ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-85-42
УДК 539.2:
537.226

ДИДЫК
Александр Юрьевич

МОДЕЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ ПРИ СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ

Специальность: 01.04.02 – теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1985

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук, ст.н.с. Аксенов В.Л.

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук, профессор Маханьков В.Г.
кандидат физико-математических наук, доцент Сигов А.С.

Ведущая организация:
Математический институт им. В.А.Стеклова АН СССР, Москва

Защита состоится " " ___________ 1985 года в " " час. на заседании Специализированного совета К047.01.01 при Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований (г.Дубна, Московской области).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан " " ___________ 1985 года.

Ученый секретарь Специализированного совета
кандидат физико-математических наук **В.И.Журавлев**

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Важной задачей теории твердого тела является изучение систем, испытывающих структурные фазовые переходы, обусловленные изменением кристаллографической симметрии решетки. Особенно активно исследование структурных фазовых переходов происходило в последнее десятилетие, в основном, благодаря созданию экспериментальных методов, которые позволили более детально изучать микроскопические свойства. Интерес к структурно-неустойчивым системам вызван прежде всего важностью их практического применения, возможностями использования в различных областях техники. Наиболее широко в настоящее время применяются сегнетоэлектрики, в которых структурный фазовый переход сопровождается появлением спонтанной поляризации и целым рядом аномалий.

Плодотворной теорией, позволившей значительно продвинуться в понимании физики структурных фазовых переходов, явилась теория мягкой фононной моды, согласно которой структурные фазовые переходы происходят из-за неустойчивости кристалла относительно некоторых нормальных мод, которые обращаются в нуль при температуре фазового перехода. Однако в целом ряде экспериментальных работ было показано, что при структурных фазовых переходах часто происходит "замораживание" мягкой фононной моды, то есть в точке перехода она принимает конечное значение, а в функции рассеяния появляется центральный пик при нулевой энергии передачи. В связи с этим возникает проблема построения теории, которая бы объяснила такое поведение.

Одним из возможных механизмов является образование в системах типа смещения в критической области кластеров ближнего порядка, предшествующих возникновению несимметричной фазы. В результате такие системы характеризуются двумя видами движений: "быстрыми" - малыми колебаниями атомов относительно квазиравновесных положений и "медленными" - сильно ангармоническими движениями между соседними потенциальными ямами и, соответственно, двумя временными масштабами. Задача единого описания этих двух типов движений требует выхода за рамки линейной теории и последовательного учета существенно нелинейных эффектов. Наиболее сильно нелинейные эффекты проявляются в одномерных и квазиодномерных системах, для описания которых в настоящее время разработаны достаточно мощные теоретические методы. С другой стороны, простота структуры таких соединений позволяет достаточно далеко продвинуться и при экспериментальном их изучении. Все это обуславливает наблюдаемый в последнее время повышенный интерес к низкоразмерным системам.

В реальных кристаллах всегда имеются дефекты, которые оказывают большое влияние на их динамические и термодинамические характеристики, в особенности, когда в них происходит структурный фазовый переход. Изучение такого воздействия представляет собой сложную задачу, которая не решена и в настоящее время. Отдельный интерес вызывают твердые растворы со структурно-неустойчивыми решетками.

Цель работы состоит в разработке последовательного описания динамики решетки при структурных фазовых переходах с использованием модельного подхода, в решении основных проблем, связанных с нелинейной динамикой в области фазового перехода и влиянием дефектов на фазовый переход.

Научная новизна. Впервые для одномерной модели структурного фазового перехода предложено самосогласованное описание фононов и квазисолитонов, получена зависимость частоты мягкой фононной моды и энергии квазисолитонов от температуры. Исследовано влияние примесей на пиннинг солитонов в одномерной модели, на изменение их формы, на динамическую восприимчивость системы. Впервые получены температурные зависимости частоты мягкой фононной моды и одночастичной функции распределения квазиравновесных положений при наличии динамических кластеров ближнего порядка для квазиодномерных сегнетоэлектриков. Изучены аномалии при распространении ультразвука в сегнетоэлектриках с сильноанизотропным спектром флуктуаций параметра порядка. В приближении виртуального кристалла получены нелинейные зависимости температуры фазового перехода в твердых растворах от концентрации компонент. Определены температурные зависимости частоты и затухания мягкой фононной моды при произвольной концентрации примесей. Изучено влияние дефектов четырех типов на динамику структурного фазового перехода.

Научная и практическая ценность работы. Представленные в диссертации исследования посвящены описанию структурно-неустойчивых кристаллов с использованием модельного подхода. Изучены структурные фазовые переходы в одномерных, квазиодномерный и трехмерных системах, учтено влияние дефектов на динамические характеристики, такие как частота и затухание мягкой фононной моды. Полученные результаты позволяют описать ряд экспериментальных данных, полученных в квазиодномерных сегнетоэлектриках, ферроэластиках, а также носят предсказательный характер возможного поведения реальных систем.

Для защиты выдвигаются следующие основные результаты, полученные в диссертации.

I. Изучено температурное поведение частоты мягкой фононной моды и центрального пика при различных значениях квазиимпульса в одномерной модели структурного фазового перехода с учетом нелинейных возбуждений.

2. Выяснено влияние примесей на поведение квазисолитонов в одномерной модели φ^4. Получено выражение для восприимчивости модели. Рассмотрены возможные механизмы закрепления амплитудных солитонов в в одномерной модели пайерлсовского перехода. Сделаны оценки для критической концентрации, при которой солитоны образуют незакрепленную проводящую решетку.

3. Получена температурная зависимость частоты мягкой фононной моды в квазиодномерных сегнетоэлектриках. Вычислена одночастичная функция распределения квазиравновесных положений, подтверждающая кластерную картину фазового перехода. Изучено температурное поведение динамической восприимчивости и структурного фактора с учетом дальнодействующего кулоновского диполь-дипольного взаимодействия.

4. Изучены аномалии при распространении ультразвука в сегнетоэлектриках с сильноанизотропным спектром флуктуаций параметра порядка. Показано, что имеется кроссовер из области квазиодномерных флуктуаций в область трехмерных, в которой особенности значительно усилены по сравнению с одноосными изотропными сегнетоэлектриками.

5. Получены концентрационные зависимости температуры фазового перехода в структурно-неустойчивых твердых растворах для различных силовых констант взаимодействия компонент.

6. Определены температурные и концентрационные зависимости частоты мягкой фононной моды и ее затухания при наличии в системе произвольной концентрации примесей четырех типов. Показано, что примеси могут приводить к возникновению структурного фазового перехода в квантовом параэлектрике.

Апробация работы и публикации. Основные результаты диссертации докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики ОИЯИ, а также на II Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1981), II Всесоюзном семинаре по физике сегнетоэластиков (Воронеж, 1982), Шестой Республиканской конференции по статистической физике (Львов, 1982), Всесоюзном семинаре "Фазовые переходы в сегнетоэлектриках" (Москва, 1984), III Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1984), Международной конференции "Волны зарядовой плотности в твердых телах" (Будапешт, 1984).

По теме диссертации опубликовано 9 работ в советской и зарубежной печати.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения; содержит 154 страницы машинописного текста, включая 3 таблицы, 23 рисунка и библиографический список литературы из 112 названий.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во Введении обсуждаются проблемы, возникающие при описании динамики структурных фазовых переходов, дано краткое изложение материала диссертации.

Первая глава носит вводный характер. В ней проводится рассмотрение скалярной решеточной модели X^4, описывающей структурные фазовые переходы в системах, в которых имеется мягкая фононная мода, а также описано приближение первого порядка в методе самосогласованных фононов.

В разделе I.I показано, как из полного гамильтониана системы можно получить динамическую микроскопическую модель структурного фазового перехода для одной выделенной критической моды – решеточную скалярную модель X^4:

$$H=\sum_n\left\{\frac{p_n^2}{2m}-\frac{A}{2}x_n^2+\frac{B}{4}x_n^4+\frac{1}{4}\sum_{n\neq n'}\varphi_{nn'}(x_n-x_{n'})^2\right\}, \qquad (I)$$

где x_n – локальные нормальные координаты, p_n – сопряженные импульсы, m – приведенная масса ячейки. Константы взаимодействия $\varphi_{nn'}$ описывают гармоническую связь ячеек в узлах n и n'. Система с гамильтонианом (I) характеризуется двумя энергетическими параметрами: глубиной одночастичного потенциала-

$$V_0=A^2/4B$$

и относительной энергией связи частиц-

$$V_{cb}=\varphi_0 A/B\ ,\quad \varphi_0=\sum_{n'}\varphi_{nn'}\ ,$$

а также параметром квантовости-

$$\lambda=\hbar\omega_0/4V_0\ ,\quad \omega_0^2=A/m.$$

Гамильтониан (I) описывает два предельных случая структурных фазовых переходов: типа смещения и типа порядок-беспорядок, в зависимости от величины параметра $f_0=V_{cb}/4V_0$. Если $f_0<$ I, то фазовый переход по типу близок к переходу типа порядок-беспорядок, если же $f_0>$ I – фазовый переход относится к типу смещения. Локальную нормальную координату x_n можно представить в виде

$$x_n=s_n+u_n\ , \qquad (2)$$

где величина s_n описывает изменение положений равновесия ионов при структурном переходе из симметричной в несимметричную фазу, а u_n – малые быстрые смещения относительно равновесных положений s_n.

В разделе I.2 изложена теория самосогласованных фононов в приближении первого порядка. Данное приближение позволяет рассматривать флуктуационные эффекты в модели без использования разложения по малому параметру.

Вторая глава посвящена изучению динамики структурного фазового перехода в одномерных системах /I/, а также исследованию влияния дефектов на свойства квазисолитонов /2,3/.

В разделе 2.I рассмотрена одномерная модель структурного фазового перехода типа смещения (I), для которой характерно наличие двух временных масштабов и соответственно – двух типов элементарных возбуждений (квазисолитонов и фононов). На основе вариационного принципа Боголюбова для свободной энергии построено самосогласованное описание квазисолитонов и фононов. Частота фононов определяется соотношением

$$\bar\omega_{\vec q}^2=A(\bar\Delta+f_0-f_{\vec q})\ . \qquad (3)$$

В выражении (3) $\bar\Delta$ – щель в фононном спектре

$$\bar\Delta=3\frac{B}{A}\langle\overline{s^2}\rangle-\bar a\ ,\quad \bar a=1-3\frac{B}{A}\langle\overline{u^2}\rangle, \qquad (4)$$

а $f_{\vec q}$ – фурье-образ взаимодействия

$$f_{\vec q}=\frac{\varphi_{\vec q}}{A}=\frac{1}{AN}\sum_{n\neq n'}\varphi_{nn'}e^{i\vec q(\vec R_n-\vec R_{n'})}\ . \qquad (5)$$

Фононная корреляционная функция $\langle\overline{u^2}\rangle$ определяется как

$$\langle\overline{u^2}\rangle=\frac{1}{mN}\sum_{\vec q}\frac{1}{2\bar\omega_{\vec q}}\,\mathrm{cth}\frac{\bar\omega_{\vec q}}{2T}\ . \qquad (6)$$

Уравнение для квазиравновесных положений s в одномерном случае имеет вид

$$-\frac{\varphi_0 l^2}{2}\frac{\partial^2 s}{\partial y^2}-A\bar a s+Bs^3=0\ . \qquad (7)$$

Вычисление среднего квадрата квазиравновесных положений $\langle\overline{s^2}\rangle$ проводится с использованием статистической суммы разреженного газа квазисолитонов, и выражение для него может быть представлено в форме

$$\langle\overline{s^2}\rangle=\frac{A\bar a}{B}\exp\left\{-\frac{2\sqrt2\,\xi_0\bar n_k}{\sqrt{\bar a}}\right\}, \qquad (8)$$

где $\bar n_k$ – плотность кинков в системе

$$\overline{n}_K = \left(\frac{2\pi T}{m^{*}\overline{B}^{2}}\right)^{1/2} e^{-E_0/T} . \qquad (9)$$

В (8),(9) ξ_0 – ширина, m^* – эффективная масса и E_0 – энергия доменной стенки соответственно. В этом же разделе определена также динамическая корреляционная функция квазисолитонов $\langle s(y,t)\,s(0,0)\rangle$, используя которую можно получить функцию рассеяния.

В разделе 2.2 рассмотрено поведение спектра возбуждений в одномерной модели на основе численного решения полученной в разделе 2.I самосогласованной системы уравнений. Отметим, что вычисление корреляционной функции $\overline{\langle u^2\rangle}$ проводилось с заменой суммирования по $\vec{q}$ интегрированием по частоте с дебаевской функцией распределения $g(\omega^2) = 3\omega/(2f_0)^{3/2}$ согласно соотношению:

$$\frac{B}{A}\overline{\langle u^2\rangle} = \frac{\lambda}{2}\int_0^{\sqrt{2}f_0}\frac{g(\omega^2)\,d\omega^2}{\sqrt{\Delta+\omega^2}}\,\mathrm{cth}\,\frac{\lambda\sqrt{\Delta+\omega^2}}{2\theta} . \qquad (10)$$

Здесь $\theta = T/(A^2/B)$ – безразмерная температура, λ – параметр квантовости.

Численный анализ показал, что в отличие от классической теории мягкой фононной моды в данном случае ее частота при приближении к температуре фазового перехода (в одномерной модели за температуру перехода можно считать T = 0) не уменьшается, а увеличивается, что связано с образованием при определенной температуре $\theta = \theta_0$ солитонных возбуждений. В этом же разделе изучено температурное поведение интенсивности и ширины центрального пика в зависимости от квазиимпульса.

В разделе 2.3 исследуется динамика квазисолитонов в модели φ^4 с дефектами. Рассмотрено изменение формы кинка при его взаимодействии с примесями и закрепление кинка на примесях. Показано, что при достаточно больших ширинах кинков ($Z = \xi_0/\ell > 2$) основной вклад в пиннинг вносят примеси, и что существует критическая концентрация кинков, при которой они образуют подвижную решетку и могут распространяться по цепочке без затрат энергии. Вычислена функция рассеяния на квазисолитонах в присутствии примесей. Исследуется также пиннинг квазисолитонов в одномерной модели пайерлсовского перехода в зависимости от концентрации примесей и температуры.

<u>Глава третья</u> посвящена изучению особенностей динамики структурных фазовых переходов в квазиодномерных системах [4,5].

В разделе 3.I приведен гамильтониан модели квазиодномерного сегнетоэлектрика, обладающего сильной анизотропией, поскольку константы взаимодействия внутри цепочки во много раз больше констант взаимодействия ячеек из соседних цепочек. Как и во второй главе, на основе вариационного принципа Боголюбова для свободной энергии построена самосогласованная теория фононов и динамических кластеров, в которой частота фононов определяется из уравнений вида (3),(4), а средний квадрат квазиравновесных положений находится с использованием одночастичной функции распределения квазиравновесных положений $P(s,p,t)$:

$$\langle s^2\rangle = \iint_{-\infty}^{\infty} s^2 P(s,p,t)\,ds\,dp . \qquad (11)$$

В свою очередь, функцию $P(s,p,t)$ находим с помощью интегрального уравнения для оператора перехода и стохастических уравнений Фоккера-Планка.

В разделе 3.2 исследуется поведение мягкой фононной моды в квазиодномерных сегнетоэлектриках с учетом дальнодействующего кулоновского диполь-дипольного взаимодействия, получена динамическая восприимчивость фононной системы, определяющая сильноанизотропный спектр флуктуаций. Из стационарного уравнения для оператора перехода найдено выражение для равновесной функции распределения квазиравновесных положений $P(s) \equiv \int dp\, P_{eq}(s,p)$, которое имеет вид

$$P(s) = \begin{cases} e^{\beta V'(s)}\left[\sqrt{0{,}5\left(1+\frac{\delta}{2J_0\bar{s}_0^2}\right)}\,\Psi_{os}(s) + \sqrt{0{,}5\left(1-\frac{\delta}{2J_0\bar{s}_0^2}\right)}\,\Psi_{oa}(s)\right]^2, & T \le T_c \\ e^{\beta V'(s)}\,\Psi_{os}^2(s), & T > T_c . \end{cases} \qquad (12)$$

В (12) $V'(s) = -A\bar{a}s^2/2 + Bs^4/4$ – перенормированный двухъямный одночастичный потенциал, $\Psi_{os}(s)$ и $\Psi_{oa}(s)$ – пробные собственные функции уравнения для ангармонического осциллятора, $\delta = \mathcal{E}_{oa} - \mathcal{E}_{os}$, где $\mathcal{E}_{oa}$ и $\mathcal{E}_{os}$ – собственные значения. J_0 – константа междуцепочечного взаимодействия.

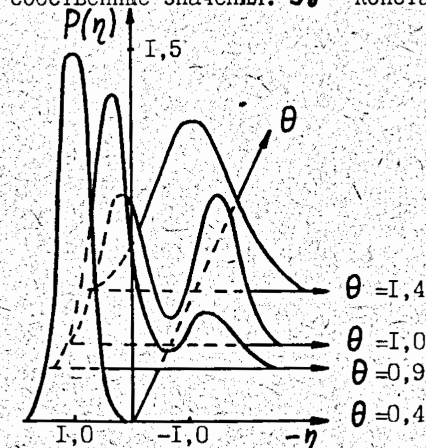

Рис. I.

Параметр порядка $\bar{s}$, средний квадрат квазиравновесных положений $\overline{s^2}$, а также статическая восприимчивость системы вычислены с использованием функции распределения $P(s)$ (12). Полученная в разделе 3.2 самосогласованная система уравнений решалась численно. На рис. I показано температурное поведение функции распределения квазиравновесных положений $P(\eta)$ ($\eta = \sqrt{B/A}\,s$, $j_0 = J_0/A = 10^{-2}$, $\bar{\lambda} = \lambda^2/A = 2$, $\theta = T/(A^2/B)$, $\theta_c = 0{,}95$). Такое поведение функции распределения подтверждает кластерную картину структурного фазового перехода в квазиодномерных сегнетоэлектриках. Кроме того, установлено температурное поведение частоты мягкой фононной моды в области фазового перехода /4,5/. Показано, что частота мягкого фонона уменьшается до некоторого значения при температуре θ_1, а затем начинает возрастать при дальнейшем уменьшении температуры, что связано с образованием в системе кластеров ближнего порядка. Фазовый переход происходит при температуре $\theta_c < \theta_1$, когда обращается в нуль параметр порядка и расходится статическая восприимчивость системы.

В разделе 3.3 исследована динамика стенок кластеров, получено выражение для функции рассеяния на стенках кластеров, изучено ее температурное поведение.

В разделе 3.4 рассмотрено влияние сильноанизотропного спектра критических флуктуаций параметра порядка на акустические аномалии при распространении ультразвука в квазиодномерных сегнетоэлектриках /6/. Проведен качественный анализ полученных выражений для изменения скорости и затухания ультразвука, показано, что по мере приближения к T_c меняется вид критических аномалий: происходит кроссовер из области квазиодномерных флуктуаций в область трехмерных, определяющих критическую точку. В области трехмерных флуктуаций особенности усиливаются по сравнению с изотропным одноосным сегнетоэлектриком в отношении $(f_0/j_0)^{3/2} \sim 10^3-10^4$, причем это усиление возникает за счет множителя перед температурным членом при таком же, как и в изотропном случае, критическом индексе. Сделаны численные расчеты с использованием псевдоспиновой модели. Развитая теория качественно объясняет эксперименты по распространению ультразвука в квазиодномерном сегнетоэлектрике – дигидрофосфате цезия.

Глава четвертая посвящена изучению влияния дефектов на структурные фазовые переходы в трехмерных системах.

В разделе 4.I рассмотрена модель структурного фазового перехода в кристалле при наличии дефектов, гамильтониан которой имеет вид

$$H=\sum_{n\alpha} t_{n\alpha}\left[\frac{p_{n\alpha}^2}{2m_\alpha}-\frac{A_\alpha}{2}x_{n\alpha}^2+\frac{B}{4}x_{n\alpha}^4\right]+\frac{1}{4}\sum_{\substack{nn'\\ \alpha\beta}} t_{n\alpha}t_{n'\beta}\varphi_{nn'}^{\alpha\beta}\left(x_{n\alpha}-x_{n'\beta}\right)^2. \qquad (I3)$$

В (I3) $t_{n\alpha}$ – проекционный оператор, причем $t_{n1}=1-t_{n2}=1$ (или 0), если в узле решетки n находится элементарная ячейка сорта $\alpha = 1$ (или $\alpha = 2$), $x_{n\alpha}$, $p_{n\alpha}$ – локальные нормальные координаты и сопряженные импульсы, m_α – приведенная масса ячейки. В этом же разделе проведена классификация возможных типов дефектов, определяемая соотношением параметров одночастичных потенциалов основной и дефектной ячеек. Получены уравнения для определения параметров порядка в решетке:

$$\begin{aligned} &s_1\left[B_1 s_1^2+3B_1\langle u_{n1}^2\rangle-A_1\right]+c_2\varphi_0^{12}(s_1-s_2)=0\\ &s_2\left[B_2 s_2^2+3B_2\langle u_{n2}^2\rangle-A_2\right]+c_1\varphi_0^{12}(s_2-s_1)=0, \end{aligned} \qquad (I4)$$

где введена концентрация компоненты сорта α : $c_\alpha = \langle t_{n\alpha}\rangle_c$.

В разделе 4.2 модель (I3) исследуется в приближениях виртуального кристалла и самосогласованных фононов первого порядка /7,8/. Вычислена зависимость температуры перехода в структурно-неустойчивых твердых растворах от концентрации входящих в них компонент. При различных константах взаимодействия компонент твердого раствора $\varphi^{\alpha\beta}$, где $\alpha, \beta = 1,2$, зависимость температуры фазового перехода от концентрации может быть сильно нелинейной (квадратичной). Полученные в этом разделе выражения были использованы для объяснения наблюдаемой в эксперименте концентрационной зависимости температуры перехода для твердого раствора галогенидов одновалентной ртути $Hg_2(Cl_x Br_{1-x})_2$. При одном подгоночном параметре $\varphi_0^{12}/\varphi_0^{11}$ удалось хорошо аппроксимировать экспериментальную кривую, остальные параметры модели (I3) были определены из независимых экспериментов по рассеянию нейтронов.

В разделе 4.3 модель (I3) изучалась в приближении когерентного потенциала для концентрации дефектов $0 \le x \le 1$ /9/, при этом базисная решетка выбиралась в приближении виртуального кристалла, в котором частота мягкой фононной моды записывается как

$$\omega_\infty^2 = c_1\Delta_1 + c_2\Delta_2, \qquad (I5)$$

а Δ_α – одночастичные потенциалы основной и дефектной ячеек, которые могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} &\Delta_1 = 3\frac{B_1}{A_1}\left(s_1^2+\langle u_{n1}^2\rangle\right)-1, \qquad (I6)\\ &\Delta_2 = 3\varkappa\frac{B_1}{A_1}\left(s_2^2+\langle u_{n2}^2\rangle\right)-\gamma, \quad \varkappa=\frac{B_2}{B_1}, \ \gamma=\frac{A_2}{A_1}. \end{aligned}$$

Тогда в приближении когерентного потенциала частота мягкой фононной моды определяется соотношением

$$\omega_{q=0}^2(T) = \omega_\infty^2 + \mathrm{Re}\,\Sigma\left(T, \omega=\omega_{q=0}(T)\right), \qquad (I7)$$

а ее затухание:

$$\Gamma_0(T) = \frac{1}{\omega_{q=0}(T)}\,\mathrm{Im}\,\Sigma\left(T, \omega=\omega_{q=0}(T)\right). \qquad (I8)$$

В (I7),(I8) $\Sigma(T,\omega)$ – массовый оператор, учитывающий процессы рассеяния фононов на дефектах.

В разделе 4.3.2 рассмотрено влияние различных дефектов на частоту и затухание мягкой фононной моды. Жесткие дефекты ($A_2 < 0$) приводят к уменьшению температуры фазового перехода и при определенной их концентрации фазовый переход исчезает. В этом случае при $T \to T_c$ ω_∞^2 уменьшается, а $\delta^2 = -\mathrm{Re}(T, \omega = \omega_{q=0}(T)) \neq 0$. Затухание же Γ_0 при $T \to T_c$ увеличивается. Для мягких дефектов в зависимости от соотношения глубин одночастичных потенциалов основной и дефектной ячеек температура фазового перехода может как увеличиваться, так и уменьшаться. При $T \to T_c$ ω_∞^2, δ^2 и Γ_0 уменьшаются. Для случая "квантовой" решетки, когда частота нулевых колебаний настолько велика, что в чистой системе фазовый переход не происходит, мягкие дефекты могут приводить к возникновению фазового перехода, что, по-видимому, имеет место в квантовом сегнетоэлектрике титанате стронция при введении примесей бария. На рис. 2 показана зависимость температуры фазового перехода в квантовом сегнетоэлектрике с мягкими дефектами при следующих значениях безразмерных параметров модели (13) $\gamma = 10$, $\varkappa = 10$, $f_0 = 20$, $\lambda_2 = 10^{-2}$, $\lambda_1 = \sqrt{A_1/m_1}/(A_1^2/B_1) = 3$. При введении в решетку замороженных поляризованных дефектов температура фазового перехода меняется в зависимости от знака поляризации: если поляризация дефекта совпадает по знаку с поляризацией параметра порядка в основной решетке (определяемой знаком внешнего поля), то температура фазового перехода повышается, в противном случае – понижается. Более интересный эффект состоит в том, что такие дефекты приводят к возникновению в системе размытого фазового перехода, при этом $\omega_{q=0}^2(T=T_c) \neq 0$, так как при $T \to T_c$ ω_∞^2 уменьшается плавным образом, а δ^2 увеличивается, затухание Γ_0 в области максимума восприимчивости также возрастает. Таким образом, статическая восприимчивость системы в точке перехода не обращается в бесконечность, как в предыдущих случаях, а имеет максимум, характерный для размытых фазовых переходов. Положение этого максимума слабо изменяется с частотой внешнего поля ν. В таблице приведены значения параметров мягкой моды, соответствующие максимуму восприимчивости при $\nu = 0$ в зависимости от концентрации дефектов, поляризованных так же, как параметр порядка в основной решетке. В этом случае параметры модели (13) имеют следующие значения:

$\gamma = 10$, $\varkappa = 10$, $f_0 = 20$, $\lambda_1 = \lambda_2 = 10^{-2}$.

При концентрации дефектов $C_2 = 0,1$ система оказывается полностью ими поляризована.

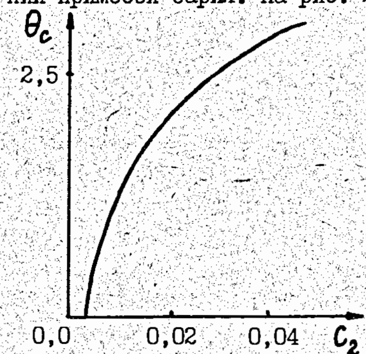

Рис. 2

ТАБЛИЦА

C_2	ω_∞^2	δ^2	Γ_0	θ_m
0,001	0,20	0,015	$2,7 \cdot 10^{-6}$	5,4
0,005	0,54	0,078	$3,1 \cdot 10^{-5}$	6,3
0,025	1,60	0,384	$5,0 \cdot 10^{-4}$	6,9
0,050	2,55	0,718	$1,6 \cdot 10^{-3}$	6,0
0,100	3,80	1,030	$5,3 \cdot 10^{-3}$	фазовый переход отсутствует

В заключении приведены результаты, выносимые на защиту.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Аксенов В.Л., Дидык А.Ю., Юшанхай В.Ю. Вариационный принцип Боголюбова в нелинейной модели фазового перехода смещения.- В сб.: II Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики, ОИЯИ, Д17-81-758, Дубна: ОИЯИ, 1981, с. 289-299.
2. Aksenov V.L., Didyk A.Yu., Zakula R. Pinning of Amplitude Solitons in Peierls Systems with Impurities.- Lect. Notes in Phys., 1984, v. 217, p. 495-498.
3. Аксенов В.Л., Дидык А.Ю., Жакула Р. Динамика кинков в модели φ^4 с дефектами.- В сб.: III Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. Тезисы докладов. ОИЯИ, Д17-84-407, Дубна, 1984, с. 7.
4. Аксенов В.Л., Дидык А.Ю. Мягкая фононная мода и центральный пик в квазиодномерных сегнетоэлектриках.- Сообщения ОИЯИ, Р17-84-406, Дубна: ОИЯИ, 1984, 16 с.; Изв.АН СССР, сер.физ., 1985, 49, № 2, с. 314-317.
5. Aksenov V.L., Didyk A.Yu. Precursor Clusters in Quasi-One-Dimensional Systems.- Phys.Lett. A, 1984, 105, N 7, p. 368-370.
6. Aksenov V.L., Didyk A.Yu., Plakida N.M. Ultrasonic Attenuation in Quasi-One-Dimensional Ferroelectrics.- phys. status solidi(b), 1984, 124, N 45, p. 45-54.
7. Аксенов В.Л., Дидык А.Ю. Влияние дефектов на динамику структурного фазового перехода.- В сб.: Шестая республиканская конференция по статистической физике. Тезисы докладов. ИТФ АН УССР, Киев, 1982, с. 7.
8. Аксенов В.Л., Дидык А.Ю. Фазовые переходы в структурно-неустойчивых твердых растворах.- Препринт ОИЯИ Р17-82-165, Дубна: ОИЯИ, 1982, 11 с.
9. Аксенов В.Л., Дидык А.Ю. Влияние дефектов на поведение мягкой фононной моды.- ФТТ, 1984, 26, № 8, с. 2437-2442.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 января 1985 года.