

УДК 536.48

©1995

**ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРНАЯ МОДУЛЯЦИЯ,  
ОБУСЛОВЛЕННАЯ ЭКРАНИРОВАННОЙ  
СЕГНЕТОЭЛАСТИЧНОСТЬЮ**

*Е. В. Холопов, Т. М. Инербаев*

Институт неорганической химии Сибирского отделения  
Российской академии наук,  
630090, Новосибирск, Россия

(Поступила в Редакцию 15 августа 1994 г.  
В окончательной редакции 22 марта 1995 г.)

Изотропное сегнетоэластическое взаимодействие изинговского параметра порядка с упругой средой модифицировано эффектом экранировки ближайших соседей. В приближении самосогласованных полей исследовано возникновение простейшей пространственной модуляции с волновым вектором высокой симметрии. Получены фазовая диаграмма в зависимости от параметра экранировки, а также типичные температурные фазовые диаграммы. Результат распространен на фазовые переходы с концентрационным упорядочением.

Спонтанное возникновение сверхпериода свойственно как новым классам синтезируемых материалов [1], так и классическим системам [2]. Перспективность таких соединений определяет неослабевающий интерес к природе этого явления. Особую роль может при этом играть пониженная размерность подсистем, выделяемых в общей структуре соответствующего материала. Так, одномерные проводящие системы демонстрируют пайерлсовскую неустойчивость [3], которая может проявляться и в высокоразмерных системах при наличии конгруэнтных участков на поверхности Ферми [4]. Модель Френкеля–Конторовой [5,6] описывает механизм, порождающий сверхпериод в низкоразмерных непроводящих системах, где существенными могут также быть характерные особенности в потенциалах взаимодействия [7,8]. Отметим, что присутствие низкоразмерных подструктур может обуславливать фазовые переходы с возникновением сверхпериода и в высокосимметричных системах [9,10]. Общим элементом, ответственным за появление сверхпериода, является при этом конкуренция внутренних взаимодействий [11], направленный характер которых определяет типы возникающей структурной модуляции [12]. В этой связи, однако, можно выделить такие эффекты, как атомное упорядочение [13] или упорядочение вакансий [14], когда взаимодействие с окружающей средой достаточно изотропно, так что свойственный данной ситуации сегнетоэластический тип взаимодействия, для которого в общем случае также

возможен эффект конкуренции [15, 16], вырождается в частный случай взаимодействия с локальным изменением объема. Как показано далее, такой изотропный механизм способен объяснить и возникновение смешанного промежуточного состояния в собственных сегнетоэластиках [17].

В настоящей работе обсуждается эффект экранирующей делокализации сегнетоэластического взаимодействия в рамках модели с изоморфным фазовым переходом [18]. Оказывается, что даже в случае простейшей реализации это порождает эффективную конкуренцию действующих сил, приводящую к модуляции структуры. Микроскопический характер данного эффекта принципиально отличает его от длинноволновой делокализации, рассмотренной, например, в [19].

## 1. Нелокальное сегнетоэластическое взаимодействие

Пусть решетка, в узлах которой расположены двухуровневые системы, погружена в упругоизотропную среду и взаимодействует только с флуктуацией объема. Поскольку масштаб локальной деформации может существенно превосходить размеры порождающего ее источника, естественно предположить, что локальное состояние параметра порядка в некотором узле решетки не только вызывает деформацию с центром в данном узле, но оказывается также на величине деформации, порождаемой состояниями на ближайших соседних узлах, причем в первую очередь тогда, когда эти состояния отличны от данного. Гамильтониан, учитывающий такой эффект, можно записать в виде

$$H = \sum_i [J_0 + g u_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}_i)] \eta_i + H_s + H_e. \quad (1)$$

Здесь

$$H_s = -g_1 \sum_i \eta_i \left[ \Lambda_i^+ \sum_\gamma \Lambda_{i+\gamma}^- + \Lambda_i^- \sum_\gamma \Lambda_{i+\gamma}^+ \right] u_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}_i), \quad (2)$$

$H_e$  — гамильтониан упругой изотропной среды,  $u_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_i)$  — тензор деформации в точке  $\mathbf{r}_i$ , по повторяющимся тензорным индексам подразумевается суммирование. Параметр  $\eta_i = \pm 1$  задает состояния двухуровневой системы со степенями вырождения  $q_\pm$ , расположенной в узле  $i$  решетки,  $J_0 + g u_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}_i)$  — соответствующая разность энергии состояний, зависящая от деформации в узле  $i$ ,  $\Lambda^\pm = (1 \pm \eta_i)/2$  — проекционные операторы на состояния с  $\eta_i = \pm 1$  соответственно. Суммирование по  $i$  производится по всем  $N$  узлам решетки,  $\gamma$  пробегает по всем  $z$ -ближайшим соседям каждого  $i$ -го узла,  $g$  и  $g_1$  — константы линейной стрикции. Выделяя в гамильтониане часть, связанную с деформацией, перепишем (1) в виде

$$H = H_e + J_0 \sum_i \eta_i + g \sum_i \psi_i u_{\alpha\alpha}(\mathbf{r}_i), \quad (3)$$

где

$$\psi_i = \eta_i \left( 1 - \frac{tz}{2} \right) + \frac{t}{2} \sum_\gamma \eta_{i+\gamma}, \quad (4)$$

$t = g_1/g$ . Эффект конкуренции взаимодействий особенно очевиден при отрицательном знаке выражения в скобках в правой части (4).

Термодинамический потенциал, получаемый после выделения вклада упругих степеней свободы, согласно процедуре, описанной в [18, 20], приобретает вид

$$\Phi = \tilde{\Phi}_0 + \frac{NG_0}{2}\langle\eta\rangle^2 - T \ln \text{Sp} \left\{ \exp \left[ \beta(P + G_0\langle\eta\rangle) \sum_i \eta_i + \frac{\beta t R}{2} \sum_i \left[ \left(1 - \frac{tz}{2}\right) \eta_i \sum_\gamma \eta_{i+\gamma} + \frac{t}{4} \sum_{\gamma_1 \neq \gamma_2} \eta_{i+\gamma_1} \eta_{i+\gamma_2} \right] \right] \right\}, \quad (5)$$

где

$$G_0 = \frac{g^2}{v} \left( \frac{1}{K} - \frac{1}{\lambda + 2\mu} \right), \quad R = \frac{g^2}{v(\lambda + 2\mu)}, \quad (6)$$

$\tilde{\Phi}_0$  — регулярная часть, не зависящая от параметра порядка,  $T = 1/\beta$  — температура в энергетических единицах,  $\lambda, \mu$  — упругие модули изотропной модели [21],  $K = \lambda = 2\mu/3$ ,  $v$  — объем элементарной ячейки,  $P = gp/K - J_0$ ,  $p$  — внешнее давление, угловые скобки означают среднее значение, при этом, согласно (4),  $\langle\psi\rangle = \langle\eta\rangle$ .

Интересуясь принципиальной возможностью появления неоднородной фазы, ограничимся обсуждением простейшей модуляции с вектором  $\mathbf{k} = (\pi/a)(111)$  в простой кубической решетке с постоянной решеткой  $a$ . Модулированное состояние указанного вида может быть описано двумя эффективными средними параметрами  $\langle\eta\rangle$  и  $\langle\eta_{\mathbf{k}}\rangle$ , определяющими соответственно однородную и модулированную компоненты фазы основного состояния.

Фазовый анализ проведем в приближении самосогласованных полей. Переход в (5) к указанным выше средним значениям легко достигается с помощью тождества из работы [22] (см. также [18, 20]). В результате термодинамический потенциал с перенормированным регулярным вкладом  $\Phi_0$  записывается в виде

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2} GN\langle\eta\rangle^2 + \frac{1}{2} MN\langle\eta_{\mathbf{k}}\rangle^2 - \frac{TN}{2} \ln(4q_+q_- \operatorname{ch} x \operatorname{ch} y), \quad (7)$$

где

$$G = G_0 + tzR \left[ 1 - \frac{t(z+1)}{4} \right], \quad M = tzR \left[ \frac{t(3z-1)}{4} - 1 \right], \quad (8)$$

$$\begin{cases} x \\ y \end{cases} = \beta(P + G\langle\eta\rangle \pm M\langle\eta_{\mathbf{k}}\rangle) + \frac{1}{2} \ln \frac{q_+}{q_-}. \quad (9)$$

Самосогласованные средние значения  $\langle\eta\rangle$  и  $\langle\eta_{\mathbf{k}}\rangle$  определяются из уравнений

$$\begin{cases} \langle\eta\rangle \\ \langle\eta_{\mathbf{k}}\rangle \end{cases} = \frac{1}{2} (\operatorname{th} x \pm \operatorname{th} y), \quad (10)$$

соответствующих условиям экстремума  $\Phi$ , где ввиду двухкратного вырождения  $\langle\eta_{\mathbf{k}}\rangle$  по фазе достаточно рассмотреть случай  $\langle\eta_{\mathbf{k}}\rangle > 0$ .

## 2. Фазовые диаграммы

Для выявления областей существования различных решений рассмотрим фазовую диаграмму в плоскости  $(t, P)$  при  $T = 0$ , представленную на рис. 1. Согласно (7)–(10), равновесный фазовый переход между однородными фазами  $\langle \eta \rangle = 1$  и  $\langle \eta \rangle = -1$  происходит вдоль прямой  $P = 0$  и оканчивается в тройных точках при  $M = G$ , где равновесными являются все три фазы. Линии равновесия между модулированной и однородными фазами определяются условием

$$P = \pm(M - G)/2, \quad (11)$$

где выбор знака соответствует границе модулированной фазы с фазой  $\langle \eta \rangle = \pm 1$  соответственно. Таким образом, равновесная модулированная фаза с волновым вектором  $\mathbf{k}$  существует при выполнении одного из неравенств

$$tz > 1 + (1 + \kappa)^{1/2}, \quad tz < 1 - (1 + \kappa)^{1/2}, \quad (12)$$

где  $\kappa = 4\mu/3K$ . Области устойчивости рассматриваемых фаз определяются из уравнений (10) и задаются соотношениями

$$P > -G, \quad P < G, \quad -M < P < M \quad (13)$$

для фаз  $\langle \eta \rangle = 1$ ,  $\langle \eta \rangle = -1$ ,  $\langle \eta_{\mathbf{k}} \rangle = 1$  соответственно.

При конечных температурах формулы (10) определяют минимум  $\Phi$ , если выполняются неравенства

$$T \geq \frac{M}{2} (2 - \operatorname{th}^2 x - \operatorname{th}^2 y), \quad (14)$$

$$\Delta \equiv 1 - \frac{\beta(M + G)}{2} (2 - \operatorname{th}^2 x - \operatorname{th}^2 y) + \beta^2 MG (1 - \operatorname{th}^2 x) (1 - \operatorname{th}^2 y) \geq 0, \quad (15)$$

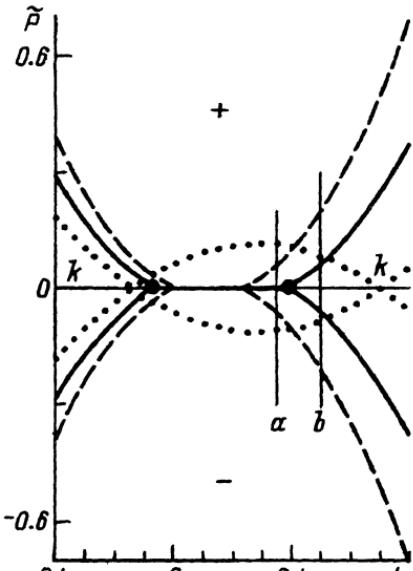


Рис. 1. Фазовая диаграмма в плоскости  $(t, P)$  при  $T = 0$  в случае  $z = 6$ ,  $\kappa = 1$ , где  $\tilde{P} = P/G_0$ . Символами  $+$ ,  $-$ ,  $k$  отмечены области устойчивости однородных фаз с  $\langle \eta \rangle = \pm 1$  и модулированной фазы. Жирные линии, пересекающиеся в тройных (жирных) точках, — линии равновесия фаз, пунктирные линии — спинодали однородных фаз, а штриховые — граничные линии модулированных областей. Сечения  $a$ ,  $b$  соответствуют случаям рис. 2.

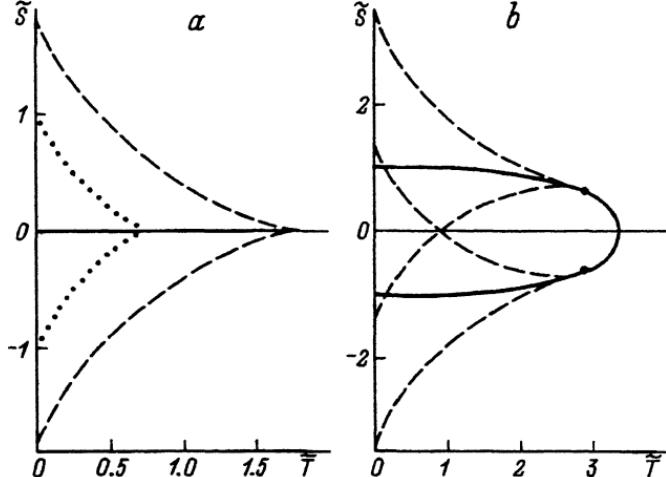


Рис. 2. Фазовая диаграмма в плоскости  $(T, S)$  при  $t = 0.35$  (а) и  $0.5$  (б) при  $z = 6$ ,  $\kappa = 1$ , где  $\tilde{T} = T/G_0$ ,  $\tilde{S} = S/G_0$ .

Жирная линия — линия фазового перехода, окруженная в случае перехода первого рода штриховыми линиями, спинодалью, сходящимися к критической (а) или трикритическим (б) точкам. Пунктирные линии на а ограничивают метастабильную модулированную фазу. На б  $\langle \eta \rangle = 0$  вдоль линии  $S = 0$ .

где знак равенства соответствует условию на спинодаль. В результате уравнение на спинодали имеет вид

$$T = \frac{G + M}{4} (2 - \operatorname{th}^2 x - \operatorname{th}^2 y) + \\ + \left[ \left( \frac{G + M}{4} \right)^2 (2 - \operatorname{th}^2 x - \operatorname{th}^2 y)^2 - MG (1 - \operatorname{th}^2 x) (1 - \operatorname{th}^2 y) \right]^{1/2}. \quad (16)$$

Анализ температурной фазовой диаграммы упрощается, если рассмотреть ее в плоскости  $(S, T)$ , где

$$S = P + \frac{T}{2} \ln \frac{q_+}{q_-}. \quad (17)$$

При  $G > M$  линия равновесного фазового перехода между однородными фазами задается уравнением  $S = 0$  и оканчивается в критической точке  $T = G$ . Спинодалю однородных фаз соответствует совместное решение уравнений (10), (16) при  $\langle \eta_k \rangle = 0$ . При  $0 < M < G$  существует также фаза с  $\langle \eta_k \rangle \neq 0$ , которая, однако, всюду метастабильна. Характерная фазовая диаграмма приведена на рис. 2, а. В случае  $M > G$  фазовая диаграмма имеет вид, изображенный на рис. 2, б. Линия равновесных фазовых переходов расщепляется, приобретая форму петли, внутри которой модулированная фаза существует как равновесная. Особенностью линии равновесия является наличие на ней двух трикритических точек с параметрами

$$T_{\text{tr}} = \frac{2M(M + 2G)}{3(M + G)}, \quad S_{\text{tr}} = \pm \left( \frac{T_{\text{tr}}}{2} \ln \frac{1 + Y}{1 - Y} - GY \right). \quad (18)$$

$$Y = |\langle \eta \rangle_{\text{tr}}| = \left[ \frac{M - G}{3(M + G)} \right]^{1/2}. \quad (19)$$

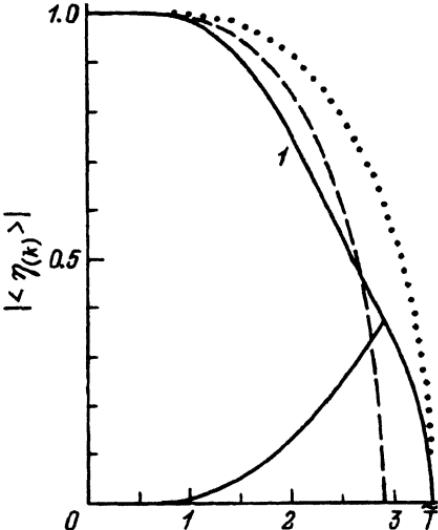


Рис. 3. Значения модулей однородного (сплошные линии с индексом 1 в однородной фазе) и модулированного (штриховая линия) параметров порядка вдоль линии фазового перехода, изображенной на рис. 2, б, в зависимости от температуры ( $\tilde{T} = T/G_0$ ).

Для сравнения пунктиром показано изменение  $\langle \eta_k \rangle$  вдоль линии  $S = 0$ .

Участок равновесной кривой при  $T > T_{tr}$ , являясь одновременно спиралью для обеих разделенных им фаз, соответствует равновесной линии фазовых переходов второго рода.

В отличие от решений [20, 23, 24] расщепление охватывает здесь сразу всю линию равновесных переходов уже при  $M \gtrsim G$ . Действительно, можно показать, что, когда положительный параметр  $(M - G)/M$  мал, линия переходов первого рода (исключая непосредственные окрестности трикритических точек) задается соотношением

$$S = \pm(M - G)f_0(T)/2, \quad (20)$$

где  $f_0(T) > 0$  является решением уравнения  $f_0 = \operatorname{th}(\beta f_0)$ .

На рис. 3 представлено поведение параметров порядка вдоль линии фазовых переходов. Отсюда, в частности, скачок объема определяется разностью амплитуд однородного параметра порядка в соприкасающихся фазах.

Характерными величинами, описывающими поведение рассматриваемой системы в области фазового перехода, являются также аномальная часть теплоемкости и изотермическая сжимаемость, которые получаются непосредственным дифференцированием потенциала (7). С учетом (9), (10), для них находим следующие выражения

$$C_p^a = \frac{N\beta^2}{\Delta} \left\{ [(P + G\langle \eta \rangle)^2 + M^2\langle \eta_k \rangle^2] \left[ 1 - \frac{\operatorname{th}^2 x + \operatorname{th}^2 y}{2} - \beta M(1 - \operatorname{th}^2 x)(1 - \operatorname{th}^2 y) \right] - 4M(P + G\langle \eta \rangle)\langle \eta \rangle\langle \eta_k \rangle^2 \right\}, \quad (21)$$

$$K_{\text{iso}}^{-1} = \frac{3}{4\mu} \left[ \frac{\lambda + 2\mu}{K} \frac{2 - \beta M(2 - \operatorname{th}^2 x - \operatorname{th}^2 y)}{2\Delta} - 1 \right], \quad (22)$$

где  $\Delta$  определяется формулой (15). На линии фазовых переходов второго рода величины (21), (22) испытывают скачки, равные

$$[C_p^a] = \frac{3N}{2\Xi} \left[ 1 - \frac{2\operatorname{th} x(P + G\operatorname{th} x)}{(M - G)(1 - \operatorname{th}^2 x)} \right]^2, \quad [K_{\text{iso}}^{-1}] = \frac{6Mg^2\operatorname{th}^2 x}{vK^2(M - G)\Xi}, \quad (23)$$

что является типичным [18, 25]. Параметр

$$\Xi = (M - G) - 3(M + G) \tanh^2 x \quad (24)$$

обращается в нуль в трикритических точках. Отсюда, согласно (21), (22), при движении в области модулированной фазы с конечным углом к касательной кривой фазового перехода в трикритической точке расходимость термодинамических производных имеет в согласии с общей теорией самосогласованного трикритического поведения [26] корневой характер

$$C_p^a = \frac{N(3ZP_{tr} - M + G)^2}{2(M - G)} \left[ \frac{5M(M + G)}{6(M + 4G)\varepsilon} \right]^{1/2}, \quad (25)$$

$$K_{iso}^{-1} = K^{-1} \left\{ 1 + \frac{g^2(M + 2G)}{vK} \left[ \frac{5M^3}{6(M + G)^3(M + 4G)\varepsilon} \right]^{1/2} \right\}, \quad (26)$$

где

$$\varepsilon = (M + G)(3ZP_{tr} - M + G)(T - T_{tr}) - 2M(M + 2G)Z(P - P_{tr}), \quad (27)$$

$P_{tr}$  определяется формулами (17)–(19),  $Z = \text{sgn}(S_{tr})Y$ ,  $Y$  задается выражением (19). На траектории вдоль касательной, примыкающей к линии равновесного перехода со стороны метастабильной области, выражение (27) обращается в нуль тождественно. Зависимость параметров порядка от температуры имеет при этом вид

$$\langle \eta_k \rangle^2 = \frac{M + 2G}{M} \left[ \frac{T_{tr} - T}{M} - 2Z(\langle \eta \rangle - Z) \right] = \frac{5(M + 2G)}{2M(M + G)(M + 4G)} \times \\ \times \left[ M + 2G + \left( \frac{20G^2 - 12MG - 3M^2}{5} \right)^{1/2} \right] (T_{tr} - T), \quad (28)$$

подтверждая линейный ход  $\langle \eta \rangle$  на рис. 3 и обусловливая регулярное поведение термодинамических производных. Поведение с внешней стороны петлевой линии фазовых переходов всегда регулярно.

### 3. Спонтанная модуляция концентрации

Развитая выше модель может быть также применена к практическому случаю ионного упорядочения или упорядочения вакансий с концентрацией порядка 0.5, когда, скажем, значение  $\eta_i = +1$  описывает ион заданного типа в узле  $i$ , а  $\eta_i = -1$  описывает вакансию или ион другого типа. Пусть концентрация вакансий равна  $c$ , тогда

$$\langle \eta \rangle = 1 - 2c. \quad (29)$$

В качестве возможного типа модуляции вновь ограничимся рассмотрением введенного выше среднего  $\langle \eta_k \rangle$ . Отметим, что при  $c \neq 0.5$  следует говорить о вероятностном заполнении каждого узла и, следовательно, о пространственной модуляции этих вероятностей. Более того, при сильном отклонении  $c$  от значения 0.5 возможно изменение величины характерного вектора  $k$  [13], что выходит за рамки данной работы и

требует отдельного анализа. Термодинамический потенциал в терминах химического потенциала  $\sigma$ , канонически сопряженного переменной  $c$ , можно записать непосредственно с использованием выражения (7) в виде

$$\Omega = \Phi - \frac{\sigma N}{2} \quad (30)$$

с очевидной заменой в формулах (9)  $P$  на  $P - \sigma/2$ . Отметим, что величина  $J_0$ , входящая в определение  $P$ , имеет теперь смысл химического давления. Выражая  $\sigma$  через концентрацию  $c$  с помощью формул (10), (29) и переходя к потенциальну  $F = \Omega + N\sigma c$ , получаем

$$F = \Phi_0 - NP(1-2c) - \frac{NG}{2}(1-2c)^2 - TN \ln(2q_+^{1-c} q_-^c) + \frac{NM}{2}\langle\eta_k\rangle^2 + \frac{NT}{2} \ln \{[4c^2 - D^2(c, w)]^c [4(1-c)^2 - D^2(c, w)]^{1-c}\}, \quad (31)$$

где

$$D(c, w) = \frac{1 + \operatorname{th}^2 w - [(1 - \operatorname{th}^2 w)^2 + 4(1 - 2c)^2 \operatorname{th}^2 w]^{1/2}}{2 \operatorname{th} w}, \quad (32)$$

$w = \beta M\langle\eta_k\rangle$ . Уравнение для параметра  $\langle\eta_k\rangle$ , получающееся из условия экстремума  $F$ , имеет вид

$$\langle\eta_k\rangle = D(c, w). \quad (33)$$

Критическая температура фазового перехода при этом равна

$$T_c = 4c(1-c)M. \quad (34)$$

Предельное значение  $\langle\eta_k\rangle$  при нулевой температуре составляет

$$\langle\eta_k\rangle|_{T=0} = \begin{cases} 2c, & c \leq 0.5, \\ 2(1-c), & c \geq 0.5. \end{cases} \quad (35)$$

При  $c = 0.5$  уравнение (33) имеет стандартный для теории самосогласованного поля вид с гиперболическим тангенсом в правой части [27]. При малых отклонениях величины концентрации от значения 0.5 основная модификация температурного поведения затрагивает область вблизи критической температуры, как показано на рис. 4.

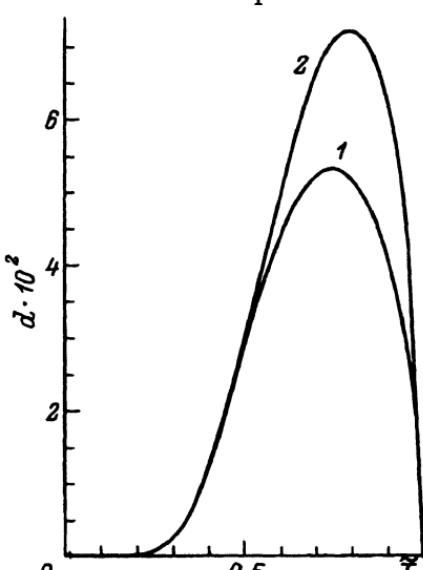


Рис. 4. Отклонение температурной зависимости модулированного параметра порядка в приведенных координатах  $d = \langle\eta_k\rangle/2c - \langle\eta_k\rangle_0$ ,  $\tilde{T} = T/T_c$  от случая концентрации  $c = 0.5$  ( $\langle\eta_k\rangle_0$ ) при  $c = 0.45$  (1) и  $0.4$  (2) с надлежащими значениями  $T_c$ .

Сжимаемость в случае фиксированной концентрации в данной модели не имеет особенностей, а аномальная часть теплоемкости записывается в виде

$$C_p^a = \frac{N\beta^2 M^2 \langle \eta_{\mathbf{k}} \rangle^2 (1 - \tanh^2 w)^2 [4c(1 - c) + \langle \eta_{\mathbf{k}} \rangle^2]}{(1 - \tanh^2 w)^2 - [4c(1 - c) + \langle \eta_{\mathbf{k}} \rangle^2] [\beta M(1 - \tanh^2 w)^2 + 2\tanh^2 w]}. \quad (36)$$

Отсюда скачок теплоемкости в точке фазового перехода составляет

$$[C_p^a] = \frac{4c(1 - c)N}{5 - 16c(1 - c)}. \quad (37)$$

#### 4. Обсуждение результатов

Результаты, полученные в разделе 2, предполагают возможность изменения статистического вклада различных микроскопических конфигураций в основное состояние возникающей фазы, сопровождающееся достаточно большим объемным изменением. Общая структура решения сохраняется с точностью до переопределения величин (8) при рассмотрении векторов  $(\pi/a)(100)$  и  $(\pi/a)(110)$ , что, однако, допускает обсуждение более низких кристаллических симметрий. Типичным примером подобных сегнетоэластических сред является цезий-диспрозиевый молибдат [17, 28–30], в котором фазовый переход происходит при  $T = 38$  К, с шириной области смешанного состояния 2 К. Относительное изменение объема и полный скачок энтропии в расчете на ячейку равны  $\Delta V/V = 0.005$  и  $\Delta s = 1.8$ . Принимая  $a = 9.5$  Å и используя формулы (6)–(10), (20), отсюда получаем оценки для модуля Юнга  $E = 7 \cdot 10^{10}$  Па и параметра  $t = 0.404$ , подтверждающие как сравнительную мягкость данного материала, так и близость происходящего фазового перехода к области трикритической температуры, составляющей по оценке 53 К.

Относительно случая заданной концентрации следует прежде всего сказать о том, что упорядочение с вектором  $(\pi/a)(111)$  соответствует структуре NaCl в случае двухкомпонентных систем, либо упаковке в ГЦК-решетку, если второй компонент является вакансиеей, что характерно для большинства структур химических элементов [31]. Таким образом, плотные упаковки кубической симметрии оказываются в согласии с обсуждаемой здесь моделью сегнетоэластической модуляции. При этом плавление данных структур в модели решеточного газа [27] соответствует, по крайней мере качественно, переходу в неупорядоченное состояние нашей модели.

Определим параметры для случая разупорядочения подсистемы водорода в матрице палладия [13, 32], когда связанной с ионностью системы [33] кулоновской перенормировкой констант  $G$  и  $M$  можно пренебречь. Принимая  $\lambda = 1.136 \cdot 10^{11}$  Па,  $\mu = 0.377 \cdot 10^{11}$  Па,  $a = 4.025$  Å,  $\Delta V/V = 0.264c$ ,  $T_c = 570$  К, согласно формулам (6), (8), (31), (34), получаем значения  $G_0 = 4.20 \cdot 10^{-17}$  Дж,  $g = -1.19 \cdot 10^{-18}$  Дж,  $t = 0.246$ , разумно характеризующие эффект экранировки в  $\beta$ -фазе.

Таким образом, прямой экранирующий эффект ближайших соседей представляет собой еще один принципиальный механизм, приводящий к пространственной структурной модуляции. Конечно, вопрос выбора конкретного вектора модуляции должен определяться структурными особенностями рассматриваемой системы и, более того, может быть

неоднозначен [34]. Важно отметить, что предложенный механизм допускает и несинусоидальные модуляции, характерные для сверхрешеток [1], что позволяет исследовать проблему их устойчивости.

Относительно области применимости использованного в работе самосогласованного приближения следует указать на типичную здесь подавленность флуктуаций однородной компоненты [35], что должно несколько модифицировать общие представления о развитии в системе критических флуктуаций модулированной амплитуды [34,36,37], вклад которых естественно ожидать в области линий фазовых переходов второго рода. В частности, эта область может оказаться заметно уже в силу взаимного влияния однородной и модулированной амплитуд, что, однако, требует дополнительного исследования.

### Список литературы

- [1] De la Plaza J.A., Otera-Dias L.C. *J. Less-Comm. Met.* **110**, 1, 2, 371 (1985).
- [2] Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н. *Фазовые переходы и симметрия кристаллов*. М. (1984). 248 с.
- [3] Булаевский Л.Н. *УФН* **115**, 2, 263 (1975).
- [4] Overhauser A.W. *Adv. Phys.* **27**, 3, 343 (1978).
- [5] Конторова Т.А., Френкель Я.И. *ЖЭТФ* **8**, 12, 1340 (1938).
- [6] Frank F.C., van der Merwe J.H. *Proc. Roy. Soc.* **198**, 1052, 205, 216 (1949).
- [7] Kholopov E.V. *Solid State Commun.* **47**, 3, 187 (1983).
- [8] Marchand M., Hook K., Caillé A. *Phys. Rev. B* **37**, 4, 1898 (1988).
- [9] Холопов Е.В., Панич А.М., Мороз Н.К., Кригер Ю.Г. *ЖЭТФ* **84**, 3, 1091 (1983).
- [10] Kholopov E.V., Panich A.M., Moroz N.K., Kriger Yu.G. *Phys. Stat. Sol. (b)* **137**, 2, K121 (1986).
- [11] Elliott R.J. *Phys. Rev.* **124**, 2, 346 (1961).
- [12] Bak P. *Rep. Prog. Phys.* **45**, 6, 586 (1982).
- [13] Водород в металлах / Под ред. Г. Алефельда, И. Фелькля. М. (1981). Т. 1, 2.
- [14] Landesman J.P., Christensen A.N., de Novion C.H., Lorenzelli N., Convert P. *J. Phys. C* **18**, 4, 809 (1985).
- [15] Cowley R.A., Bruce A.D. *J. Phys. C* **11**, 17, 3577 (1978).
- [16] Дикштейн И.Е., Тарасенко В.В. *ФТТ* **26**, 4, 1151 (1984).
- [17] Скоробогатова И.В., Савченко Е.М., Звягин А.И. *Изв. АН СССР. Сер. физ.* **47**, 3, 491 (1983).
- [18] Холопов Е.В. *ЖЭТФ* **77**, 1, 293 (1979).
- [19] Villain J., Gordon M.B. *J. Phys. C* **13**, 17, 3117 (1980).
- [20] Kholopov E.V. *J. Stat. Phys.* **48**, 1/2, 215 (1987).
- [21] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теория упругости*. М. (1987). 246 с.
- [22] Kholopov E.V. *Phys. Lett. A* **73**, 5, 6, 377 (1979).
- [23] Холопов Е.В. *ФТТ* **28**, 4, 1265 (1986).
- [24] Kholopov E.V. *J. Phys.: Cond. Matter.* **3**, 29, 5621 (1991).
- [25] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Статистическая физика*. М. (1976). Ч. 1. 584 с.
- [26] Барта Ч., Жигалов В.П., Задохин Б.С., Марков Ю.Ф. *ФТТ* **33**, 9, 2739 (1991).
- [27] Браут Р. *Фазовые переходы*. М. (1967). 288 с.
- [28] Андерс Э.Е., Звягин А.И., Шестаченко Л.С. *ФНТ* **6**, 10, 1356 (1980).
- [29] Ельчанинова С.Д., Звягин А.И., Казей З.А. *ФНТ* **8**, 3, 303 (1982).
- [30] Андерс Э.Е., Старцев С.В. *ФТТ* **34**, 3, 812 (1992).
- [31] Киттель Ч. *Введение в физику твердого тела*. М. (1978). 799 с.
- [32] Sandys-Wunsch M., Manchester F.D. *J. Phys.: Cond. Matter.* **4**, 9, 2139 (1992).
- [33] Sokoloff J.B. *Phys. Rev. B* **13**, 5, 2003 (1976).
- [34] De Simone T., Stratt R.M. *Phys. Rev. B* **32**, 3, 1537 (1985).
- [35] Kholopov E.V. *Solid State Commun.* **37**, 10, 825 (1981).
- [36] Bruce A.D., Cowley R.A. *J. Phys. C* **11**, 17, 3609 (1978).
- [37] Сандлер Ю.М., Александров К.С. *ФТТ* **25**, 12, 3554 (1983).