1) \mathbf{P}_\alpha(\mathbf{q}_1) \right] \times \\ \times \left[ \mathbf{P}_\beta^*(\mathbf{k} - \mathbf{q}_2) \hat{D}(\mathbf{q}_2) \mathbf{P}_\beta^*(\mathbf{q}_2) \right] \left[ \mathbf{q}_1 \hat{\Delta}(\mathbf{k}) \mathbf{q}_2 \right],$$
(12)

$$\Delta_{ij}(\mathbf{k}) = C_{ik}(\mathbf{k})k_l \langle \tilde{d}_{kl} \tilde{d}_{mn} \rangle_C k_m C_{mj}(\mathbf{k}), \quad \tilde{d}_{ij} = \lambda_{ijkl} d_{kl}, \qquad (13)$$

$$D_{ij}(\mathbf{k}) = 4\pi k_i k_j / k^2, \quad kL \gg 1.$$
 (14)

Отметим, что интегрирование по волновым векторам в (12) ведется по первой зоне Бриллюэна,  $|k_i| < \pi/a$ .

Естественно рассматривать такие распределения дислокационных моментов, которые сохраняют в среднем кубическую симметрию кристалла, так что тензор среднеквадратичных дислокационных моментов  $\langle d_{ij}d_{kl}\rangle_C$ , а вместе с ним и тензор  $\langle \tilde{d}_{kl}\tilde{d}_{mn}\rangle_C$ , входящий в (13), будут иметь те же ненулевые компоненты, что и  $\lambda_{ijkl}$ . Полагая кристалл упруго-изотропным, так что

$$\lambda_{ijkl} = \lambda_{12}\delta_{ij}\delta_{kl} + \frac{1}{2}(\lambda_{11} - \lambda_{12})(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}),$$

$$\langle d_{ij}d_{kl}\rangle = \langle d_{11}d_{22}\rangle \delta_{ij}\delta_{kl} + \frac{1}{2}\langle d_{11}^2 - d_{11}d_{22}\rangle (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}),$$

величину  $\Delta_{ij}(\mathbf{k})$  можно представить в виде

$$\Delta_{ij}(\mathbf{k}) = \Delta_l k^{-4} k_i k_j + \Delta_t k^{-4} (k^2 \delta_{ij} - k_i k_j),$$
  
$$\Delta_l = \langle d_{11}^2 \rangle \left( 1 + 2 \frac{\lambda_{12}^2}{\lambda_{11}^2} \right) + 2 \langle d_{11} d_{12} \rangle (2\lambda_{11} + \lambda_{12}) \frac{\lambda_{12}}{\lambda_{11}^2},$$
  
$$\Delta_t = 2 \langle d_{11}^2 - d_{11} d_{22} \rangle.$$

Чтобы иметь возможность описания перехода в сегнетофазу, введем термодинамический потенциал  $\Phi_n(\mathbf{P}_{\alpha})$ , получающийся из  $F_n$  выделением в нем однородной поляризации  $\mathbf{P}_{\alpha} \equiv V^{-1} \int_{V} d\mathbf{r} \mathbf{P}_{\alpha}(\mathbf{r})$ :

$$\Phi_{n}(\mathbf{P}_{\alpha}) = -\frac{T}{V} \ln \prod_{\alpha=1}^{n} d\mathbf{P}_{\alpha} \delta \left( \mathbf{P}_{\alpha} - V^{-1} \int_{V} d\mathbf{r} \, \mathbf{P}_{\alpha}(\mathbf{r}) \right) \exp(-\beta F_{n}), \tag{15}$$

так что

$$\Phi = -\lim_{n \to 0} \frac{T}{nV} \ln \int \prod_{\alpha=1}^{n} d\mathbf{P}_{\alpha} \exp\left[-\beta V \Phi_{n}(\mathbf{P}_{\alpha})\right] \approx \lim_{n \to 0} n^{-1} \min_{P_{\alpha}}(\mathbf{P}_{\alpha}).$$
(16)

Отметим, что, как следует из (15), равновесное значение  $\mathbf{P}^{0}_{\alpha}$ , обеспечивающее минимум потенциала  $\Phi_{n}(\mathbf{P}_{\alpha})$ , определяет среднее значение однородной спонтанной поляризации:

$$\langle \mathbf{P} \rangle_{T,C} = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \sum_{\alpha=1}^{n} \mathbf{P}_{\alpha}^{0}.$$
 (17)

Величина  $\mathbf{P}^0_{\alpha}$  находится из уравнения состояния

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{P}_{\alpha})}{\partial \mathbf{P}_{\alpha}} = 0.$$
(18)

Полагая в (9)

 $\mathbf{P}_{\alpha}(\mathbf{r}) = \mathbf{P}_{\alpha} + \mathbf{P}_{\alpha}'(\mathbf{r}),$ 

получим

$$\Phi_{n}(\mathbf{P}_{\alpha}) = \sum_{\alpha=1}^{n} \left( \frac{\tau}{2} \mathbf{P}_{\alpha}^{2} + \frac{v}{4} \sum_{i=1}^{3} P_{i\alpha}^{4} \right) - \frac{T}{V} \ln \int D\mathbf{P}_{\alpha}'(\mathbf{r}) \exp\left[ -\beta F_{n} \left( \mathbf{P}_{\alpha}, \mathbf{P}_{\alpha}'(\mathbf{r}) \right)_{n} \right], \quad (19)$$

$$F_n(\mathbf{P}_{\alpha}, \mathbf{P}'_{\alpha}(\mathbf{r})) = F_n\left(\mathbf{P}'_{\alpha}(\mathbf{r})\right) + \delta F_n\left(\mathbf{P}_{\alpha}, \mathbf{P}'_{\alpha}(\mathbf{r})\right).$$
(20)

Здесь  $F_n(\mathbf{P}'_{\alpha}(\mathbf{r}))$  имеет тот же вид, что и  $F_n$  в (9), а величина  $\delta F_n$  в случае присутствия проводников (см. (3)) в низшем порядке по  $\mathbf{P}'_{\alpha}(\mathbf{k})$ , достаточном при рассмотрении области эффективного поля, равна

$$\delta F_{n} \left( \mathbf{P}_{\alpha}, \mathbf{P}_{\alpha}'(\mathbf{r}) \right) = \frac{3}{2} V \times \\ \times \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^{3}} \left( v \sum_{i,\alpha} P_{i\alpha}^{2} \left| P_{i\alpha}'^{2}(\mathbf{k}) \right| - \beta w k^{-4} \left| \sum_{\alpha=1}^{n} (\mathbf{k} \mathbf{P}_{\alpha}) \left[ \mathbf{k} \mathbf{P}_{\alpha}'(\mathbf{k}) \right] \right|^{2} \right), \quad (21)$$

где  $w \equiv (4\pi)^2 n_{dis} \Delta_l/3$ . При выводе (21) мы пренебрегли вкладом в интеграл по **k** от области  $kL \leq 1$  и воспользовались (14).

С помощью потенциала  $\Phi_n(\mathbf{P}_{\alpha})$  (15) можно найти не только равновесный термодинамический потенциал  $\Phi$  (16) и среднюю спонтанную поляризацию (17), но и другие термодинамические величины. Так, определение коррелятора

$$G_{ij}^{\alpha\beta} = \beta V \langle P_{i\alpha} P_{j\beta} \rangle_{\Phi_n} = \left[ \frac{\partial^2 \Phi_n(\mathbf{P}_\alpha)}{\partial P_{i\alpha} \partial P_{j\beta}} \right]^{-1}$$
(22)

дает возможность найти однородную диэлектрическую восприимчивость

$$\chi_{ij} = \frac{\partial P_i}{\partial E_j} = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \sum_{\alpha=1}^n G_{ij}^{\alpha\alpha}$$
(23)

и однородный стекольный коррелятор

$$S_{ij} = V \langle \langle P_i \rangle_T \langle P_j \rangle_T \rangle_C = \int_V d\mathbf{r} \langle \langle P_i(\mathbf{r}) \rangle_T \langle P_j(0) \rangle_T \rangle_C = \lim_{n \to 0} \frac{T}{n(n-1)} \sum_{\alpha \neq \beta}^n G_{ij}^{\alpha\beta}.$$
 (24)

Кроме того, можно вычислить вклад флуктуаций поляризации в удельную теплоемкость кристалла:

$$\delta C = -T \frac{\partial^2 \Phi}{\partial T^2} \,.$$

Дифференцирование по Т первого равенства в (16) дает

$$\delta C = \lim_{n \to 0} \frac{T}{nT_0^2} \left( \frac{\partial^2 \Phi_n(\mathbf{P}_\alpha)}{\partial \tau \, \partial P_{i\alpha}} \, G_{ij}^{\alpha\beta} \frac{\partial^2 \Phi_n(\mathbf{P}_\alpha)}{\partial \tau \, \partial P_{j\beta}} - \frac{\partial^2 \Phi_n(\mathbf{P}_\alpha)}{\partial \tau^2} \right). \tag{25}$$

Сам же потенциал  $\Phi_n(\mathbf{P}_{\alpha})$  можно найти в низшем порядке по взаимодействию, вычислив при  $kL \gg 1$  репличный коррелятор

$$G_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \beta \langle P_i^{\alpha}(\mathbf{k}) P_j^{\beta}(\mathbf{k}) \rangle, \qquad (26)$$

где подразумевается гиббсовское усреднение с потенциалом  $F_n(\mathbf{P}_{\alpha}, \mathbf{P}'_{\alpha}(\mathbf{r}))$  (20) при равновесном значении  $\mathbf{P}^0_{\alpha}$ , обеспечивающем минимум  $\Phi_n(\mathbf{P}_{\alpha})$ . Действительно, дифференцируя (7) по  $\tau$ , получим

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{P}_{\alpha})}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{n} \mathbf{P}_{\alpha}^{2} + \frac{T}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^{3}} \operatorname{Tr} \hat{G}(\mathbf{k}).$$
(27)

Здесь Тг $\hat{G}(\mathbf{k})$  — след репличного коррелятора (26), рассматриваемого как матрица размерности 3*n*. Согласно (20), (21), коррелятор  $G_{ii}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  представляется в виде

$$\left[\hat{G}(\mathbf{k})^{-1}\right]_{ij}^{\alpha\beta} = \left[(\tau + l^2k^2 + 3vP_{i\alpha}^2)\delta_{ij} + D_{ij}(\mathbf{k})\right]\delta_{\alpha\beta} - 3\beta w k^{-4}k_i k_j (\mathbf{k}\mathbf{P}_{\alpha})(\mathbf{k}\mathbf{P}_{\beta}) - \Sigma_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}), \quad (28)$$

где зависимостью от  $\tau$  малой собственно-энергетической части  $\Sigma_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  можно пренебречь, так что интегрирование в (27) дает в низшем порядке по взаимодействию

$$\Phi_n(\mathbf{P}_\alpha) = \sum_{\alpha=1}^n \left( \frac{\tau}{2} \mathbf{P}_\alpha^2 + \frac{v}{4} \sum_{i=1}^3 P_{i\alpha}^4 \right) - \frac{T}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^4} \operatorname{Tr} \ln \hat{G}(\mathbf{k}).$$
(29)

Также в низшем порядке по взаимодействию из (9), (12), (20) получаем

$$\Sigma_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -3vT\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}G_{ii}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) + n_{dis}\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}\left\{\left[\mathbf{k}\hat{\Delta}(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{k}\right]D_{ik}(\mathbf{k})G_{kl}^{\alpha\beta}(\mathbf{q})D_{lj}(\mathbf{k}) + \left[\mathbf{k}\hat{\Delta}(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{q}\right]\left[D_{ik}(\mathbf{k})G_{kl}^{\alpha\beta}(\mathbf{q})D_{lj}(\mathbf{q}) + D_{ik}(\mathbf{q})G_{kl}^{\alpha\beta}(\mathbf{q})D_{lj}(\mathbf{k})\right] + \left[\mathbf{q}\hat{\Delta}(\mathbf{k}+\mathbf{q})\mathbf{q}\right]D_{ik}(\mathbf{q})G_{kl}^{\alpha\beta}(\mathbf{q})D_{lj}(\mathbf{q})\right\}.$$
(30)

Формулы (28) и (30) представляют собой уравнение для  $G_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  в области эффективного поля в случае малого взаимодействия.

Согласно (18), (28), (29), уравнение состояния для  $\mathbf{P}^0_{\alpha}$  имеет вид

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{P}_{\alpha})}{\partial P_{i\alpha}} = \tau P_{i\alpha} + v P_{i\alpha}^3 + 3T \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[ v G_{ii}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) P_{i\alpha} - \beta w k^{-4} k_i k_l G_{lm}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) k_m(\mathbf{k}\mathbf{P}_{\beta}) \right] = 0, \quad (31)$$

а для производных, входящих в (22), (25), имеем

$$\frac{\partial^2 \Phi_n(\mathbf{P}_\alpha)}{\partial \tau^2} = -\frac{T}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \operatorname{Tr} \hat{G}^2(\mathbf{k}), \qquad (32)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{P}_{\alpha})}{\partial P_{i\alpha} \partial P_{j\beta}} = (\tau + 3v P_{i\alpha}^2) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} + 3T \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[ v G_{ii}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} - \beta w k^{-4} k_i k_j k_l G_{lm}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) k_m \right],$$
(33)

$$\frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{P}_{\alpha})}{\partial P_{i\alpha} \partial \tau} \approx P_{i\alpha}.$$
(34)

Таким образом, решение уравнений (28) и (30) для  $G_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  позволит полностью описать термодинамику кристалла в области эффективного поля. Кроме того, можно найти неоднородную восприимчивость  $G_{ij}(\mathbf{k})$  (5) и нелокальный параметр Эдвардса—Андерсона  $Q_{ij}(\mathbf{k})$  (6), так как [8]

$$G_{ij}(\mathbf{k}) = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \sum_{\alpha=1}^{n} G_{ij}^{\alpha\alpha}(\mathbf{k}),$$
(35)

$$Q_{ij}(\mathbf{k}) = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n(n-1)} \sum_{\alpha \neq \beta}^{n} G_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}).$$
(36)

## 3. КОРРЕЛЯТОРЫ И УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ В ПРИБЛИЖЕНИИ ЭФФЕКТИВНОГО ПОЛЯ

Как упоминалось выше, при выполнении условия (2) в идеальном кристалле имеет место переход в ромбоэдрическую сегнетофазу. Кроме того, будем искать реплично-симметричные решения уравнений состояния (31). В соответствии с этим ниже будем полагать  $P_{\alpha i} = P$ , где, согласно (17),  $P = \langle P_i \rangle_{T,C}$ . Тогда решение уравнений (28), (30) при  $kL \gg 1$  представляется в виде суммы продольной и поперечной частей:

$$G_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = G_l^{\alpha\beta}(\mathbf{k})k^{-2}k_ik_j + G_t^{\alpha\beta}(\mathbf{k})k^{-2}(k^2\delta_{ij} - k_ik_j),$$

где  $G_s^{\alpha\beta}(\mathbf{k}), s = l, t$  имеют вид

$$\left[\hat{G}_{s}^{-1}(\mathbf{k})\right]^{\alpha\beta} = \left(\tau + 3vP^{2} + l^{2}k^{2} + 4\pi\delta_{s,l}\right)\delta_{\alpha\beta} - 3\beta wk^{-2}(\mathbf{k}\mathbf{P})^{2}\delta_{s,l} - \Sigma_{s}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$$
(37)

со следующими собственно-энергетическими частями:

$$\Sigma_{l}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -vT\delta_{\alpha\beta} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^{3}} \left[ G_{l}^{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) + 2G_{t}^{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) \right] + + (4\pi)^{2}n_{dis} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^{3}} \left[ \Delta_{l}x^{2}G_{l}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) + R(\mathbf{k},\mathbf{q})G_{t}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) \right],$$
(38)

$$\Sigma_t^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -vT\delta_{\alpha\beta} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left[ G_l^{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) + 2G_t^{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) \right] + (4\pi)^2 n_{dis} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} R(\mathbf{q}, \mathbf{k}) G_l^{\alpha\beta}(\mathbf{q}), \quad (39)$$

$$R(\mathbf{k},\mathbf{q}) = (1-x^2) \frac{\Delta_t \left[k^2 q^2 - (\mathbf{k} \mathbf{q})^2\right] + \Delta_l (k^2 + \mathbf{k} \mathbf{q})^2}{|\mathbf{k} + \mathbf{q}|^4},$$
(40)

где  $x \equiv kq/kq$ . Уравнения (37)-(40) имеют реплично-симметричные решения вида

$$G_s^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = G_s^{11}(\mathbf{k})\delta_{\alpha\beta} + G_s^{12}(\mathbf{k})(1 - \delta_{\alpha\beta}).$$
<sup>(41)</sup>

Для таких решений, согласно (35), (36), интересующие нас корреляторы  $G_{ij}(\mathbf{k})$  (5) и  $Q_{ij}(\mathbf{k})$  (6) имеют вид

$$\begin{split} G_{ij}(\mathbf{k}) &= G_l(\mathbf{k})k^{-2}k_ik_j + G_t(\mathbf{k})k^{-2}(k^2\delta_{ij} - k_ik_j), \\ Q_{ij}(\mathbf{k}) &= Q_l(\mathbf{k})k^{-2}k_ik_j + Q_t(\mathbf{k})k^{-2}(k^2\delta_{ij} - k_ik_j), \\ G_s(\mathbf{k}) &= \lim_{n \to 0} G_s^{11}(\mathbf{k}), \quad Q_s(\mathbf{k}) = T \lim_{n \to 0} G_s^{12}(\mathbf{k}). \end{split}$$

Подставляя (41) в (37)–(39) и переходя к пределу  $n \to 0$ , получим уравнения для  $G_s(\mathbf{k})$  и  $Q_s(\mathbf{k})$ , s = l, t, при  $kL \gg 1$ :

$$Q_{s}(\mathbf{k}) = G_{s}^{\prime 2}(\mathbf{k}) \left[ 3wk^{-2}(\mathbf{k}\mathbf{P})^{2}\delta_{s,l} + \Sigma_{s}^{12}(\mathbf{k}) \right], \qquad (42)$$

993

$$G_s(\mathbf{k}) = G'_s(\mathbf{k}) + \beta Q_s(\mathbf{k}), \tag{43}$$

9 **ЖЭТФ**, №3(9)

$$G'_{s}^{\prime -1}(\mathbf{k}) = \tau + 3vP^{2} + l^{2}k^{2} + 4\pi\delta_{s,l} - \Sigma_{s}^{11}(\mathbf{k}) + \Sigma_{s}^{12}(\mathbf{k}),$$
(44)

$$\Sigma_l^{11}(\mathbf{k}) = -vT \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left[ G_l(\mathbf{q}) + 2G_t(\mathbf{q}) \right] + (4\pi)^2 n_{dis} \times \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left[ \Delta_l x^2 G_l(\mathbf{q}) + R(\mathbf{k}, \mathbf{q}) G_t(\mathbf{q}) \right],$$
(45)

$$\Sigma_l^{12}(\mathbf{k}) = (4\pi)^2 n_{dis} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left[ \Delta_l x^2 Q_l(\mathbf{q}) + R(\mathbf{k}, \mathbf{q}) Q_t(\mathbf{q}) \right], \tag{46}$$

$$\Sigma_t^{11}(\mathbf{k}) = -vT \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \left[ G_l(\mathbf{q}) + 2G_t(\mathbf{q}) \right] + \frac{(4\pi)^2}{2} n_{dis} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} R(\mathbf{q}, \mathbf{k}) G_l(\mathbf{q}), \tag{47}$$

$$\Sigma_t^{12}(\mathbf{k}) = (4\pi)^2 n_{dis} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} R(\mathbf{q}, \mathbf{k}) Q_l(\mathbf{q}).$$
(48)

Будем искать сферически-симметричные решения

$$G_s(\mathbf{k}) = G_s(k), \quad Q_s(\mathbf{k}) = Q_s(k)$$

в окрестности перехода,  $\tau \to 0$ , при малых  $k \leq \sqrt{\tau/l}$ , так что выражения для собственно-энергетических частей (45)–(48) можно существенно упростить, пользуясь тем, что  $G'_t(q)$  резко растет при  $q \to 0$ . Поэтому в интегралах, где присутствует  $G'_t^2(q)$ , область интегрирования ограничена малыми  $q \leq \sqrt{\tau/l}$ , так что, в частности, имеем

$$\Sigma_{l}^{12}(k) = wB_{l} + (4\pi)^{2}n_{dis} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^{3}} R(\mathbf{k}, \mathbf{q})Q_{t}(\mathbf{q}) =$$

$$= wB_{l} + \frac{(4\pi)^{4}n_{dis}^{2}}{2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^{6}} R(\mathbf{k}, \mathbf{q})G'_{t}^{2}(q)R(\mathbf{p}, \mathbf{q})Q_{t}(p) \approx$$

$$\approx wB_{l} + \frac{(4\pi)^{4}n_{dis}^{2}}{2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^{3}} R(\mathbf{k}, \mathbf{q})G'_{t}^{2}(q) \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} R(\mathbf{p}, 0)Q_{t}(p) =$$

$$= wB_{l} \left[ 1 + (4\pi)^{2}n_{dis} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^{3}} R(\mathbf{k}, \mathbf{q})G'_{t}^{2}(q) \right], \qquad (49)$$

где величина  $B_s$  с s равным l или t есть «интегральный» параметр Эдвардса—Андерсона, соответствующий нелокальному параметру Эдвардса—Андерсона  $Q_s$ , определенному формулами (36) и (42),

$$B_s \equiv \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} Q_s(q).$$

Кроме того, при малых k

$$\Sigma_l^{11}(k) \approx \Sigma_t^{11}(k) \approx -vT(A_l + 2A_t) + wA_l,$$
(50)

 $\Sigma_t^{12}(k) \approx w B_l,\tag{51}$ 

где

$$A_s \equiv \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} G_s(q) = \Pi_{1s} + \beta B_s, \quad \Pi_{ms} \equiv \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} G'^m_s(q).$$

Таким образом,

$$G_{l}^{\prime -1}(k) = \theta + l^{2}k^{2} + 4\pi, \quad G_{t}^{\prime -1}(k) = \theta + l^{2}k^{2}, \tag{52}$$

$$\theta = \tau' + v(B_l + 2B_t + 3P^2), \quad \tau' \equiv \tau + vT(\Pi_{1l} + 2\Pi_{1t}) - w\Pi_{1l}.$$
(53)

При  $\theta \to 0$ 

$$\Pi_{1l} \approx \frac{1}{2\pi l^2 a} \left[ 1 - \frac{2a}{\sqrt{\pi} l} \arctan\left(\frac{\sqrt{\pi} l}{2a}\right) \right], \quad \Pi_{1t} \approx \frac{1}{2\pi l^2 a}.$$

Здесь а — параметр ячейки. Из (34), (40), (41) следует

$$Q_{l}(k) = G'_{l}^{2}(k)w \left[ 3k^{-2}(\mathbf{kP})^{2} + B_{l} \left( 1 + (4\pi)^{2}n_{dis} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^{3}} R(\mathbf{k}, \mathbf{q})G'_{l}^{2}(q) \right) \right], \quad (54)$$

$$Q_t(k) \approx G'_t^2(k) \Sigma_t^{12}(0) = G'_t^2(k) w B_l.$$
(55)

При  $k \gg \theta$  интеграл в (54) практически не зависит от k,

 $Q_l(k) \approx G'_l^2(k) w \left[ 3k^{-2} (\mathbf{k} \mathbf{P})^2 + B_l (1 + 2w \Pi_{2t}) \right],$ 

а при  $k \ll \theta$ 

$$Q_{l}(k) = G'_{l}^{2}(k)w\left[3k^{-2}(\mathbf{kP})^{2} + B_{l}\left(1 + \frac{4\pi n_{dis}k^{2}}{15\theta^{3/2}}\left(\Delta_{l} + 4\Delta_{t}\right)\right)\right]$$

Интегрируя (54), (55) по k и пользуясь теми же аргументами, что и при выводе (49), получим следующие уравнения состояния:

$$B_l = w \Pi_{2l} \left[ B_l (1 + 2w \Pi_{2t}) + 3P^2 \right],$$
 (56)

$$B_t = w \Pi_{2t} B_l. \tag{57}$$

При  $\theta \to 0$ 

$$\Pi_{2l} \approx \frac{1}{(2\pi)^2 l^3} \left( \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \operatorname{arctg} \left( \frac{\sqrt{\pi} l}{2a} \right) - \frac{la}{\pi l^2 + 4a^2} \right), \quad \Pi_{2t} \approx \frac{1}{8\pi l^3 \sqrt{\theta}} .$$
 (58)

Определим теперь уравнение состояния для P. Подставив в (31)  $P_{\alpha i} = P$  и используя (37), (41), имеем

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{P}_{\alpha})}{\partial P_{i\alpha}} = \tau P + v P^3 + TP \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[ v \left( G_l^{11}(k) + 2G_t^{11}(k) \right) - \beta w \left( G_l^{11}(k) + (n-1)G_t^{12}(k) \right) \right] = 0.$$

9\*

Переходя к пределу  $n \to 0$ , получим с учетом (43) уравнение состояния для однородной поляризации P:

$$\left[\tau' + v(P^2 + B_l + 2B_t)\right]P = 0.$$
(59)

Для однородной диэлектрической восприимчивости  $\chi_{ij} = \chi \delta_{ij}$  имеем из (22), (23) и (33)

$$\chi^{-1} = \tau' + v(B_l + 2B_t + 3P^2).$$
(60)

Сравнивая (60) с (53), находим

 $\chi = \theta^{-1} = G_t'(0).$ 

Для стекольного коррелятора  $S_{ij} = S\delta_{ij}$  получим из (24), (33)

$$S = \chi^2 w B_l = Q_t(0), \tag{61}$$

а для вклада в теплоемкость имеем

$$\delta C = \frac{3T\chi P^2}{T_0^2} + \frac{T^2}{2T_0^2} \left\{ \Pi_{2l} + 2\Pi_{2t} + 2\beta \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[ G'_l(k)Q_l(k) + 2G'_t(k)Q_t(k) \right] \right\} \approx \frac{3T\chi P^2}{T_0^2} + \frac{T^2}{2T_0^2} \left[ \Pi_{2l} + 2\Pi_{2t} + 2\beta w \Pi_{3l}(B_l + 2B_t + 3P^2) + 4\beta w \Pi_{3t}B_l \right].$$
(62)

При  $\theta \to 0$ 

$$\Pi_{3l} \approx \frac{1}{(4\pi l)^3} \left[ \frac{la(\pi l^2 - 4a^2)}{(\pi l^2 + 4a^2)} + \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{\pi} l}{2a} \right], \quad \Pi_{3t} \approx \frac{1}{32\pi l^3 \theta^{3/2}}.$$

Из (16), (35), (41), (43) при  $P_{\alpha i} = P$  и  $n \to 0$  получим

$$\Phi = \frac{3}{2}\tau P^2 + \frac{3}{4}vP^4 - \frac{1}{2}\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left[T\ln G_l'(k) + 2T\ln G_t'(k) + G_l'^{-1}(k)Q_l(k) + 2G_t'^{-1}(k)Q_t(k)\right].$$
(63)

Подставив сюда (52), (54), (55) и используя (56), (57), получим в низшем порядке по  $\theta$  (опуская несущественный член вида  $-T \cdot \text{const}$ ):

$$\Phi = \frac{3}{2}\tau P^2 + \frac{3}{4}vP^4 + \frac{1}{2}\theta \left[T(\Pi_{1l} + 2\Pi_{1t}) + B_l + 4B_t\right] - \frac{1}{2}B_l(\Pi_{1l}\Pi_{2l}^{-1} + 2w\Pi_{1t}) - \frac{a}{3l}T\Pi_{1t}\theta^{3/2}.$$
 (64)

Окончательные результаты для термодинамических параметров кристалла получаются подстановкой в (60)–(64) решений уравнений (56), (57), (59), для которых  $\chi > 0$ .

## 4. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Возможные фазы в рассматриваемом сегнетоэлектрике с дислокациями определяются типами возможных решений уравнений состояния (56), (57), (59). Параэлектрической фазе соответствует тривиальное решение  $B_l = B_t = P = 0$ . В этой фазе  $\chi = 1/\tau'$ ,

$$\Phi_{PE} = \frac{\tau'}{2} T(\Pi_{1l} + 2\Pi_{1t}) - \frac{a}{3l} T \Pi_{1t} \tau'^{3/2},$$
(65)

а вклад флуктуаций поляризации в удельную теплоемкость имеет вид

$$\delta C_{PE} \approx \frac{T^2}{8\pi l^3 T_0^2 \sqrt{\tau'}} \,. \tag{66}$$

Эта фаза устойчива при  $\tau' > 0$ .

Фазе дипольного стекла соответствует решение с P = 0 и  $B_l, B_t \neq 0$ . В этом случае из (56) следует

$$1 = w \Pi_{2l} (1 + 2w \Pi_{2t}). \tag{67}$$

Используя предполагаемую малость w, в силу которой

$$w\Pi_{2l} \ll 1,\tag{68}$$

из (53), (57), (60), (67) получим

$$\chi \approx \left(\frac{w^2 \Pi_{2l}}{4\pi l^3}\right)^{-2} \equiv \theta_c^{-1},\tag{69}$$

$$B_l \approx w \Pi_{2l} (\theta_c - \tau') / v, \quad B_t \approx B_l / 2 w \Pi_{2l}. \tag{70}$$

Таким образом, при  $\tau' < \theta_c$  появляется положительное решение для  $B_l$  и, следовательно, положительные параметры Эдвардса—Андерсона  $Q_l(k)$  и  $Q_t(k)$ , т.е. имеет место переход в стекольную фазу. Термодинамический потенциал в этой фазе равен

$$\Phi_{DG} \approx \frac{1}{2} \theta_c T (\Pi_{1l} + 2\Pi_{1t}) - \frac{w \Pi_{1l}}{2v} (\theta_c - \tau') - \frac{a}{3l} T \Pi_{1t} \theta_c^{3/2}, \tag{71}$$

а теплоемкость

$$\delta C_{DG} \approx \frac{T^2}{8\pi l^3 T_0^2 \sqrt{\theta_c}} \left[ 1 + \frac{w^2 \Pi_{2l}(\theta_c - \tau')}{4v T \theta_c} \right].$$
(72)

Стекольная фаза устойчива во всей области своего существования  $\tau' < \theta_c$ .

Прежде чем рассмотреть переход из параэлектрической фазы в стекольную, обсудим область применимости полученных результатов. Область эффективного поля, где они справедливы, определяется условием малости флуктуационного вклада в перенормировку константы взаимодействия v [12],  $vT_c\Pi_{2t} \ll 1$ , или, полагая  $l \sim a$ ,

$$vT_c\Pi_{1s} \ll \sqrt{\theta} \,, \quad s = l, t. \tag{73}$$

Это единственное условие, так как  $F_{dis}$  (12) (и константа взаимодействия w) не перенормируется в области сильных флуктуаций, поскольку содержит две продольные фурье-компоненты поляризации с конечной восприимчивостью в точке перехода, см. первое из уравнений (52). Из (73) следует, что для того чтобы интересующая нас область  $\theta \sim \theta_c$  принадлежала области эффективного поля, необходимо выполнение условия

$$vT_c \ll w.$$
 (74)

В этом случае  $\Phi_{DG} < \Phi_{PE}$  при всех  $\tau' < \theta_c$ , так что фазовый переход в стекольную фазу будет переходом второго рода в точке  $\tau' = \theta_c$ .



Температурная зависимость термодинамических величин сегнетоэлектрика с дислокациями в окрестности стекольного и сегнетоэлектрического переходов: 1— обратная диэлектрическая восприимчивость  $\theta = \chi^{-1}$ ; 2— теплоемкость; 3—  $B_t$ ; 4—  $B_l$ ; 5— поляризация P

Рассмотрим далее сегнетоэлектрическую (ромбоэдрическую) фазу, которой соответствует решение с  $P \neq 0$  и  $B_l$ ,  $B_t \neq 0$ . В этой фазе выполняются следующие соотношения:

$$\theta = 2vP^2,\tag{75}$$

$$B_l = w \Pi_{2l} (\theta - \tau') / v, \tag{76}$$

а обратная восприимчивость  $\theta$  удовлетворяет уравнению

$$\theta^{3/2} + 2\theta_c^{1/2}\theta + 2\tau'(\theta^{1/2} - \theta_c^{1/2}) = 0.$$
<sup>(77)</sup>

При  $\tau' < -\mu \theta_c \equiv \tau_0$ ,  $\mu = [(3993)^{1/2} + 59] / 16 \approx 7.637$ , это уравнение имеет два решения, удовлетворяющих условию  $\theta > \tau'$ , обеспечивающему положительность  $B_l$ , см. (76). В окрестности  $\tau_0$  они имеют вид

$$\theta_{\pm} = \theta_0 \pm \sigma \sqrt{\theta_0(\tau_0 - \tau')}, \quad \theta_0 \equiv v \theta_c, \quad v = \frac{4}{9} \left[ \left( 1 + \frac{45}{8} \mu \right)^{1/3} - 1 \right]^2 \approx 2.782,$$

$$\sigma = \left(1 + \frac{45}{8}\mu\right)^{-2/3} \sqrt{2(\mu^2 - 2)} \approx 0.866$$

При  $\tau' \ll -\theta_c$  большее из этих решений ( $\theta_+$ ) стремится к  $-2\tau'$ , а меньшее ( $\theta_-$ ) — к  $\theta_c$ . С учетом условия (74) потенциал сегнетофазы имеет вид

$$4v\Phi_{FE}\approx(\theta+2\tau')(w\Pi_{1l}-4w^{2}\Pi_{2l}\Pi_{1t})+\tau'\left(3\theta-4\sqrt{\theta_{c}\theta}\right)+4\sqrt{\theta_{c}\theta^{3}}+\frac{3}{4}\theta^{2}.$$

Сравнение его при  $\theta = \theta_{\pm}$  с  $\Phi_{DG}$  показывает, что при  $\tau' \approx -2w\Pi_{1l} \equiv \tau_p$  имеет место фазовый переход первого рода в сегнетофазу, соответствующую решению  $\theta_+$ . При  $\tau' < \tau_p$  имеем  $\theta_+ \approx -2\tau' = \chi^{-1}$ , так что

$$P = \sqrt{-\frac{\tau'}{v}}, \quad B_l = \frac{w}{v} \Pi_{2l}(-3\tau'), \quad B_t = \frac{3}{2v} \sqrt{-\frac{\theta_c \tau'}{2}},$$
$$\delta C \approx \frac{3T}{2vT_0^2} + \frac{T^2}{T_0^2 8\pi l^3 \sqrt{-2\tau'}} \left(1 + \frac{3w^2 \Pi_{2l}}{4vT}\right).$$

Температурная зависимость полученных термодинамических величин в окрестности стекольного и сегнетоэлектрического перехода изображена схематически на рисунке.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обсудим некоторые качественные особенности фазы дипольного стекла в сегнетоэлектрике с дислокациями и возможности ее экспериментального исследования. С точки зрения теории, ее наиболее существенной особенностью является появление в этой фазе нелокального параметра Эдвардса—Андерсона  $Q_{ij}(\mathbf{k}) = \langle \langle P_i(\mathbf{k}) \rangle_T \langle P_j(-\mathbf{k}) \rangle_T \rangle_C$ . В существующих моделях стекольных переходов  $Q_{ij}(\mathbf{k})$  не зависит от  $\mathbf{k}$  [8], что означает отсутствие корреляций между появляющимися в стекольной фазе спонтанными локальными дипольными моментами:

$$Q_{ij}(\mathbf{r}) = Q_{ij}\delta(\mathbf{r}).$$

В рассматриваемом же случае такие корреляции присутствуют и простираются на расстояния порядка продольного и поперечного радиусов корреляций, см. (54), (55),

$$\xi_t = l/\sqrt{\theta}$$
,  $\xi_l = l/\sqrt{\theta + 4\pi}$ .

Так как  $\xi_t \gg a$ , то можно ожидать появления в стекольной фазе областей со скоррелированной вихревой (поперечной) поляризацией размерами порядка  $\xi_t$ . Существование таких областей должно проявляться, в частности, в диффузном рассеянии рентгеновских лучей и нейтронов, описываемом неоднородной восприимчивостью  $G_{ij}(\mathbf{k})$ . Согласно (42), (43), в стекольной фазе появляется вклад в  $G_t(k) = G'_t(k) + Q_t(k)$ , пропорциональный квадрату лоренциана с полушириной  $\xi_t^{-1}$ . Экспериментальное наблюдение такого эффекта позволит установить точку перехода в фазу дипольного стекла и определить температурную зависимость величины  $B_l$ , играющей роль параметра порядка для этого перехода. Отметим, что вместо  $B_l$  можно рассматривать и обычный параметр порядка Эдвардса—Андерсона

$$Q = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \operatorname{Tr} \hat{Q}(\mathbf{k}) = B_l + 2B_t = B_l(1 + 2w\Pi_{2t}).$$

Вообще говоря, реплично-симметричное описание стекольной фазы с помощью одного параметра порядка может оказаться неадекватным в силу репличной неустойчивости [8]. Здесь мы не проверяли репличную устойчивость полученных решений, что в рассматриваемой модели может представлять отдельную, довольно сложную задачу. Нашей целью было лишь продемонстрировать принципиальную возможность существования промежуточной стекольной фазы в сегнетоэлектрике с дислокациями. В силу указанных соображений, полученные температурные зависимости восприимчивостей имеют предварительный качественный характер, демонстрируя те качественные особенности, к которым может привести наличие промежуточной стекольной фазы, в частности, сглаживание диэлектрических аномалий.

Отметим также, что помимо рассмотренных нами сферически-симметричных решений для  $G_s(\mathbf{k})$  и  $Q_s(\mathbf{k})$  возможны также решения с угловой зависимостью этих величин, определяемой одной из сферических гармоник  $Y_{lm}$ . Вообще говоря, такие решения из-за дополнительной неоднородности должны иметь более высокий термодинамический потенциал и быть метастабильными, однако строгое изучение этого вопроса требует довольно сложного дополнительного исследования. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 98-02-18069 и № 97-02-17878).

## Литература

- 1. A. B. Harris and T. C. Lubensky, Phys. Rev. Lett. 33, 1540 (1974).
- 2. Д. Е. Хмельницкий, ЖЭТФ 68, 1960 (1975).
- 3. С. Л. Гинзбург, ЖЭТФ 73, 1961 (1977).
- 4. С. Н. Дороговцев, ЖЭТФ 80, 2053 (1981).
- 5. А. Л. Корженевский, ФТТ 28, 1324 (1986).
- 6. В. М. Набутовский, Б. Я. Шапиро, ЖЭТФ 75, 948 (1978).
- И. М. Дубровский, М. А. Кривоглаз, ЖЭТФ 77, 1017 (1979).
- 8. K. Binder and A. P. Young, Rev. Mod. Phys. 58, 801 (1986).
- 9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Электродинамика сплошных сред, Наука, Москва (1982), гл. 2.
- 10. П. Н. Тимонин, ЖЭТФ 110, 914 (1996).
- 11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Теория упругости, Наука, Москва (1965), гл. 4.
- А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, Флуктуационная теория фазовых переходов, Наука, Москва (1982), гл. 10.