

ФЛУКТУАЦИИ В ПАРАФАЗЕ НЕСОБСТВЕННЫХ СЕГНЕТОЭЛАСТИКОВ С УЧЕТОМ КОСВЕННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ЧЕРЕЗ ПОЛЕ УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ

А. С. Юрков*

Поступила в редакцию 13 февраля 2004 г.

В работе теоретически исследуется влияние косвенных взаимодействий через поле упругих деформаций на температурные зависимости двухточечного коррелятора параметра порядка несобственного сегнетоэластика. При этом учитывается как взаимодействие флуктуаций в разных пространственных точках между собой, так и их взаимодействие с дефектными упругими полями. Последние учитываются с помощью феноменологического поля источников дефектных упругих полей. Анализ проводится на основе диаграммных разложений с последующим переходом к уравнению Дайсона. Предложено приближенно решать уравнение Дайсона непertурбативным образом, используя анзац для точной двухточечной функции Грина вида $G_{int}(\mathbf{k}) = T/[\alpha_{ij}(\tau)k_i k_j + \beta(\tau)]$. Такой подход позволяет свести задачу к решению системы алгебраических нелинейных уравнений, которая может быть эффективно решена численными методами. Совокупность сделанных приближений эквивалентна теории среднего поля, которая, однако, в данном случае не сводится к теории Гинзбурга–Ландау в силу существенно нелокального характера косвенного взаимодействия через поле упругих деформаций. Приводятся результаты численных расчетов применительно к бездефектному кристаллу Hg_2Cl_2 , для которого показано, что параметры дисперсии α_{ij} приобретают существенную температурную зависимость в области температур, значительно превышающей ширину критической области данного кристалла.

PACS: 05.40.-a, 63.70.+h, 77.80.-e

1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что в системах, испытывающих непрерывный фазовый переход, в частности в несобственных сегнетоэластиках¹⁾, вблизи темпера-

*E-mail: fitec@omskcity.com

¹⁾ В расширенной трактовке несобственным сегнетоэластиком можно называть любой кристалл, в котором при структурном фазовом переходе возникает спонтанная деформация, причем сама деформация не является параметром порядка. При этом, благодаря стрикционной связи поляризации и деформации, сегнетоэлектрики оказываются также и несобственными сегнетоэластиками в широком смысле слова. Однако обычно под сегнетоэластиками подразумевают лишь кристаллы, в которых при структурном фазовом переходе не возникает электрическая поляризация. Именно в этом узком смысле слова используется термин «несобственный сегнетоэластик» в данной работе, так как в случае сегнетоэлектриков, одновременно с рассмотрением взаимодействия флуктуаций через возникающую деформацию, требуется учет их взаимодействия через возникающее в сегнетоэлектриках макроскопическое электрическое поле, что находится за рамками данной работы.

туры перехода T_c резко возрастают флуктуации степеней свободы, соответствующих параметру порядка. Считается, что поведение этих флуктуаций может быть описано в гауссовом приближении (см., например, [1]) в рамках теории Гинзбурга–Ландау, если при этом исключить узкий интервал температур, непосредственно примыкающий к T_c (критическая область). Согласно этой теории, пространственный фурье-образ одновременного коррелятора флуктуаций представляет собой лоренциан с амплитудой, пропорциональной $(T - T_c)^{-1}$, и шириной, пропорциональной $(T - T_c)^{1/2}$.

В то же время в последние годы был проведен ряд экспериментов по достаточно прямому наблюдению флуктуаций параметра порядка в сегнетоэластиках при $T > T_c$ с помощью диффузного рассеяния рентгеновского излучения [2, 3], в которых указанные выше зависимости, вообще говоря, экспериментально не подтверждаются. Существенно, что это происходит в широкой области температур, явно

превышающий критическую область, которая, например, для Hg_2Cl_2 , согласно оценкам из [4], составляет не более 1 К.

В принципе могут быть по меньшей мере две причины, по которым результаты этих экспериментов расходятся с предсказаниями теории Гинзбурга–Ландау. Во-первых, контур линии диффузного рассеяния рентгеновских лучей может не в точности соответствовать фурье-образу коррелятора параметра порядка, например, из-за влияния случайных упругих деформаций, неизбежно присутствующих в сегнетоэластиках. Во-вторых, поведение флуктуаций параметра порядка может отклоняться от предсказаний указанной теории.

Одной из причин, по которым можно ожидать отклонений от теории Гинзбурга–Ландау в поведении флуктуаций в несобственных сегнетоэластиках, может быть косвенное взаимодействие флуктуаций в разных пространственных точках через поле упругих деформаций кристалла. Такое взаимодействие существенно нелокально, что явно не соответствует локальному характеру разложения термодинамического потенциала, обычно используемого в указанной теории.

Важно подчеркнуть, что нелокальные члены в разложении энергии кристалла по степеням параметра порядка, которые возникают благодаря косвенному взаимодействию, являются ангармоническими. Это затрудняет теоретический анализ и, вообще говоря, вынуждает пользоваться теми или иными аппроксимациями. Такие аппроксимации могут оказаться достаточно успешными в количественном отношении, особенно при использовании эмпирических, а не вычисленных параметров, однако в большей мере их роль заключается в описании наблюдаемых явлений на качественном уровне.

Конечно, далеко от температуры фазового перехода, когда флуктуации малы, взаимодействие через упругое поле может быть, как правило, учтено по теории возмущений. Однако хорошо известно [5], что при $T \rightarrow T_c$ эффективный параметр разложения теории возмущений растет. Поэтому достаточно близко к температуре перехода конечный порядок теории возмущений не дает даже качественно правильной картины. Вследствие этого было бы крайне желательно хотя бы частично учесть косвенное взаимодействие флуктуаций уже в нулевом приближении. Такой учет мог бы расширить область температур, в которой теория дает физически разумные зависимости наблюдаемых величин. Кроме того, могут играть роль также и упругие поля дефектов кристаллической структуры реального кристалла. Их

тоже желательно включить в описание.

Таким образом, исследование роли упругих полей в формировании коррелятора флуктуаций в сегнетоэластиках представляется актуальным. Также представляется актуальным изучить влияние упругих полей на соответствие контура диффузного рентгеновского рассеяния фурье-образу одномерного двухточечного коррелятора флуктуаций, однако этот вопрос оставлен за рамками данной работы. В работе исследуются только сами флуктуации параметра порядка, причем основное внимание уделяется лишь качественной стороне вопроса.

Структура работы следующая. Во втором разделе описывается принятая теоретическая модель. При этом учитывается как взаимодействие флуктуаций в разных пространственных точках через упругое поле, так и косвенное упругое взаимодействие флуктуирующего поля параметра порядка с дефектами кристаллической структуры. Последние описываются феноменологически, путем введения случайного поля источников упругих деформаций. Здесь же вводится диаграммная техника, которая используется в дальнейшем. В третьем разделе вводится уравнение Дайсона для двухточечного коррелятора флуктуаций, которое решается непертурбативным образом с использованием анзаца, имеющего в \mathbf{k} -представлении вид

$$G_{int}(\mathbf{k}) = T/[\alpha_{ij}(\tau)k_i k_j + \beta(\tau)].$$

Использованное при этом приближение эквивалентно теории среднего поля, которое, однако, в данном случае не сводится к теории Гинзбурга–Ландау в силу нелокального характера взаимодействий. В результате путем численного решения полученной в итоге системы нелинейных алгебраических уравнений на примере бездефектного кристалла Hg_2Cl_2 показывается, что в отличие от теории Гинзбурга–Ландау в этом случае кроме температурной зависимости параметра β возникает достаточно сильная зависимость параметров дисперсии α_{ij} . В четвертом разделе обсуждаются полученные результаты.

2. РАЗЛОЖЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА И ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА

Интересуясь лишь качественной стороной вопроса, в данной работе мы ограничимся рассмотрением случая однокомпонентного параметра порядка η . Запомним, что такое рассмотрение может быть исполь-

зовано и для кристаллов с многокомпонентным параметром порядка, если считать, что каждая компонента η флуктуирует независимо, что представляется вполне разумным первым приближением. Строгое же обобщение теории на случай многокомпонентного параметра порядка может быть сделано достаточно прямым образом при необходимости.

В разложении термодинамического потенциала по степеням пространственно неоднородного параметра порядка η мы учтем гармонические (гауссовы) члены, ангармонизм четвертого порядка по η , взаимодействие параметра порядка с полем упругих деформаций, а также взаимодействие упругих деформаций с дефектами кристаллической структуры. Последнее мы будем описывать, вводя случайное поле источников упругих напряжений σ_{ij} . Очевидно, что в случае точечных дефектов поле σ_{ij} δ -коррелировано.

В соответствии со сказанным запишем разложение термодинамического потенциала Φ в виде

$$\Phi = \Phi_2 + \Phi_{el} + \Phi_{def} + \Phi_4 + \Phi_{int}. \quad (1)$$

Слагаемые в (1) задаются следующими формулами:

$$\Phi_2 = \frac{1}{2} \int (\lambda_{ij} \eta_{,i} \eta_{,j} + \tau \eta^2) d^3 \mathbf{r}, \quad (2)$$

$$\Phi_{el} = \frac{1}{2} \int C_{ijkl} u_{i,j} u_{k,l} d^3 \mathbf{r}, \quad (3)$$

$$\Phi_{def} = \int \sigma_{ij} u_{i,j} d^3 \mathbf{r}, \quad (4)$$

$$\Phi_4 = \int g \eta^4 d^3 \mathbf{r}, \quad (5)$$

$$\Phi_{int} = \int f_{ij} \eta^2 u_{i,j} d^3 \mathbf{r}, \quad (6)$$

где индексы нумеруют пространственные компоненты, индекс после запятой обозначает частную производную по соответствующей пространственной координате, по повторяющимся индексам подразумевается суммирование, η — параметр порядка, u_i — компоненты упругих смещений, C_{ijkl} — тензор упругих модулей, λ_{ij} — параметры дисперсии, g и f_{ij} — параметры взаимодействий.

Дополнительного комментария требует параметр τ . В теории Ландау без учета флуктуаций обычно полагают $\tau \propto (T - T_c)$. При учете взаимодействия флуктуаций в рамках теории среднего поля возникает поправка к этому члену, пропорциональная в главном приближении T . Тогда можно считать τ отрицательной величиной, не зависящей от температуры, и с учетом флуктуационной поправки получить

$\tau \propto (T - T_c)$, как в первоначальной феноменологической теории Ландау.

Существенно, однако, что совершенно аналогичным образом в температурную зависимость эффективного параметра τ вносят также оптические фононные моды кристалла, не учтенные в потенциале (1). Поэтому, чтобы феноменологически учесть их влияние, мы будем считать, что $\tau \propto (T - T_{c0})$, где T_{c0} — некая «затравочная» температура фазового перехода, которая выше реальной температуры фазового перехода кристалла.

Очевидно, что с учетом взаимодействий интересующая нас корреляционная функция определяется через континуальный интеграл:

$$G_{int}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\int \eta(\mathbf{r}) \eta(\mathbf{r}') e^{-\Phi/T} \mathcal{D}\eta \mathcal{D}u}{\int e^{-\Phi/T} \mathcal{D}\eta \mathcal{D}u}. \quad (7)$$

Подчеркнем, что формула (7) определяет коррелятор при детерминированном поле σ_{ij} . Реальные физические величины определяются этим коррелятором, усредненным по множеству реализаций поля σ_{ij} . Важно, что усреднять по σ_{ij} необходимо именно после вычисления континуальных интегралов. Если бы в (7) не было континуального интеграла в знаменателе, то можно было бы усреднить непосредственно (7). Наличие знаменателя не позволяет это сделать. Одним из методов, позволяющих усреднять выражения типа (7), является известный метод реплик (см., например, [6]). Однако в рамках теорий, основанных на диаграммных разложениях, метод реплик эквивалентен усреднению непосредственно диаграмм. Хорошо известно, что знаменатель в выражениях типа (7) приводит лишь к исчезновению несвязанных диаграмм, так что никаких существенных сложностей при таком подходе не возникает и применения метода реплик не требуется.

Поскольку континуальный интеграл по $\mathcal{D}u$ в (7) гауссов, континуальное интегрирование по $\mathcal{D}u$ осуществляется точно, что дает формулу, аналогичную (7), с тем отличием, что отсутствует интегрирование по $\mathcal{D}u$, а вместо потенциала (1) фигурирует эффективный потенциал:

$$\Phi_{eff} = \Phi_2 + \Phi_4 + \Phi_u + \Phi_{def-eff} + \Phi_{def-def}, \quad (8)$$

где Φ_u описывает косвенное взаимодействие флуктуаций друг с другом через поле упругих деформаций, $\Phi_{def-eff}$ — аналогичное взаимодействие параметра порядка с дефектами, $\Phi_{def-def}$ — упругое взаимодействие дефектов друг с другом. Последнее сла-

гаемое несущественно для дальнейшего, и мы будем его опускать.

Косвенные взаимодействия представляются выражениями

$$\Phi_u = \int \eta^2(\mathbf{r})U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\eta^2(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}', \quad (9)$$

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}f_{ij}R_{ijkl}(\mathbf{r})f_{kl}, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{def-eff} &= \\ &= \int \eta^2(\mathbf{r})f_{ij}R_{ijkl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\sigma_{kl}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}', \quad (11) \end{aligned}$$

где $R_{ijkl}(\mathbf{r})$ — упругая функция Грина, определяемая следующим образом:

$$R_{ijkl}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int k_j k_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Pi_{ik} d^3\mathbf{k}, \quad (12)$$

где $\Pi_{ij}(\mathbf{k})$ — тензор, обратный тензору $\Gamma_{ij}(\mathbf{k}) = k_n k_m C_{injm}$.

Разлагая в (7) экспоненту от членов, описывающих взаимодействие, в ряд, легко построить соответствующую диаграммную технику. В этой диаграммной технике поле σ_{ij} мы будем изображать кружком, коррелятор (пропагатор) параметра порядка в нулевом (гауссовом) приближении,

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{T}{\lambda_{ij} k_i k_j + \tau} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k}, \quad (13)$$

— сплошной линией, нелокальную вершину косвенного взаимодействия $[-T^{-1}U(\mathbf{r})]$ — волнистой линией, нелокальную вершину косвенного взаимодействия с дефектами $[-T^{-1}f_{ij}R_{ijkl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]$ — спиральной линией, локальную вершину $[-T^{-1}g]$ — точкой.

Такая диаграммная техника описывает кристалл при детерминированном поле σ_{ij} . Нам же нужны величины, усредненные по реализациям σ_{ij} . Это усреднение несколько модифицирует диаграммные правила, причем эта модификация затрагивает только диаграммы, содержащие кружки.

Для того чтобы определить диаграммную технику, соответствующую величинам, усредненным по полю σ_{ij} , обратимся к рис. 1, где показаны несколько диаграмм, содержащих элементы, затрагиваемые усреднением по σ_{ij} . Дополнительные волнистые линии и вершины четвертого порядка на диаграммах не меняют нижеследующих рассуждений.

Каждой диаграмме на рис. 1а соответствует аналитическое выражение, содержащее столько множителей σ_{ij} , сколько кружков в диаграмме. После

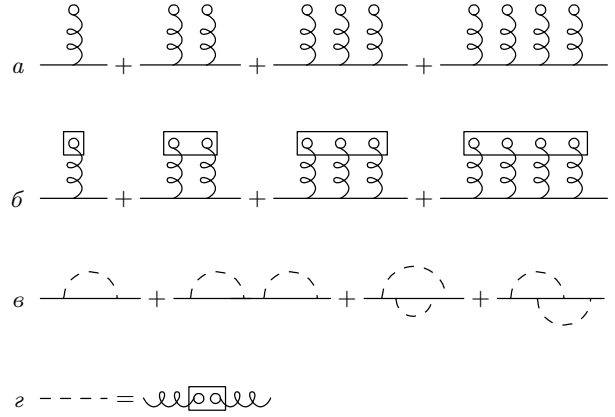


Рис. 1

усреднения по реализациям поля дефектов эти множители дадут корреляторы поля σ_{ij} . На диаграммном языке мы будем изображать эти корреляторы как кружки, соответствующие сомножителям в корреляторе, обведенные прямоугольником. В результате диаграммы рис. 1а приобретут после усреднения вид, показанный на рис. 1б.

Теперь необходимо сделать существенное предположение, заключающееся в том, что поле $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ — гауссово с нулевым средним (ненулевое среднее лишь перенормирует параметры, что несущественно для наших целей). Тогда многоточечные корреляторы поля σ_{ij} распадаются на произведения двухточечных, что, в конечном итоге, приводит к тому, что в диаграммной технике для усредненных по полю σ_{ij} величин появится дополнительная нелокальная вершина, которую мы будем изображать прерывистой линией, кружки и спиральные линии исчезнут, а рис. 1б при этом заменится на рис. 1в. На рис. 1г в графической форме показано, как выражается вершина, соответствующая прерывистой линии, через вершину косвенного взаимодействия с дефектами и двухточечный коррелятор поля σ_{ij} . Аналитически данное выражение сводится к следующему:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \int f_{ij}R_{ijkl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \frac{\langle \sigma_{kl}(\mathbf{r}'')\sigma_{nm}(\mathbf{r}''') \rangle}{T} \times \\ &\times R_{nmrs}(\mathbf{r}''' - \mathbf{r}') f_{rs} d^3\mathbf{r}'' d^3\mathbf{r}''', \quad (14) \end{aligned}$$

где $T^{-1}V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — аналитическое выражение прерывистой линии.

3. УРАВНЕНИЕ ДАЙСОНА И ЕГО ПРИБЛИЖЕННОЕ ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ

Выделяя стандартным образом класс одночастично неприводимых диаграмм (см., например, [7]), вводя точный пропагатор, изображаемый жирной линией, и перенормированные взаимодействиями вершины, изображаемые окружностями с буквой Γ внутри, можно ввести массовый оператор $\Sigma(\mathbf{k})$, а также записать уравнение Дайсона, которое в графическом виде показано на рис. 2. Точные вершины изображаются бесконечными диаграммными рядами, которые мы, однако, не будем здесь выписывать.

Если бы можно было найти точные вершины в замкнутой форме, то решение уравнения Дайсона дало бы точное решение задачи, так как итерации этого уравнения порождают весь ряд теории возмущений. Проблема заключается, однако, в том, что даже записать замкнутое уравнение для вершин не удастся. Можно лишь записать бесконечную цепочку уравнений, в которых низшие функции Грина выражаются через высшие [8]. Приведенное на рис. 2 уравнение Дайсона и есть первое уравнение этой цепочки.

Таким образом, в качестве вершин в уравнении Дайсона можно использовать или несколько первых членов соответствующего ряда или Γ можно искать, расцепив каким-либо приближенным способом указанную цепочку уравнений. Тем самым, в любом случае эффективно суммируется не весь ряд теории возмущений, но некоторая бесконечная подпоследо-

вательность членов этого ряда.

В данной работе мы ограничимся простейшим приближением для вершин, взяв их в нулевом порядке по взаимодействию. При этом, в частности, не учитывается последняя диаграмма из показанных на рис. 1в (эта диаграмма содержит поправку к вершине), но первые три, а также бесконечное число других диаграмм более высокого порядка, не содержащих поправок к вершинам, учитываются.

Для массового оператора $\Sigma(\mathbf{k})$ мы также ограничимся однопетлевым приближением, т.е. не будем учитывать последнее слагаемое на рис. 2б. Кроме того, первое, второе и третье слагаемые на том же рисунке дают одинаковые с точностью до постоянных коэффициентов выражения. Фактически действие второй и третьей диаграмм сводится к изменению значения g . Далее подразумевается, что g — это именно такая измененная константа (что представляет собой неявный учет второй и третьей диаграмм на рис. 2б).

В указанных приближениях уравнения, соответствующие диаграммам рис. 2, сводятся к соотношениям

$$G_{int} = \frac{T}{\lambda_{ij} k_i k_j + \tau - T \Sigma(\mathbf{k})}, \quad (15)$$

$$\Sigma(\mathbf{k}) = -\frac{3g}{2\pi^3 T} \int G_{int}(\mathbf{q}) d^3 \mathbf{q} - \frac{1}{\pi^3 T} \int G_{int}(\mathbf{q} + \mathbf{k}) [U(\mathbf{q}) - V(\mathbf{q})] d^3 \mathbf{q}. \quad (16)$$

В отношении физического смысла сделанных приближений можно отметить следующее. Если радиус косвенных взаимодействий устремить к нулю, то второе, третье, четвертое и пятое слагаемые в правой части уравнения рис. 2б станут абсолютно эквивалентными первому слагаемому. Но учет только такой диаграммы в нулевом приближении по поправкам к вершине приводит к самой обычной теории среднего поля, эквивалентной теории Гинзбурга–Ландау.

Таким образом, можно сказать, что сделанные приближения соответствуют теории среднего поля, модифицированной таким образом, чтобы учесть нелокальный характер косвенных взаимодействий. Физически это означает учет того, что при далекодействующем характере взаимодействия среднее поле, действующее на моды с разным значением \mathbf{k} , также оказывается разным, зависящим от \mathbf{k} .

Чтобы приближенно решить уравнение (15), представим $G_{int}(\mathbf{k})$ в виде

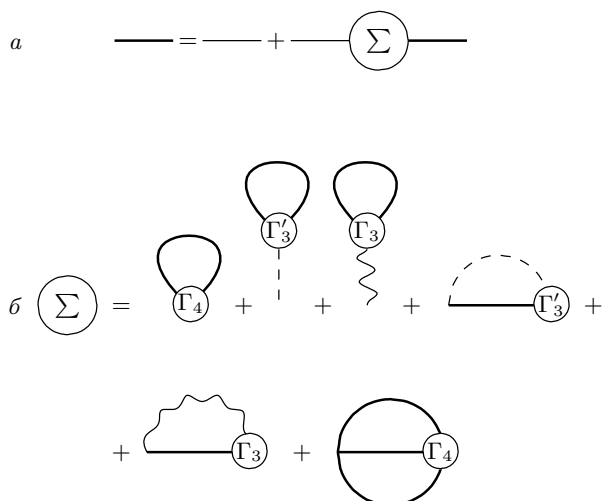


Рис. 2

$$G_{int}(\mathbf{k}) = \frac{T}{\alpha_{ij}(\tau)k_i k_j + \beta(\tau)}, \quad (17)$$

причем, с целью самосогласованности, $\Sigma(\mathbf{k})$ необходимо при этом представить в виде разложения по степеням компонент вектора \mathbf{k} с точностью до членов второго порядка. Линейные по \mathbf{k} члены при этом оказываются тождественно равными нулю в силу четности функций $U(\mathbf{q})$ и $V(\mathbf{q})$. В результате получим уравнения для функций $\alpha_{ij}(\tau)$ и $\beta(\tau)$:

$$\tau - T\Sigma(\mathbf{k} = 0) = \beta(\tau), \quad (18)$$

$$\lambda_{ij} - \frac{T}{2} \left. \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial k_i \partial k_j} \right|_{\mathbf{k}=0} = \alpha_{ij}(\tau). \quad (19)$$

Непосредственное вычисление $\Sigma(\mathbf{k} = 0)$ показывает, что соответствующие петлевые интегралы расходятся линейно на верхнем пределе — хорошо известный факт бесконечной перенормировки температуры фазового перехода при устремлении параметра обрезания в бесконечность. Поэтому интегралы должны быть обрезаны на верхнем пределе при некоем импульсе, равном Λ .

В отличие от $\Sigma(\mathbf{k} = 0)$, величина $\partial^2 \Sigma / \partial k_i \partial k_j (\mathbf{k} = 0)$ выражается сходящимся на верхнем пределе интегралом. Эта величина нечувствительна к обрезанию на больших импульсах, связанному с дискретной структурой реального кристалла. Поэтому при вычислении $\partial^2 \Sigma / \partial k_i \partial k_j (\mathbf{k} = 0)$ максимальный петлевой импульс можно считать бесконечно большим.

В результате прямых вычислений уравнение (19) преобразуется к виду

$$\alpha_{ij} = \lambda_{ij} + \frac{T}{\pi^3} \int \frac{(4\alpha_{ri}\alpha_{sj} - \alpha_{rs}\alpha_{ij})q_r q_s - \alpha_{ij}\beta}{(\alpha_{rs}q_r q_s + \beta)^3} \times [U(\mathbf{q}) - V(\mathbf{q})] d^3 \mathbf{q}. \quad (20)$$

Таким образом, система уравнений (18), (19) расцепляется. Можно искать коэффициенты α_{ij} как функции β из (20) и затем уже искать β как функцию температуры. Более того, так как β выражается через экспериментально измеряемую величину — амплитуду диффузного рефлекса, — даже не решая уравнение (18), можно уже получить информацию о температурном поведении коррелятора флуктуаций.

Уже отмечалось, что $U(\mathbf{q})$ зависит только от направления вектора \mathbf{q} . Если источники случайных упругих полей δ -коррелированы, то тем же свойством обладает и $V(\mathbf{q})$. В этом случае можно в общем виде провести интегрирование по q в полярных

координатах в (20). Для этого введем единичный вектор $\mathbf{p} = \mathbf{q}/q$ и после ряда преобразований получим

$$\alpha_{ij} = \lambda_{ij} + \frac{T}{4\pi^2 \beta^{1/2}} \int [U(\mathbf{p}) - V(\mathbf{p})] \times \frac{(3\alpha_{ri}\alpha_{sj} - \alpha_{ij}\alpha_{rs})p_r p_s}{(\alpha_{nm}p_n p_m)^{5/2}} d\Omega_{\mathbf{p}}, \quad (21)$$

где $d\Omega_{\mathbf{p}}$ — дифференциал телесного угла направленный вектора \mathbf{p} .

Система уравнений (21) является нелинейной и ее, по-видимому, можно решить только численно. При численном решении, однако, удобнее перейти к безразмерным нормированным величинам, записав

$$\alpha_{ij} = \lambda_{ij} + A \int [U(\mathbf{p}) - C^{-1}V(\mathbf{p})] \times \frac{(3\alpha_{ri}\alpha_{sj} - \alpha_{ij}\alpha_{rs})p_r p_s}{(\alpha_{nm}p_n p_m)^{5/2}} d\Omega_{\mathbf{p}}, \quad (22)$$

где

$$A = \frac{Tf^2}{4\pi^2 \beta^{1/2} \lambda^{3/2} C}, \quad (23)$$

а при вычислении $U(\mathbf{p})$ и $V(\mathbf{p})$ должны использоваться упругие модули C_{ijkl} , нормированные на размерную константу C , и параметры взаимодействия f_{ij} , нормированные на f . При этом тензоры α_{ij} и λ_{ij} в (22) нормированы на размерную константу λ . Температура в числителе правой части (23) должна быть в энергетических единицах.

Сделаем численные оценки применительно к идеальному (без дефектов) кристаллу Hg_2Cl_2 . При этом мы не преследуем в качестве цели подгонку результатов под конкретный эксперимент, а результаты экспериментальной работы [2] служат лишь ориентиром в выборе приближений. Целью является получение оценки влияния упругих взаимодействий на поведение коррелятора флуктуаций на основе параметров, полученных из экспериментов, не зависящих от экспериментов по рассеянию рентгеновского излучения. Поскольку дефектность кристалла может существенно меняться для разных образцов, естественно, учитывать дефекты при этом не имеет смысла.

Прежде всего мы хотим убедиться, что предсказываемая предложенной теорией температурная зависимость параметров дисперсии α_{ij} может наблюдаться в достаточно широком температурном интервале, существенно превышающем ширину критической области. Так что температурная зависимость параметра β нас интересует в значительно меньшей

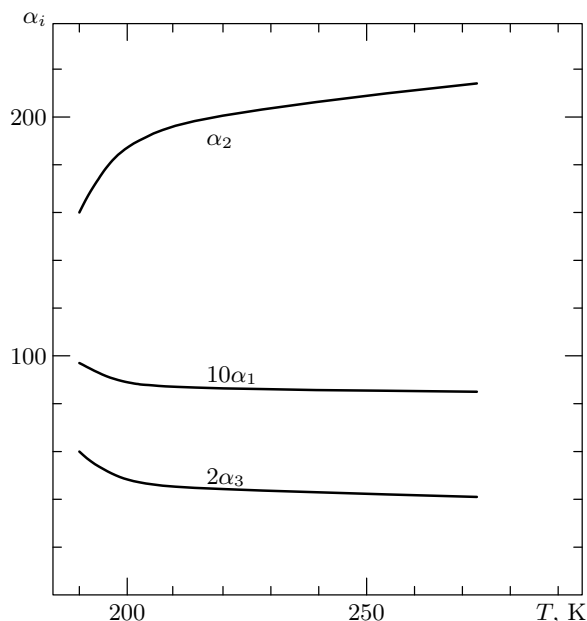


Рис. 3. Температурная зависимость параметров дисперсии α_i кристалла Hg_2Cl_2 . График для α_1 и α_3 изображен с увеличением по вертикали соответственно в масштабе 10 : 1 и 2 : 1

степени, чем температурная зависимость параметров α_{ij} . Кроме того, известно [4, 9], что для кристаллов Hg_2Cl_2 , во всяком случае в рамках феноменологической теории Ландау, члены четвертого порядка по η , перенормированные упругим взаимодействием, весьма малы. На основании этого представляется разумным в первом приближении положить $\Sigma(\mathbf{k} = 0) = \text{const}$ и, следовательно, с точностью до перенормировки температуры фазового перехода можно положить $\beta = \tau$. Температурная зависимость амплитуды диффузного рентгеновского рефлекса, полученная в [2], также соответствует этому предположению, отклоняясь от зависимости, пропорциональной $1/(T - T_c)$, только в весьма узкой окрестности T_c .

Таким образом, задача фактически сводится к решению системы уравнений (22). Результаты численного итерационного решения этих уравнений с использованием численных значений параметров из работ [4, 9–11] представлены на рис. 3. При этом тензор α_{ij} приведен к главным осям, которые повернуты на 45° относительно тетрагональных осей кристалла, и учитывалось только взаимодействие с компонентой ε_6 тензора деформаций, которое является наиболее сильным [9].

На рис. 3 параметры α_i нормированы таким обра-

зом, чтобы в отсутствие взаимодействия с упругими деформациями их численные значения были равны 8, 255 и 18, что соответствует работе [10]. Обратим внимание, что масштаб по вертикали, в котором показана температурная зависимость параметров α_1 и α_3 , увеличен соответственно в десять и в два раза по сравнению с α_2 . Графики приведены для температурного интервала 190–273 К, что лежит вне критической области кристалла Hg_2Cl_2 , которая по оценкам из [4] составляет величину порядка 0.1–1 К вблизи температуры фазового перехода $T_c = 186$ К.

На рисунке видно, что параметр α_1 меняется крайне слабо. Намного заметнее изменение параметра α_2 , который в рассматриваемом диапазоне температур изменяется более чем в 1.3 раза. Соответственно аномальное поведение ширины диффузного рефлекса должно быть более заметным при сканировании в направлении $ZE-X-EZ$, чем при сканировании в направлении $\Gamma-X-\Gamma$. Еще сильнее меняется параметр α_3 , в рассматриваемом температурном интервале — в полтора раза. Таким образом, наиболее ярко рассматриваемые эффекты должны проявляться в диффузном рентгеновском рассеянии при сканировании вдоль тетрагональной оси кристалла. К сожалению, такое сканирование в [2] сделано не было.

Подчеркнем еще раз, что приведенные выше данные получены при учете взаимодействия только с одной из компонент тензора деформаций, а именно ε_6 , которое является наиболее сильным. Также этот расчет сделан только для идеального кристалла без дефектов, так как априорные оценки коррелятора источников дефектных упругих полей затруднительны. Это оправдано для оценки минимально возможных эффектов, в то время как обстоятельное сравнение теории с экспериментом требует более детальной экспериментальной информации по сравнению с той, которая доступна из работы [2].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в данной работе показано, что учет косвенного взаимодействия флуктуаций параметра порядка несобственных сегнетоэластиков через поле упругих деформаций, во всяком случае для кристалла Hg_2Cl_2 , радикально меняет характер температурного поведения фурье-образа коррелятора флуктуаций. Вместо не зависящих от температуры коэффициентов при \mathbf{k}^2 в соответствующем лоренциане возникают коэффициенты при \mathbf{k}^2 , существенно зависящие от температуры, причем это происхо-

дит в температурном интервале, в котором применимо описание в рамках теории среднего поля. Естественно, это приведет к тому, что поведение ширины линии диффузного рентгеновского рассеяния не будет описываться простой степенной зависимостью. Можно предположить, что полученная в работе [2] степенная зависимость для ширины рефлекса является артефактом способа обработки экспериментальных данных, либо в эксперименте играли существенную роль процессы, которые здесь не учитывались.

Следует также отметить, что в предложенной теории поведение амплитуды диффузного рентгеновского рефлекса вполне может соответствовать теории Гинзбурга–Ландау и описываться степенной зависимостью с показателем степени -1 в полном соответствии с работой [2].

Также необходимо сказать, что в динамических экспериментах по рассеянию нейтронов [10] и в мандельштам-бриллюэновском рассеянии света [4] не наблюдалось признаков температурной зависимости параметров дисперсии в соответствующем лоренциане. Однако в таких экспериментах фактически измеряется достаточно высокочастотная компонента временного фурье-образа коррелятора флуктуаций $\langle \eta(t, \mathbf{r}) \eta(t', \mathbf{r}') \rangle$. Иными словами, в таких экспериментах играют роль только весьма быстрые флуктуации. Учитывая, что упругие деформации соответствуют медленным движениям системы, не приходится ожидать, что температурное поведение высокочастотной части флуктуаций будет такое же, как температурное поведение одновременного коррелятора, исследованного в данной работе. В то же время диффузное рассеяние рентгеновского излучения, когда частота рассеянного фотона не регистрируется, описывается именно одновременным коррелятором, температурные зависимости параметров которого, как здесь показано, при учете упругих взаимодействий отличаются от предсказаний теории Гинзбурга–Ландау.

В то же время окончательные выводы относительно роли рассмотренных здесь процессов в реальных кристаллах Hg_2Cl_2 требуют постановки более детальных экспериментов и, прежде всего, изучения поведения ширины диффузного рентгеновского рефлекса при сканировании по тетрагональной оси, где можно ожидать наиболее яркого проявления эффектов, рассмотренных в данной работе. Представляет также интерес экспериментальное ис-

следование диффузного рентгеновского рассеяния на кристаллах с различной степенью дефектности. В кристаллах с дефектами можно ожидать более яркого проявления эффектов, аналогичных рассчитанным в данной работе для бездефектного кристалла Hg_2Cl_2 , так как второе слагаемое в квадратных скобках уравнения (22), пропорциональное концентрации дефектов, в значительной степени аналогично первому слагаемому, описывающему упругое взаимодействие в бездефектном кристалле.

Автор благодарит Ю. Ф. Маркова за дискуссии, способствовавшие работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).
2. Ю. Ф. Марков, К. Кнорр, *ФТТ* **41**, 1, 148 (1999).
3. S. R. Andrews, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **19**, 3721 (1986); U. J. Nicholls and R. A. Cowley, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **20**, 3417 (1987); A. Gibaud, R. A. Cowley, and P. W. Mitchell, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **20**, 3849 (1987).
4. Б. С. Задохин, Ю. Ф. Марков, А. С. Юрков, *ЖЭТФ* **104**, 2799 (1993).
5. В. Г. Вакс, *Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков*, Наука, Москва (1973).
6. В. С. Доценко, *УФН* **163**, 1 (1993).
7. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2. Теория конденсированного состояния, Физматлит, Москва (2002).
8. Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, *Введение в теорию квантованных полей*, Наука, Москва (1984).
9. М. Е. Boiko, Yu. F. Markov, V. S. Vikhnin, A. S. Yurkov, and B. S. Zadokhin, *Ferroelectrics* **130**, 263 (1992).
10. J. P. Benoit, G. Hauret, and J. Levebvre, *J. de Phys.* **43**, 641 (1982).
11. *Акустические кристаллы, справочник*, под ред. М. П. Шаскольской, Наука, Москва (1982).