УДК 537.656

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ НЕСОБСТВЕННЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ ВБЛИЗИ ПЕРЕХОДА НЕСОРАЗМЕРНАЯ—СОРАЗМЕРНАЯ ФАЗА

Б. Р. Гаджиев

Получены температурная и частотная зависимости динамической восприимчивости в несоразмерной фазе вблизи перехода несоразмерная—соразмерная фаза ($T > T_c$). Показано, что в системе возникают два независимых колебания с обычным и необычным температурными зависимостями мод. Обсуждена применимость полученных результатов к описанию экспериментальной ситуации, наблюдаемой в аномальном кристалле $TlGaSe_2$.

Как известно, в кристаллах со смешанным механизмом перехода (порядок—беспорядок и смещение) с характерным значением константы Кюри—Вейса $C \sim 10^3$ K наблюдается сложная температурная зависимость тепловых и диэлектрических свойств [1]. В рамках адиабатического приближения (в динамических уравнениях масса и коэффициент трения, соответствующие поляризации P, полагаются равными нулю) динамическая восприимчивость несобственных сегнетоэлектриков типа K_2SeO_4 обсуждалась в работе [2]. Было показано, что в системе вблизи T_c возникает колебание с частотой $\omega^2 \sim (T-T_c)$. Физически адиабатическое приближение означает, что вторичный параметр порядка (ПП) — поляризация P — адиабатически следует за главным ПП.

Однако, очевидно, следует ожидать, что при переходах со смешанным механизмом перехода указанное приближение может не выполняться. Поэтому следует рассмотреть динамические уравнения вне рамок адиабатического приближения, а именно

$$m_1 \frac{\partial^2 \varphi(x,\ t)}{\partial t^2} + \gamma_1 \frac{\partial \varphi(x,\ t)}{\partial t} = -\frac{\delta F[\varphi,\ P]}{\delta \varphi}, \tag{1}$$

$$m_1^0 \frac{\partial^2 P(x,\ t)}{\partial t^2} + \gamma_1^0 \frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t} = -\frac{\delta F[\varphi,\ P]}{\delta P}, \tag{2}$$

где свободная энергия

$$F = \frac{1}{2x_0} \int\limits_0^{2x_0} f(x)\, dx, \tag{3}$$

а плотность свободной энергии определяется как

$$f(x) = \frac{\alpha}{2} \rho^2 + \frac{\beta}{4} \rho^4 + \gamma \rho^8 \cos 8\varphi - \delta \rho^2 \left(\frac{d\varphi}{dx}\right) + \frac{k}{2} \rho^2 \left(\frac{d\varphi}{dx}\right)^2 +$$

$$+ 2\xi P \rho^4 \sin 4\varphi - \frac{P_2}{\chi_1^0} - PE. \tag{4}$$

Уравнения (1), (2) с учетом (3), (4) принимают вид

$$m_1 \frac{\partial^2 \varphi(x,\ t)}{\partial t^2} + \gamma_1 \frac{\partial \varphi(x,\ t)}{\partial t} = 2\gamma \rho^8 \sin 8\varphi - 8\xi P \rho^4 \cos 4\varphi + k\rho^2 \frac{d^2 \varphi}{dx^2}, \tag{5}$$

$$m_1^0 \frac{\partial^2 P(x,\ t)}{\partial t^2} + \gamma_1^0 \frac{\partial P(x,\ t)}{\partial t} = -2\xi\rho^4 \sin 4\varphi - \frac{P}{\chi_1^0} + E. \tag{6}$$

После подстановки

$$\varphi(x,\ t) = \varphi_0(x) + \Phi(x)\, e^{i\omega t},$$
$$P(x,\ t) = P_1^0 + P_1(x)\, e^{i\omega t}, \qquad E = E_0 e^{i\omega t}, \tag{7}$$

где $\varphi_0(x)$, p_1^0 — решения статических нелинейных уравнений, производя линеаризацию системы (5), (6) по $\Phi(x)$ и $P_1(x)$ вблизи этих решений, получим

$$P_1 = \frac{1}{g}\,[E - 8\xi\rho^4\Phi(x)\cos 4\varphi_0(x)], \tag{8}$$

где

$$g = -m_1^0\omega^2 + i\gamma_1\omega + 1/\chi_1^0,$$
$$\left[-\frac{m_1\omega^2}{k\rho^2} + \frac{i\gamma_1\omega}{k\rho^2} - \frac{64\rho^6}{k}(\gamma + \chi_1^0\xi^2)\cos 8\varphi_0 - \bar\beta\cos^2 4\varphi_0\right]\Phi(x) +$$
$$+ \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = -\frac{8\rho^2\chi_1^0\xi E_0}{g}\cos 4\varphi_0. \tag{9}$$

Отметим, что

$$\bar\beta = (64\rho^6/k)\,[\xi^2/g - \xi^2\chi_1^0], \qquad \lim_{m_1^0,\ \gamma_1^0 \to 0} \bar\beta = 0.$$

Уравнения (9) точно не решаются. Используя метод Боголюбова—Митропольского [3], в первом порядке теории возмущений находим

$$\Phi(x) = 8\rho^2 E_0\xi\cos 4\varphi_0 \Big/ gk\left[\frac{m_1\omega^2}{k\rho^2} - i\frac{\gamma}{k\rho^2} - 64\rho^4\frac{(\gamma + \xi^2\chi_1^0)}{k}\frac{(\chi')^2}{\varkappa^2}\right]. \tag{10}$$

Используя (10), получаем среднюю поляризацию $\bar P$

$$\bar P = \frac{1}{2x_0 g}\int_0^{2x_0}[E_0 - 8\xi\rho^4\Phi(x)\cos 4\varphi_0]\,dx \tag{11}$$

и динамическую восприимчивость $\chi = (\partial P/\partial E)_{E=0}$

$$\chi(\omega) = \frac{1}{g} - \frac{64\rho^2\xi^2}{kg^2}\,\frac{L}{\dfrac{m_1\omega^2}{k\rho^2} - i\dfrac{\gamma\omega}{k\rho^2} - \dfrac{64\rho^6(\gamma + \xi^2\chi_1^0)}{k}\dfrac{(\varkappa')^2}{\varkappa^2}}, \tag{12}$$

где

$$L = [E(\varkappa)/(\varkappa')^2\,\mathrm{K}(\varkappa) - 1]\,((\varkappa')^2/\varkappa^2). \tag{13}$$

Учитывая, что в несоразмерной фазе

$$m_1 = m_0\rho^2, \qquad \gamma_1 = \gamma_0\rho^2, \qquad \varkappa^2 \simeq (\gamma/a^0)\,\rho^6, \qquad (\varkappa')^2 = 3(T - T_c)/(T_I - T_c), \tag{14}$$

для динамической восприимчивости получим

$$\chi(\omega) = \frac{1}{g} + \frac{192a^0(T - T_c)\,\xi^2}{m_0\gamma(T_I - T_c)}\,\frac{L_1}{g^2[(a - \omega^2) + i(\gamma_0/m_0)\,\omega]}, \qquad L_1 = L\frac{\varkappa^2}{(\varkappa')^2}. \tag{15}$$

Коэффициент поглощения $K(\omega)$ пропорционален $\mathrm{Im}\,\chi(\omega)$, причем максимумы $K(\omega)$ определяют температурную зависимость мягких мод. Нетрудно показать, что

$$\mathrm{Im}\,\chi(\omega) = (\chi_1^0)^2\gamma_1^0\frac{\omega}{(1 - m_1^0\chi_1^0\omega^2)^2 + (\gamma_1^0\chi_1^0)^2\omega^2} + \frac{192\gamma_0\xi^2 a^0(T - T_c)L_1}{m_0\gamma(T_I - T_c)} \times$$
$$\times \frac{\omega G(\omega)}{[(1 - m_1^0\chi_1^0\omega^2)^2 + (\gamma_1^0\chi_1^0)^2\omega^2]^2\,[(a - \omega^2)^2 + (\gamma_0/m_0)^2\omega^2]}, \tag{16}$$

где

$$G(\omega)=2(\chi_1^0)^3\gamma_1^0(\alpha-\omega^2)[1-m_1^0\chi_1^0\omega^2]^2+\frac{\gamma_0(\chi_1^0)^2}{m_1^0}[(1-m_1^0\chi_1^0\omega^2)^2-(\gamma_1^0\chi_1^0)^2\omega^2]. \quad (17)$$

Однако нахождение точных максимумов $K(\omega)$, соответствующих (17), несколько затруднительно из-за очень высокой степени возникающих алгебраических уравнений.

Рассмотрим предельный случай, когда $(1/m_1^0)$ конечно, но $m_1^0 \ll m_0$. Считая $\gamma_1^0 \ll \gamma^0$, согласно уравнению (17), для коэффициента поглощения получим

$$K(\omega)\sim\frac{192\alpha^0L_1(T-T_c)\xi^2\gamma_0(\chi_1^0)^2}{m_0^2\gamma(T_I-T_c)}\left[\frac{\omega}{(\alpha-\omega^2)^2+(\gamma^0/m_0)^2\omega^2}+\right.$$

$$\left.+2m_1^0\chi_1^0\frac{\omega^3}{(\alpha-\omega^2)^2+(\gamma_0/m_0)^2\omega^2}\right]. \quad (18)$$

Заметим, что максимум выражения

$$\mathrm{Im}\,\chi_1(\omega)=\omega/[(\alpha-\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2] \quad (19)$$

задается как

$$\omega_{\max}^2={}^1/_3(\alpha-\gamma^2/2)+\sqrt{{}^1/_9(\alpha-\gamma^2/2)^2+\alpha^2}. \quad (20)$$

При $\alpha\to 0$ $\omega_{\max}^2=0$, что соответствует обычной линейной сегнетоэлектрической мягкой моде (при $\gamma=0$, $\omega_{\max}^2\sim\alpha\sim(T-T_c)$). Применительно ко вторичной моде — поляризации P, задаваемой первым слагаемым в (16),

$$\omega_{\max}^2\simeq 1/(m_1^0)^2,$$

и, следовательно, адиабатическое приближение является целесообразным из-за того, что частота P экстремально выше (в самом деле она бесконечна), чем частота главного ПП. Максимум функции в виде

$$\mathrm{Im}\,\chi_2(\omega)=\omega^3/[(\alpha-\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2] \quad (21)$$

определяется выражением

$$\omega_{\max}^2=-(\alpha-\gamma^2/2)+\sqrt{(\alpha-\gamma^2/2)^2+3\alpha^2}. \quad (22)$$

Отметим, что при $\alpha\to 0$ $\omega_{\max}^2=\gamma^2$ конечно. Согласно (19), (22), максимумы слагаемых в (18) не совпадают.

Таким образом, при понижении (α/γ^2) пик поглощения, соответствующий (21), вначале смещается в область малых частот, а затем при $\alpha<(\gamma/2)$ начинает двигаться в противоположном направлении. Для другой моды частота линейно уменьшается с температурой (первое слагаемое в уравнении (20)). Именно такое поведение $K(\omega)$ наблюдалось в аномальном кристалле [4] $TlGaSe_2$.

Таким образом, выход за рамки адиабатического приближения (учет конечности массы поляризации P) показывает, что в целом система ведет себя как два гармонических осциллятора с обычной $\mathrm{Im}\chi(\omega)\sim\omega/[(\alpha-\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2$ и необычной $\mathrm{Im}\,\chi(\omega)\sim\omega^3/[(\alpha-\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2]$ зависимостями числителей от частоты, которые приводят к линейной и нелинейной зависимостям соответствующих частот от температуры. В работе [5] наблюдение в кристаллах $TlGaSe_2$ частоты, определяемой формулой (22), объяснялось присутствием в системе тороидных колебаний. Однако, как известно, фазовый переход в кристаллах $TlGaSe_2$ является структурным и, как показано в настоящей работе, обнаружение частот, определяемых формулами (20), (22), объяснимо в рамках именно такого рассмотрения.

В заключение автор выражает благодарность А. П. Леванюку и Ф. М. Гашимзаде за обсуждения.

Список литературы

[1] Chandhuri B. K., Choudhury K. R., Bonerjee S. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 1. P. 689—714.
[2] Sawada A., Horioka M. // Ferroelectrics. 1986. V. 66. P. 303—312.
[3] Найфе А. Х. Введение в методы возмущений. М., 1984. С. 535.
[4] Волков А. А., Гончаров Ю. Г., Козлов Г. В., Сардарлы Р. М. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. № 7. С. 293—295.
[5] Копаев Ю. В., Тугушев В. В. // Письма в ЖЭТФ, 1985. Т. 41. № 8. С. 320—322.

Институт физики АН АзССР
Баку

Поступило в Редакцию
27 марта 1990 г.