

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

C326

P17-84-472

4466/84

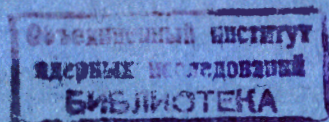
В.Л.Аксенов, М.Бобет, Ю.Шрайбер\*

ФАЗА СТРУКТУРНОГО СТЕКЛА  
В РЕШЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ  $\phi^4$

Направлено в журнал "Теоретическая  
и математическая физика"

\* Технический университет, Дрезден, ГДР

1984



## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время появился заметный интерес к исследованию состояния твердого тела, возникающего в системах, испытывающих структурные фазовые переходы и названного, по аналогии с состоянием спинового стекла в магнитных системах, структурным стеклом. Термин структурное стекло появился при изучении кристаллов с дефектами и твердых растворов, в которых имеются конкурирующие взаимодействия, сопряженные со структурным беспорядком <sup>/1/</sup>. В то же время состояние структурного стекла может возникать в области фазового перехода и в идеальных /бездефектных/ кристаллах благодаря нелинейным эффектам и конкурирующим взаимодействиям. В первую очередь это относится к переходам в системах с несоизмеримыми структурами, для которых характерно наличие обоих этих механизмов <sup>/2-4/</sup>. Исследования низкоразмерных систем <sup>/5/</sup> указывают на возможность существования состояния структурного стекла также и в области фазового перехода в соизмеримых структурах, где причиной его возникновения служит нелинейность.

В данной работе мы рассмотрим возможность существования фазы структурного стекла в решеточной скалярной модели  $\phi^4$ , в которой силовые постоянные взаимодействия ближайших и следующих за ними соседей могут иметь разные знаки. Такая модель является простейшей моделью структурного фазового перехода как в соизмеримых, так и несоизмеримых одноосных структурах. В разделе 2 дано описание модели и на основе вариационного принципа Боголюбова получен аппроксимирующий гамильтониан. В разделе 3 предложен статистический подход для описания перехода в фазу структурного стекла. Этот переход аналогичен по своей сути методу Паризи <sup>/6/</sup> в теории спиновых стекол. В разделе 4 изучены свойства фазы структурного стекла. С помощью модельных функций распределения получены необходимые условия возникновения фазы стекла, характер поведения восприимчивости, фазовая диаграмма в зависимости от температуры и параметра квантовости модели, а также изучено поведение модели при наличии внешнего поля.

## 2. МОДЕЛЬ

Решеточная скалярная модель  $\phi^4$  определяется гамильтонианом

$$H = \sum_n \left[ \frac{P_n^2}{2m} - \frac{A}{2} \phi_n^2 + \frac{B}{4} \phi_n^4 \right] + \frac{1}{4} \sum_{nn'} C_{nn'} (\phi_n - \phi_{n'})^2 - \sum_n E_n \phi_n. \quad /1/$$

где  $\phi_n$  и  $p_n$  - соответственно смещения и импульсы  $n$ -й частицы с массой  $m_n$  в одночастичном потенциале с высотой барьера  $V_0 = A^2/4B$ . Равновесные положения частиц в высокотемпературной фазе, относительно которых определяются смещения, образуют трехмерную кубическую решетку, содержащую  $N$  узлов. Взаимодействие между частицами описывается силовыми постоянными  $C_{nn'}$ . Будем полагать, что силовые постоянные взаимодействия между ближайшими и следующими за ними соседями могут иметь разные знаки или быть отрицательными - это конкурирующие взаимодействия. В /1/ включено внешнее поле  $E_n$ , которое в общем случае может быть однородным.

Квантовые свойства модели характеризуются параметром квантовости  $\lambda = E_0/V_0$ , где  $E_0 = \hbar\sqrt{A/m}$  - энергия нулевых колебаний частиц. Фазовый переход в модели возможен, если параметр  $\lambda < \lambda_c$  - некоторого критического значения. В противном случае переход не происходит даже при нулевой температуре.

Представим смещение частицы  $\phi_n$  в виде средних положений равновесия  $\eta_n$  и малых /относительно  $\eta_n$ / смещений  $u_n$ :

$$\phi_n(t) = \langle \phi_n \rangle_0 + u_n(t) = \eta_n + u_n(t). \quad /2/$$

Для описания колебаний частиц относительно  $\eta_n$  введем аппроксимирующий гамильтониан /с помощью которого происходит усреднение в /2//<sup>17</sup>/:

$$H_0 = \sum_n \left( \frac{p_n^2}{2m} + \frac{A}{2} \Delta_n^2 u_n^2 \right) + \frac{1}{4} \sum_{nn'} C_{nn'} (u_n - u_{n'})^2. \quad /3/$$

Параметры  $\eta_n$  и  $\Delta_n$  определим с помощью вариационного принципа Боголюбова для свободной энергии  $F$ :

$$F \leq F_1 = F_0 + \langle H - H_0 \rangle, \quad \frac{\partial F_1}{\partial \eta_n} = \frac{\partial F_1}{\partial \Delta_n^2} = 0, \quad /4/$$

который приводит к уравнениям

$$\Delta_n^2 = 3 \frac{B}{A} \eta_n^2 - a_n(T), \quad a_n(T) = 1 - 3 \frac{B}{A} \langle u_n^2 \rangle_0, \quad /5/$$

$$\eta_n [B\eta_n^2 - Aa_n(T)] + \sum_{nn'} C_{nn'} (\eta_n - \eta_{n'}) = E_n. \quad /6/$$

Корреляционную функцию  $\langle u_n^2 \rangle_0$  можно найти с помощью одночастичной функции Грина

$$\langle u_n^2 \rangle_0 = \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{1}{e^{\omega/T} - 1} [-\text{Im} D_{nn}(\omega + i\epsilon)]. \quad /7/$$

Функция Грина  $D_{nn}(\omega)$  определяется уравнением

$$\sum_k [(m\omega^2 - A\Delta_n^2 - C_0) \delta_{nk} + C_{nk}] D_{kn}(\omega) = \delta_{nn'}, \quad /8/$$

$$\text{где } C_0 = \sum_n C_{nn}.$$

Исследование модели /1/ при  $E_n = 0$  в одномерном и квазиодномерном случаях<sup>/2-4/</sup> показывают, что нелинейное уравнение /6/, наряду с однородными решениями  $\eta_n = 0$  и  $\eta_n = \eta$ , имеет неоднородные решения  $\eta_n = \eta(n)$ . Эти решения могут приводить к существованию большого числа неоднородных состояний, имеющих почти одинаковую свободную энергию и приводящих к стеклоподобному поведению системы. Вопрос о существовании таких состояний в трехмерных системах в настоящее время остается открытым, что обусловлено трудностями решения нелинейной задачи.

Далее мы рассмотрим возможность существования в модели /3-/ /6/ неоднородных состояний, вырожденных относительно свободной энергии /имеющих почти одинаковую свободную энергию/.

### 3. СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ НЕОДНОРОДНЫХ СОСТОЯНИЙ

Введем статистический ансамбль, предполагая равновероятность состояний системы, определяемых набором стабильных решений уравнения /6/  $\{\eta_n^\nu\}$  и имеющих свободную энергию в интервале от  $F_{\min}$  до  $F_{\min} + \delta$ . Тогда макроскопическое значение физической величины  $A$ , зависящей от  $\eta_n$ , можно вычислить, проводя усреднение по всем состояниям ансамбля:

$$\bar{A} = \frac{1}{\Omega} \sum_\nu A(\{\eta_n^\nu\}), \quad /9/$$

где  $\Omega$  - число состояний ансамбля, индекс  $\nu$  нумерует решения уравнения /6/, которые обеспечивают значения свободной энергии  $F^\nu$ , такие, что  $F_{\min} \leq F^\nu \leq F_{\min} + \delta$ .

Рассматриваемый статистический ансамбль по своему построению аналогичен микроскопическому ансамблю в статистической механике /см., например /8//.

Введем теперь функцию распределения по состояниям системы  $\nu$ :

$$P(\{\eta_n\}) = \frac{1}{\Omega} \sum_\nu \prod_{n=1}^N \delta(\eta_n - \eta_n^\nu), \quad /10/$$

с помощью которой получаем

$$\bar{A} = \int \prod_{n=1}^N d\eta_n P(\{\eta_n\}) A(\{\eta_n\}). \quad /11/$$

При описании неоднородных состояний, для которых характерно наличие ближнего порядка, важную информацию дают уже одночастич-

ные /одноузельные/ характеристики системы, описываемые одноузельной функцией распределения

$$P(\eta_n) = \int \prod_{m \neq n} d\eta_m P(\{\eta_m\}) \quad /12/$$

Одноузельную функцию распределения с помощью условной функции распределения  $P(\{\eta_m | \eta_n\})$ , где  $\eta_n$  - фиксированное значение, можно представить в виде

$$P(\eta_n) = \int \prod_{m \neq n} d\eta_m P(\{\eta_m | \eta_n\}) \delta(\eta_n - f(\{\eta_{m \neq n}\})) \quad /13/$$

В /13/ функция  $f(\{\eta_{m \neq n}\})$  - формальное решение уравнения /6/ как кубического уравнения относительно  $\eta_n$ :

$$\eta_n = f(\{\eta_{m \neq n}\}) = [h_n/2 - \sqrt{D_n}]^{1/3} + [h_n/2 + \sqrt{D_n}]^{1/3} \quad /14/$$

$$D_n = \bar{a}_n^3/27 + h_n^2/4, \quad \bar{a}_n = C_0 - a_n, \quad h_n = \sum_m C_{nm} \eta_m \quad /15/$$

В одноузельном приближении

$$P(\{\eta_m | \eta_n\}) = \prod_{m \neq n} P(\eta_m) \quad /16/$$

Подставляя /16/ в /13/, получаем

$$P(\eta_n) = \int \prod_{m \neq n} (d\eta_m P(\eta_m)) \delta(\eta_n - f(\{\eta_{m \neq n}\})) \quad /17/$$

Уравнение /17/ является уравнением для одночастичной функции распределения. Решить его аналитически, однако, не представляется возможным. Поэтому мы введем некоторую модельную функцию распределения, для самосогласованного вычисления параметров которого используем /17/. В неоднородном состоянии, если оно реализуется в качестве хаотической структуры, можно ожидать для функции распределения  $P(\eta_n)$ , что она будет иметь вид симметричной функции типа гауссовской или лоренцевской.

Рассмотрим гауссовское распределение

$$P(\eta_n) = (1/\sqrt{2\pi\Gamma}) e^{-\frac{(\eta_n - \eta_0)^2}{2\Gamma}} \quad /18/$$

Параметры этого распределения вычислим самосогласованным образом с помощью уравнения /17/ и первых двух моментов:

$$\bar{\eta}_n = \int d\eta_n P(\eta_n) \eta_n = \int \prod_{m \neq n} (d\eta_m P(\eta_m)) f(\{\eta_{m \neq n}\}) \quad /19/$$

$$\bar{\eta}_n^2 = \int d\eta_n P(\eta_n) \eta_n^2 = \int \prod_{m \neq n} (d\eta_m P(\eta_m)) f^2(\{\eta_{m \neq n}\}) \quad /20/$$

Для вычисления интегралов в /19/, /20/ введем функцию распределения  $P_h(h_n)$ :

$$\int \prod_{m \neq n} (d\eta_m P(\eta_m)) f(\{\eta_{m \neq n}\}) = \int dh_n P_h(h_n) f(h_n) \quad /21/$$

или

$$P_h(h_n) = \int \prod_{m \neq n} (d\eta_m P(\eta_m)) \delta(h_n - \sum_{k \neq n} C_{nk} \eta_k) \quad /22/$$

Используя /18/ и /22/, получаем

$$P_h(h_n) = (1/\sqrt{2\pi\bar{\Gamma}}) e^{-\frac{(h_n - h_0)^2}{2\bar{\Gamma}}} \quad /23/$$

где  $\bar{\Gamma} = C_2^2 \Gamma$ ,  $C_2^2 = \sum_{k \neq n} C_{nk}^2$ ,  $h_0 = C_0 \eta_0$ . Подставляя /22/, /23/ в /19/,

/20/, получаем уравнения для параметров  $\eta_0$  и  $\Gamma$ :

$$\eta_0 = \int dh_n P_h(h_n) f(h_n) \quad /24/$$

$$\eta_0^2 + \Gamma = \int dh_n P_h(h_n) f^2(h_n) \quad /25/$$

Эти уравнения самосогласованным образом определяют параметры распределения /18/, которые зависят от температуры и тем самым позволяют характеризовать свойства фазы, описываемой этим распределением.

Заметим, что согласно связи /15/ для определения параметров распределения можно использовать моменты не по смещениям  $\eta_n$ , а по эффективным полям  $h_n$ .

Более общий вид распределения  $P(\eta_n)$  описывается функцией

$$P(\eta_n) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left[ \frac{1}{\sqrt{\Gamma_1}} e^{-\frac{(\eta_n - \eta_1)^2}{2\Gamma_1}} + \frac{1}{\sqrt{\Gamma_2}} e^{-\frac{(\eta_n - \eta_2)^2}{2\Gamma_2}} \right] \quad /26/$$

Для определения параметров этого распределения нужно брать уже четыре первых момента.

#### 4. ФАЗА СТРУКТУРНОГО СТЕКЛА

4.1. Рассмотрим сначала условия, при которых возможен переход в фазу структурного стекла. Вводя безразмерные величины  $s_n = \sqrt{B/A} \eta_n$ ,  $f_{nn} = C_{nn}/A$ ,  $f_0 = \sum_n f_{nn}$ ,  $h_n^0 = E_n \sqrt{B/A/A}$ ,  $y = B \langle u_n^2 \rangle_0 / A$ ,  $\bar{a} = f_0 - 1 + 3y$ , /функция  $\langle u_n^2 \rangle_0$  вычисляется ниже, см. выражение /45//, перепишем уравнение /6/ в виде

$$s_n^3 + \bar{a} s_n = h_n^0 + \sum_n f_{nn} s_n \quad /27/$$

При отсутствии внешнего поля ( $h_n^e = 0$ ) при  $T \rightarrow T_c$ , когда  $s_n = 0$ , уравнение /27/ можно линеаризовать. В результате получаем

$$\bar{a} s_n = \sum_n f_{nn'} s_{n'} \quad /28/$$

Это уравнение имеет ненулевые решения при условии, что  $\det(\bar{a} \delta_{nn'} - f_{nn'}) = 0$ , или, после преобразования Фурье,

$$\prod_q (\bar{a} - f_q) = 0, \quad f_q = \sum_n e^{-iq R_{nn'}} f_{nn'} \quad /29/$$

При  $\bar{a} = f_{q_0}$  ( $f_{q_0}$  - максимум образа Фурье силовых постоянных) происходит переход из неупорядоченной фазы, где  $s_n = 0$ , в фазу с  $s_n \sim \cos q_0 R_n$ . При  $q_0 = 0$  эта фаза является однородной феррофазой, при  $q_0 \neq 0$  она является модулированной /соизмеримой или несоизмеримой/. В обоих случаях при переходе возникает новый дальний порядок.

Фаза стекла характеризуется отсутствием дальнего порядка, но наличием ближнего порядка с малым радиусом корреляции. В этом случае имеем

$$\bar{s}_n = 0, \quad \overline{s_n s_m} = \overline{s_n^2} e^{-|R_n - R_m|/\xi} \quad /30/$$

где  $\xi$  - радиус корреляции. По аналогии со спиновыми стеклами будем описывать фазу структурного стекла с помощью параметра  $\overline{s_n^2}$ , полагая  $\overline{s_n s_m} = \overline{s_n^2} \delta_{nm}$ , т.е. ограничимся пределом  $\xi = 0$ , что соответствует одноузельному приближению /16/. Тогда, возводя /27/ в квадрат и проводя усреднение, получаем

$$\bar{a}^2 \overline{s_n^2} = f_2^2 \overline{s_n^2}, \quad f_2^2 = \sum_e f_{ne}^2 \quad /31/$$

Из /31/ следует, что ненулевое значение  $\overline{s_n^2}$  может существовать, если  $|\bar{a}| \leq f_2$ . Подчеркнем, что это условие является только необходимым, вследствие предположения о нулевом радиусе корреляции.

Таким образом, согласно /29/, /31/, получаем условие возникновения фазы с дальним порядком:

$$3y \leq 1 + f_{q_0} - f_0 = 3y_{q_0} \quad /32/$$

и условие возникновения фазы стекла:

$$3y \leq 1 + f_2 - f_0 = 3y_g \quad /33/$$

Сравнивая /32/ и /33/, видим, что переход из парафазы, где  $s_n = 0$ , в фазу стекла, где  $\bar{s}_n = 0$ , но  $\overline{s_n^2} \neq 0$ , может происходить только при условии, что  $f_2 > f_{q_0}$ .

4.2. Рассмотрим теперь, пользуясь развитым в разделе 3 подходом, более подробно свойства фазы стекла. Будем полагать, что внешнее поле  $h_n^e = 0$ , а параметры  $f_0$  и  $f_2$  заданы:  $f_2 > f_0$ . Зададим модельные функции распределения:

$$P(s_n) = (1/\sqrt{2\pi\Gamma}) e^{-s_n^2/2\Gamma} \quad /34/$$

$$P(s_n) = (1/2[\delta(s_n - s_2) + \delta(s_n + s_2)]), \quad /35/$$

$$P(s_n) = \delta(s_n - s_F). \quad /36/$$

Для упрощения расчетов распределения, описывающие фазу стекла /35/ и феррофазу /36/, выбраны в виде  $\delta$ -функций.

Для самосогласованного определения параметров  $s_2$  и  $\Gamma$  можно использовать уравнения /24/, /25/. Однако в нашем случае проще использовать моменты по эффективным полям  $h_n = \sum_n f_{nn'} s_{n'}$ . Тогда

вместо /20/ имеем

$$\overline{h_n^2} = \int \prod_{m \neq n} (dh_m P_n(h_m)) [\sum_m f_{nm} s(h_m)]^2, \quad /37/$$

где  $s(h_m)$  имеет вид /15/ и  $P_n(h_m) = P(s(h_m))(ds/dh_m)$ . В результате получаем

$$\Gamma = (\bar{a}/5) \{ [1 + (5/3)(f_2^2/\bar{a}^2 - 1)]^{1/2} - 1 \}, \quad /38/$$

$$s_2^2 = f_2 - \bar{a}. \quad /39/$$

$$s_F^2 = 1 - 3y. \quad /40/$$

Для получения /40/ мы использовали уравнение /27/.

Температурная зависимость параметров /38/-/40/ определяется корреляционной функцией /7/, для вычисления которой уравнение для функции Грина /8/ перепишем в приближении виртуального кристалла

$$\sum_k [(m\omega^2 - A\Delta_n^2 - C_0) \delta_{nk} + C_{nk}] \bar{D}_{kn} = \delta_{nn}, \quad /41/$$

где черта означает конфигурационное среднее. Используя преобразование Фурье, находим из /41/ функцию Грина, подставляя которую в соотношение /7/, получаем

$$\overline{u_n^2} = \frac{1}{2mN} \sum_q \frac{1}{\omega_q} \coth \frac{\omega_q}{2T}, \quad /42/$$

$$\text{где } m\omega_q^2 = -A + 3B(\overline{u_n^2} + \overline{\eta_n^2}) + C_0 - C_q, \quad C_q = \sum_n e^{-iq R_{nm}} C_{nm} \quad /43/$$

- частота фононов. Система уравнений /38/-/40/, /42/, /43/ само-согласованным образом определяет температурную зависимость параметров порядка.

Как видно из /38/-/40/, параметры  $\Gamma$  и  $s_2$ , характеризующие фазу стекла, обращаются в ноль при одном и том же значении корреляционной функции  $y_g$ . Большее, чем значение  $y_{q_0=0}$ , при котором обращается в ноль параметр порядка в феррофазе  $s_F$ . Выражение /43/ определяет статическую восприимчивость системы:  $\chi_q = 1/m\omega_q^2$ . При  $q = 0$  получаем в безразмерных переменных:

$$A\chi_{q=0} = [3(y + s_n^2) - 1]^{-1}. \quad /43a/$$

Используя /40/, видим, что в феррофазе  $\chi_{q=0}$  неограниченно возрастает одновременно с параметром порядка:  $\chi_{q=0} \rightarrow \infty$  при  $y \rightarrow y_{q_0=0}$ .

В фазе стекла восприимчивость имеет другое поведение. На рис. 1 показана зависимость  $\chi_{q=0}$  от  $y$  для распределений /34/ и /35/, для которых параметр  $s_n^2$  равен  $\Gamma$  и  $s_2^2$  соответственно. Параметры модели выбраны в виде  $f_0 = 2$ ,  $f_2 = 4$ . Видно, что восприимчивость при  $y \rightarrow y_g$  испытывает излом, оставаясь конечной при  $y = y_g$ . Форма излома зависит от вида распределения.

Для того чтобы найти фазовую диаграмму, вычислим свободную энергию модели. Используя /4/-/6/, в приближении виртуального кристалла получаем

$$F = T \sum_q \ln 2 \text{sh} \frac{\omega_q}{2T} - \sum_n \left[ \frac{3B}{4} \langle u_n^2 \rangle_0 (\langle u_n^2 \rangle_0 + 2\eta_n^2) + \frac{B}{4} \eta_n^4 \right]. \quad /44/$$

Отдельно для парафазы (P), феррофазы (F) и фазы структурного стек-

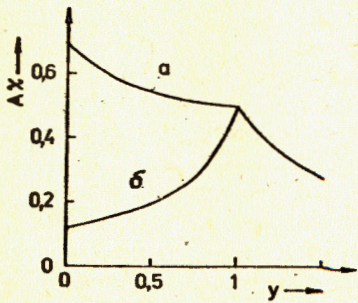


Рис. 1. Зависимость статической восприимчивости  $\chi_{q=0}$  от корреляционной функции  $y$  при переходе из парафазы в фазу структурного стекла, которая описывается функцией распределения /34/ /кривая а/ и /35/ /кривая б/.

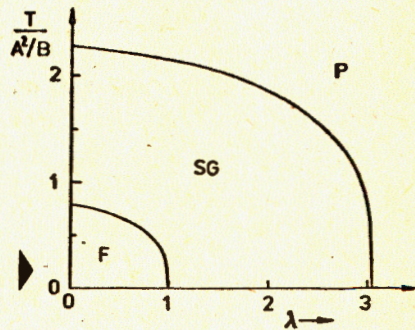


Рис. 2. Фазовая диаграмма в зависимости от температуры  $T$  и параметра квантовости модели  $\lambda$ .

ла (SG) свободная энергия /в безразмерных переменных  $\tilde{F} = F/(NA^2/B)$ / имеет вид

$$\tilde{F}_P = \tilde{F}_0 - \frac{3}{4} y^2, \quad /45/$$

$$\tilde{F}_F = \tilde{F}_0 - \frac{3}{4} y^2 + \frac{1}{4} (9y^2 - 1), \quad /46/$$

$$\tilde{F}_{SG} = \tilde{F}_0 - \frac{3}{4} (y + \Gamma)^2, \quad /47/$$

где  $\tilde{F}_0 = (BT/NA^2) \sum_q \ln 2 \text{sh} \omega_q / 2T$ . При вычислении /47/ было использовано распределение /34/.

На рис. 2 показана фазовая диаграмма модели в зависимости от температуры  $T$  и параметра квантовости  $\lambda$ , полученная в результате сравнения свободных энергий /45/-/47/ при значениях параметров  $f_0 = 2$ ,  $f_2 = 2,5$ . При вычислении корреляционной функции /42/ мы воспользовались дебаевским приближением:  $C_0 - C_q = 2C_0 (qa/\pi)^2$ .

4.3. Рассмотрим поведение системы при наличии внешнего поля. В этом случае для описания фазы стекла воспользуемся несимметричным гауссовским распределением /18/. Параметры этого распределения можно определить с помощью выражения /37/ и аналогичного выражения для первого момента по  $h_n$ . Они удовлетворяют уравнениям ( $h_n^e = h_{ext}$ ):

$$(3\Gamma + s_0^2 + \bar{a} - f_0) s_0 = h_{ext}, \quad /48/$$

$$[15\Gamma^2 + 6(\bar{a} + 6s_0^2)\Gamma + (\bar{a} + 3s_0^2)^2 - f_2^2] \Gamma = 0. \quad /49/$$

Феррофаза характеризуется параметром  $s_F$ , уравнение для которого получается из /27/ и имеет вид

$$(s_F^2 + \bar{a} - f_0) s_F = h_{ext}. \quad /50/$$

На рис. 3 показана зависимость от поля  $h_{ext}$  параметров  $s_0$  и  $s_F$ , полученная в результате решения системы уравнений /42/, /43/, /48/-/49/ при  $f_0 = 2$ ,  $f_2 = 4$ ,  $\lambda = 0,1$ ;  $T/(A^2/B) = 1$ . Штрихованные кривые на рис. 3 обозначают метастабильные состояния. Фаза стекла существует только при  $|h_{ext}| \leq h_{ext}^{max}$ . Заметим, что

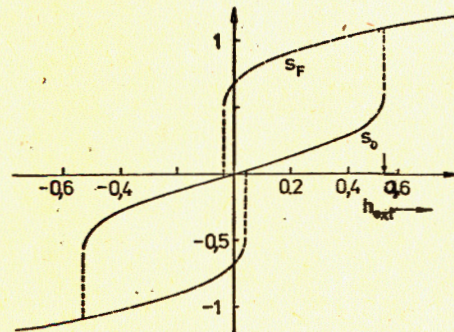


Рис. 3. Зависимости параметров порядка феррофазы  $s_F$  и фазы структурного стекла  $s_0$  от внешнего поля  $h_{ext}$ .

при  $h_{ext} = h_{ext}^{max}$  значение свободной энергии фазы стекла приблизительно на 10% меньше значения свободной энергии феррофазы, что, видимо, является следствием приближений.

## 5. ОБСУЖДЕНИЕ

Обсудим кратко полученные результаты. Проведенное в предыдущем разделе рассмотрение показывает, что существование фазы структурного стекла возможно только при наличии конкурирующих взаимодействий. Этот результат, однако, не исключает возможности возникновения в системе без конкурирующих взаимодействий в области фазового перехода виртуальных кластеров ближнего порядка. В реальных кристаллах дефекты могут стабилизировать такие динамические кластеры, в результате чего может образоваться замороженная стеклоподобная структура. Таким образом, для более полного изучения фазовых переходов в модели необходимо включить в теорию возможность описания динамических процессов.

Как видно из фазовой диаграммы на рис.2 переход в фазу структурного стекла может происходить не только при изменении температуры, но и при изменении параметра квантовости  $\lambda$ . Изменение параметра  $\lambda$  можно осуществить, например, изменяя состав квантовых сегнетоэлектриков. Для этого можно использовать твердые растворы, в которых одна из компонент имеет  $\lambda < \lambda_c$ , а другая /квантовая/ -  $\lambda > \lambda_c$ . Примером может служить твердый раствор  $Sr_{1-x}Ba_xTiO_3$ , где  $SrTiO_3$  имеет параметр  $\lambda > \lambda_c$ , а  $BaTiO_3$  - параметр  $\lambda \ll \lambda_c^{/9/}$ . В твердых растворах неоднородные состояния возникают в результате конкуренции взаимодействий разных знаков для разных компонент. В этом случае параметры гамильтониана /1/ являются случайными величинами и необходимо выполнить дополнительно структурное усреднение /10/. Ряд недавних экспериментов с квантовыми сегнетоэлектриками действительно указывает на их стеклоподобное поведение в низкотемпературной области /11/. Однако для детального сравнения теории с экспериментами последних в настоящее время явно недостаточно. В частности, полезную информацию могут дать эксперименты с использованием внешнего поля. Так, двойной гистерезис, показанный на рис.3, является, по-видимому, характерным для фазы структурного стекла.

В заключение авторы выражают благодарность В.А. Загребнову и Н.М. Плакиде за полезные замечания при обсуждениях.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Courtens E. Helvetic Phys. Acta, 1983, 56, p.705.
2. Bak P. Rep.Prog.Phys., 1982, 45, p.587.
3. Janssen T. Tjon J.A. J.Phys.C., 1983, 16, p.4789.

4. Aubry S. Physica D, 1983, 7, p.240.
5. Брус А., Каули Р. Структурные фазовые переходы. "Мир", М., 1984, ч. III.
6. Parisi G. Phys.Rev.Lett., 1983, 50, p.1946; Mezard M. et al. Phys.Rev.Lett., 1984, 52, p.1156.
7. Аксенов В.Л. и др. ФТТ, 1976, 18, с.2920.
8. Бонч-Бруевич В.Л. и др. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. "Наука", М., 1981, гл.1.
9. Аксенов В.Л., Плакида Н.М., Стаменкович С. Рассеяние нейтронов сегнетоэлектриками. Энергоатомиздат, М., 1984, гл. III.
10. Aksenov V.L., Bobeth M. JINR, E17-84-335, Dubna, 1984.
11. Henning I. et al. phys.stat.sol.(a), 1982, 73, K105.

### НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
	Труды УШ Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Протвино, 1982 /2 тома/	11 р. 40 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
Д17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
Р18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
Д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
Д3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
Д11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
Д7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
Д2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:  
301000 Москва, Главпочтамт, п/я 79  
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Аксенов В.Л., Бобет М., Шрайбер Ю.

P17-84-472

Фаза структурного стекла в решеточной модели  $\phi^4$

Предложено статистическое описание неоднородных состояний при структурных фазовых переходах в одноосных системах. В рамках этого описания получены необходимые условия существования фазы структурного стекла в модели и исследуются ее свойства.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод авторов

Aksenov V.L., Bobeth M., Schreiber J.

P17-84-472

Structural Glass Phase in the Lattice  $\phi^4$ -Model

The statistical description of nonuniform states at structural phase transitions in uniaxial system is proposed. Within this description necessary conditions for the existence of a structural glass phase are derived and the properties of this phase are investigated.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1984