

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P17-85-573

В.Л.Аксенов, Х.Бретер,* А.Ю.Дидык

СТРУКТУРНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД
В КВАНТОВОМ ПАРАЗЛЕКТРИКЕ
С ДВУМЯ ТИПАМИ ДЕФЕКТОВ

Направлено в журнал "Физика твердого тела"

Университет им.Карла Маркса, Лейпциг, ГДР

1985

ВВЕДЕНИЕ

Одним из интересных проявлений влияния дефектов на структурно-неустойчивые кристаллы является возникновение в квантовых параэлектриках структурного фазового перехода при некоторой критической концентрации дефектов^{/1-5/}. В недавних экспериментальных исследованиях^{/4/} воздействия примесей Са на низкотемпературный фазовый переход в SrTiO_3 был обнаружен новый эффект. При критической концентрации примесей $X = X_c (= 0,0018)$ происходит обычный сегнетоэлектрический фазовый переход, однако по мере увеличения X картина фазового перехода меняется: при $X > X_p (= 0,016)$ фазовый переход размывается.

В настоящей работе мы покажем, что такое изменение фазового перехода может происходить в результате конкурирующего влияния дефектов двух типов: "мягких" и "замороженных". Для этого воспользуемся модельной теорией динамики решетки структурно-неустойчивых кристаллов с дефектами, развитой в работе^{/5/}.

МОДЕЛЬ

Модельный гамильтониан запишем в виде

$$H = \sum_{n\alpha} t_{n\alpha} \left[\frac{P_{n\alpha}^2}{2m_\alpha} - \frac{A_\alpha}{2} X_{n\alpha}^2 + \frac{B_\alpha}{4} X_{n\alpha}^4 \right] + \frac{1}{4} \sum_{\substack{nn' \\ \alpha\beta}} t_{n\alpha} t_{n'\beta} \Phi_{nn'} (X_{n\alpha} - X_{n'\beta})^2, \quad (1)$$

где $X_{n\alpha}$, $P_{n\alpha}$ - локальные нормальные координаты и сопряженные им импульсы, описывающие критические колебания в ячейке сорта α в узле решетки n ; m_α - приведенная масса ячейки. Силовые постоянные $\Phi_{nn'}$ описывают эффективное взаимодействие ячеек. Символ α нумерует число компонент твердого раствора: $t_{n\alpha}$ - проекционные операторы: $t_{n\alpha} = 1$, если в узле решетки находится элементарная ячейка данного сорта α , и $t_{n\alpha} = 0$, если в узле решетки находится элементарная ячейка другого сорта $\alpha \neq \beta$. При этом для данного узла n выполняется условие $\sum_{\alpha} t_{n\alpha} = 1$.

Будем полагать, что основная компонента ($\alpha = 1$) является "мягкой" и "квантовой" - для нее одночастичный потенциал имеет два минимума ($A_1 > 0$) и она характеризуется двумя параметрами: относительной константой связи f_0 и параметром квантовости λ_1 :

$$f_0 = \sum \Phi_{nn} / A_1, \quad \lambda_1 = \hbar \Omega_{01} / 4 V_{01},$$

где $V_{01} = \hbar^2 A_1^2 / 4 B_1$ - глубина одночастичного потенциала, $\Omega_{01} = \sqrt{A_1 / m_1}$ - частота нулевых колебаний. Фазовому переходу типа смещения соответствует $f_0 \gg 1$. Переход, т.е. смещение положений равновесия частиц на величину $\langle X_{n1} \rangle \neq 0$, возможен, если параметр квантовости $\lambda < \lambda_{sc}$ ($\sim \sqrt{f_0}$) некоторого критического значения. Это означает, что энергия нулевых колебаний должна быть мала по сравнению с глубиной одночастичного потенциала. При $\lambda > \lambda_{sc}$ смещения $\langle X_{n1} \rangle = 0$ даже при нулевой температуре, что характерно для квантовых параэлектриков.

Рассмотрим далее дефекты двух типов: мягкие дефекты ($\alpha = 2$), для которых $A_2 > 0$ и V_{01}, V_{02} находятся в таком соотношении, что в дефектной ячейке может происходить смещение частицы за счет ее взаимодействия с соседями; замороженные дефекты ($\alpha = 3$), для которых $A_3 > 0$, $V_{03} \gg V_{01}$ и глубина потенциального минимума V_{03} настолько велика, что в рассматриваемом интервале температур переориентации невозможны. Будем предполагать, что квантовыми флуктуациями в дефектных ячейках можно пренебречь, т.е. $\lambda_{2,1} < \lambda_{3,2}$.

Развитие в [5] модельное описание двухкомпонентных твердых растворов легко обобщается для случая нескольких компонент. В результате получаем самосогласованную систему уравнений для описания поведения мягкой фононной моды в модели (I) в приближении первого порядка теории самосогласованных фононов и приближении когерентного потенциала. Частота и затухание мягкой моды определяется выражениями

$$\omega_\infty^2(\vec{q}) = \omega_\infty^2(\vec{q}) - \delta^2(\omega = \omega_0), \quad \delta^2(\omega) = -\text{Re} \Sigma(\omega + i\varepsilon), \quad (3)$$

$$\Gamma_0 = -\frac{1}{\omega_0(\vec{q})} \text{Im} \Sigma(\omega + i\varepsilon) \Big|_{\omega = \omega_0(\vec{q})} \quad (4)$$

В выражении (3) $\omega_\infty^2(\vec{q})$ - квадрат частоты мягкой моды в приближении виртуального кристалла:

$$\omega_\infty^2(\vec{q}) = \bar{\Delta} + (f_0 - f_{\vec{q}}), \quad (5)$$

$$\bar{\Delta} = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \Delta_{\alpha}, \quad \Delta_{\alpha} = 3x_{\alpha}(\eta_{\alpha}^2 + y_{\alpha}) - \gamma_{\alpha}, \quad (5a)$$

где C_{α} - концентрация компоненты сорта $\alpha = 1, 2, 3$ и введены обозначения

$$\eta_{\alpha} = \sqrt{\frac{B_1}{A_1}} \langle X_{n\alpha} \rangle, \quad y_{\alpha} = \sqrt{\frac{B_1}{A_1}} \langle (X_{n\alpha} - \langle X_{n\alpha} \rangle)^2 \rangle, \\ \gamma_{\alpha} = \frac{A_{\alpha}}{A_1}, \quad x_{\alpha} = \frac{B_{\alpha}}{B_1}. \quad (6)$$

Равновесные положения частиц η_{α} определяются системой уравнений

$$\eta_{\alpha} [-\gamma_{\alpha} + x_{\alpha}(\eta_{\alpha}^2 + 3y_{\alpha})] + \sum_{\beta=1}^3 C_{\beta} f_0 (\eta_{\alpha} - \eta_{\beta}) = 0, \\ \alpha = 1, 2, 3. \quad (7)$$

Среднеквадратичные смещения находятся с помощью уравнения

$$y_{\alpha} = \lambda_{\alpha} \int_0^{\infty} \text{ch} \frac{\lambda_{\alpha} \omega}{2\theta} \left[-\frac{A_1}{\pi} \text{Im} \mathcal{D}_{n(\alpha)n}(\omega + i\varepsilon) \right] d\omega, \quad (8)$$

где $\theta = T/4V_{01}$, а условные функции Грина $\mathcal{D}_{n(\alpha)n}(\omega)$ имеют вид

$$\mathcal{D}_{n(\alpha)n}(\omega) = \frac{\mathcal{D}_{nn}^{\circ}(\omega)}{1 - \left[\sum_{\alpha} C_{\alpha} g_{\alpha}(\omega) - \Sigma(\omega) \right] A_1 \mathcal{D}_{nn}^{\circ}(\omega)}, \\ g_{\alpha}(\omega) = (m_{\alpha} - m_1) \omega^2 / A_1 - (\Delta_{\alpha} - \Delta_1). \quad (9)$$

Полная функция Грина определяется выражением

$$\mathcal{D}_{nn}^{\circ}(\omega) = \frac{1}{A_1 N} \sum_{\vec{q}} \left[z - (f_0 - f_{\vec{q}}) \right]^{-1} = \frac{1}{A_1} \int_0^{\sqrt{2f_0}} \frac{\rho(v^2) dv^2}{z(\omega) - v^2}, \quad (10)$$

где $z(\omega) = \omega^2 - \bar{\Delta} - \Sigma(\omega)$, $\rho(v^2) = 3v/2(2f_0)^{3/2}$.

Комплексный когерентный потенциал, описывающий процессы рассеяния фононов на дефектах и определяющий сдвиг частоты мягкой моды (3) и ее затухание (4), удовлетворяет уравнению

$$\sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha} \left[\sum_{\beta} C_{\beta} g_{\beta}(\omega) - \Sigma(\omega) \right]}{1 - \left[\sum_{\beta} C_{\beta} g_{\beta}(\omega) - \Sigma(\omega) \right] A_1 \mathcal{D}_{nn}^{\circ}(\omega)} = 0. \quad (11)$$

Характер влияния дефектов различных типов на поведение мягкой фононной моды был установлен в работе [5]. Так, было показано, что

мягкие дефекты при достижении некоторой их критической концентрации приводят к возникновению фазового перехода в квантовом параэлектрике. Оценка концентрационной зависимости температуры фазового перехода в приближении виртуального кристалла дает

$$\theta_c = \text{const} [X - X_c]^{1/2}, \quad \left| \frac{X - X_c}{X_c} \right| \ll 1. \quad (\text{I2})$$

С другой стороны, замороженные поляризованные дефекты в мягкой решетке приводят к размытию фазового перехода. Рассмотрим теперь конкурирующее влияние этих двух типов дефектов на фазовый переход в квантовом параэлектрике.

ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ

Для численного решения системы уравнений (3)-(II) выберем следующие параметры модели. Для основной решетки положим $f_0 = 20$, $\lambda_1 = 4$. В этом случае фазовый переход в системе отсутствует. Для мягкого дефекта $\gamma_2 = \alpha_2 = 5$, $\lambda_2 = 1$; для замороженного дефекта ($\gamma_3 = \sqrt{\alpha_3/\alpha_3\beta_3}$) $\gamma_3 = \alpha_3 = 10$, $\lambda_3 = 1$.

На рис. 1 показана температурная зависимость статической восприимчивости $\chi_0 = \omega_0^{-2}(\varphi_c=0)$ при различных соотношениях концентраций дефектов C_2 и C_3 . На рис. 2 показана зависимость от суммарной концентрации дефектов $X = C_2 + C_3$ температурной полуширины пиков на рис. 1 и температуры перехода, определенной по положению максимума этих пиков.

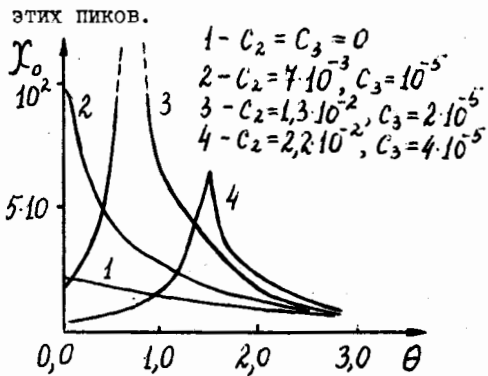


Рис. 1. Температурная зависимость статической восприимчивости; C_2 и C_3 - концентрации мягких и замороженных дефектов.

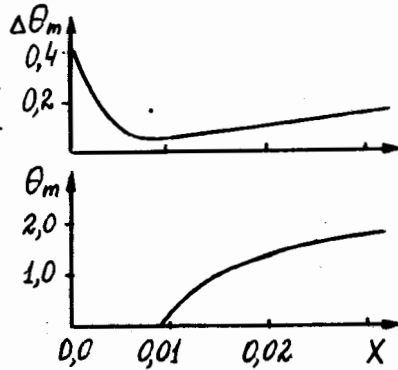


Рис. 2. Зависимость температурной полуширины пиков восприимчивости и температуры фазового перехода от суммарной концентрации дефектов $X = C_2 + C_3$.

На рис. 3 показана температурная зависимость затухания мягкой моды

(4). Видно, что увеличение концентрации замороженных дефектов меняет характер этого поведения.

Таким образом, имеется три характерных интервала концентраций:

$$1 - C_2 = 2,8 \cdot 10^{-2}, C_3 = 10^{-6} \quad \text{при } X < X_c (=0,009) \text{ фазовый переход отсутствует,}$$

$$2 - C_2 = 2,8 \cdot 10^{-2}, C_3 = 2,8 \cdot 10^{-6} \quad \text{при } X_c < X < X_r (=0,04) \text{ система испытывает фазовый переход типа смещения (мягкая мода } \omega_0(\varphi_c=0) \text{ обращается в нуль) и при } X > X_r \text{ фазовый переход размывается.}$$

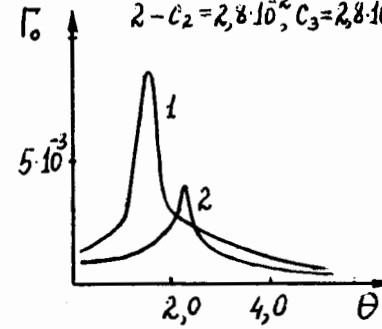


Рис. 3. Температурная зависимость затухания мягкой моды.

Полученные результаты позволяют дать интерпретацию экспериментальным данным в^{4/}. Оценки параметров модели для SrTiO_3 , проведенные на основе анализа данных по рассеянию нейтронов, показывают^{6/}, что для этого соединения $f_0 = 16$, $\lambda_1 = 3,6$. В работе^{4/} указано, что ионы Ca могут замещать как ионы Sr, так и ионы Ti. В первом случае возникают случайные напряжения, связанные квадратично с параметром порядка, что соответствует мягким дефектам. Во втором случае возникают локальные электрические поля, что соответствует замороженным дефектам. Полное качественное совпадение данных на рис. 1 и рис. 2 соответствующим данным из работы^{4/} показывает, что введение примесей Ca в SrTiO_3 приводит к образованию мягких и замороженных дефектов при соотношении их концентраций, примерно соответствующем указанному на рис. 1. Мягкие дефекты приводят к подавлению квантовых флуктуаций и появлению фазового перехода в системе, замороженные дефекты вызывают размытие этого фазового перехода.

Авторы выражают благодарность М.Бобету, обратившему их внимание на работу^{4/}.

ЛИТЕРАТУРА

1. Höchli U.T. *Ferroelectrics*, 1981, 35, N 1/2/3/4, p.17.
2. Hegenbarth E. *Ferroelektrizitat* 81/1, Halle: Martin-Luther-Universität, 1981, p.52.
3. Rytz D., Châtelain A., Höchli U.T. *Phys.Rev.B*, 1983, 27, N 11, p.6830.

4. Bednorz J.G., Müller K.A. Phys.Rev.Lett., 1984, 52, N 25, p.2289.

5. Аксенов В.Л., Дидык А.Ю. ФТТ, 1984, 26, № 8, с.2437.

6. Аксенов В.Л., Плакида Н.М., Стаменкович С. Рассеяние нейтронов сегнетоэлектриками. М., Энергоатомиздат, 1984.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 июля 1985 года

Вниманию организаций и лиц, заинтересованных в получении
публикаций Объединенного института ядерных исследований

Принимается подписка на препринты и сообщения Объединенного института ядерных исследований.

Установлена следующая стоимость подписки на 12 месяцев на издания ОИЯИ, включая пересылку, по отдельным тематическим категориям:

ИНДЕКС	ТЕМАТИКА	Цена подписки на год
1.	Экспериментальная физика высоких энергий	10 р. 80 коп.
2.	Теоретическая физика высоких энергий	17 р. 80 коп.
3.	Экспериментальная нейтронная физика	4 р. 80 коп.
4.	Теоретическая физика низких энергий	8 р. 80 коп.
5.	Математика	4 р. 80 коп.
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия	4 р. 80 коп.
7.	Физика тяжелых ионов	2 р. 85 коп.
8.	Криогеника	2 р. 85 коп.
9.	Ускорители	7 р. 80 коп.
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных	7 р. 80 коп.
11.	Вычислительная математика и техника	6 р. 80 коп.
12.	Химия	1 р. 70 коп.
13.	Техника физического эксперимента	8 р. 80 коп.
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами	1 р. 70 коп.
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях	1 р. 50 коп.
16.	Дозиметрия и физика защиты	1 р. 90 коп.
17.	Теория конденсированного состояния	6 р. 80 коп.
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники	2 р. 35 коп.
19.	Биофизика	1 р. 20 коп.

Подписка может быть оформлена с любого месяца текущего года.

По всем вопросам оформления подписки следует обращаться в издательский отдел ОИЯИ по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79.

СООБЩЕНИЯ, КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ, ПРЕПРИНТЫ И СБОРНИКИ ТРУДОВ КОНФЕРЕНЦИЙ, ИЗДАВАЕМЫЕ ОБЪЕДИНЕННЫМ ИНСТИТУТОМ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ, ЯВЛЯЮТСЯ ОФИЦИАЛЬНЫМИ ПУБЛИКАЦИЯМИ.

Ссылки на СООБЩЕНИЯ и ПРЕПРИНТЫ ОИЯИ должны содержать следующие элементы:

- фамилии и инициалы авторов,
- сокращенное название Института /ОИЯИ/ и индекс публикации,
- место издания /Дубна/,
- год издания,
- номер страницы /при необходимости/.

Пример:

1. Первушин В.Н. и др. ОИЯИ, P2-84-649, Дубна, 1984.

Ссылки на конкретную СТАТЬЮ, помещенную в сборнике, должны содержать:

- фамилии и инициалы авторов,
- заглавие сборника, перед которым приводятся сокращенные слова: "В кн."
- сокращенное название Института /ОИЯИ/ и индекс издания,
- место издания /Дубна/,
- год издания,
- номер страницы.

Пример:

Колпаков И.Ф. В кн. XI Международный симпозиум по ядерной электронике, ОИЯИ, Д13-84-53, Дубна, 1984, с.26.

Савин И.А., Смирнов Г.И. В сб. "Краткие сообщения ОИЯИ", № 2-84, Дубна, 1984, с.3.

Аксенов В.Л., Бретер Х., Дидык А.Ю.
Структурный фазовый переход
в квантовом параэлектрике
с двумя типами дефектов

P17-85-573

В приближении когерентного потенциала исследовано конкурирующее влияние "мягких" и "замороженных" дефектов на фазовый переход в модели квантового параэлектрика. Показано, что при определенном соотношении их концентраций в системе при некотором критическом значении суммарной концентрации $X = X_c$ возникает структурный фазовый переход, который становится размытым при $X > X_f > X_c$.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод О.С.Виноградовой

Aksenov L.V., Braeter H., Didyk A.Yu.
Structural Phase Transition in
in Quantum Paraelectrics
with Defects of Two Types

P17-85-573

The competing influence of "soft" and "frozen" defects on the phase transition in the model of quantum paraelectric is investigated in the coherent potential approximation. It is shown that at some relation of their concentrations and at some critical value of the whole concentration $X = X_c$ the structural phase transition appears and then becomes diffusive at $X > X_f > X_c$.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985