УДК 537.226.4

# ПЕРЕХОД НЕСОРАЗМЕРНАЯ—СОРАЗМЕРНАЯ ФАЗА В РЕАЛЬНОМ КРИСТАЛЛЕ: УЧЕТ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИХ ПОЛЕЙ

*Е. Б. Коломейский, А. П. Леванюк, С. А. Минюков*

Исследуется температурная зависимость среднего расстояния между доменными стенками (солитонами) $l$, образующими несоразмерную фазу, вблизи точки перехода в соразмерную фазу ($T=T_c$) в кристалле с дефектами. Рассматриваются как дефекты типа случайного поля (имеющие разную энергию в разных доменах), так и дефекты типа случайной температуры (непосредственно взаимодействующие с доменной стенкой). В отличие от предыдущих работ учитываются дальнодействующие электрические и упругие поля, возникающие при изгибе доменной стенки в несоразмерных сегнетоэлектриках или сегнетоэластиках. Для последних зависимость $l$ от $|T-T_c|$ оказывается логарифмической, т. е. такой же, как и в бездефектном кристалле. Для сегнетоэлектриков индекс $\beta$ в зависимости $l \sim |T-T_c|^{-\beta}$ равен 1/2 для дефектов типа случайного поля (в отсутствие дальнодействия $\beta=1$), а для дефектов типа случайная температура $3/14 < \beta < 3/10$ (в отсутствие дальнодействия $1/3 < \beta < 1/2$).

1. В последнее время значительное внимание уделяется вопросу о влиянии дефектов на температурную зависимость равновесного периода несоразмерной фазы (среднего расстояния между солитонами $l$) вблизи температуры перехода в соразмерную фазу ($T=T_c$) [1, 2]. Для идеального кристалла теория предсказывает зависимость $l \sim |\ln|T-T_c||$ [3, 4]. В кристалле с дефектами типа случайного поля и достаточно близко к $T_c$ $l \sim |T-T_c|^{-\beta}$, где $\beta=1$ [5]. При этом оказывается, что для системы типа смещения дефекты определяют температурную зависимость $l$ практически во всей области существования солитонного режима несоразмерной фазы для всех реальных концентраций не слишком слабых дефектов, в то время как для систем типа порядок—беспорядок, вполне реализуемой, является экспериментальная ситуация, когда влияние дефектов незаметно. Отметим, что реальные системы относятся, как правило, к промежуточному случаю. Значительная часть экспериментальных данных соответствует $\beta \approx 1/2$ [1, 6]. Попытка объяснить этот результат была предпринята в работах [7, 8], где были рассмотрены дефекты типа случайной температуры и для $\beta$ получено значение 1/2. Этот результат оказался некорректным [1, 9], соответствующий индекс заключен в интервале от 1/3 до 1/2 и, по-видимому, весьма близок к 1/3 [10]. Однако для эксперимента такое уточнение не представляет реального значения. Более важным может оказаться то обстоятельство, что экспериментально исследованные вещества являются сегнетоэлектриками в соразмерной фазе. Поэтому изгиб дефектами доменных стенок приводит, вообще говоря, к появлению дальнодействующих кулоновских полей, что эффективно уменьшает влияние дефектов. В силу этого следует ожидать, что для дефектов типа случайная температура индекс $\beta$ будет меньше 1/3, т. е. расхождение с экспериментальными данными будет значительным. Также вероятно, что значение индекса $\beta$ для дефектов типа случайного поля будет ближе к экспериментальному.

В настоящей работе как раз и проводится учет влияния дальнодействующих полей для тех случаев, когда соразмерная фаза является сегнетоэлектрической или сегнетоэластической, как в случае кристалла $[N(CH_3)_4]_2CuCl_4$ [11]. В случае сегнетоэлектриков для дефектов типа случайного поля индекс $\beta$ оказывается равным 1/2, а для дефектов типа случайной температуры — заключенным в интервале от 3/14 до 3/10 и, по-видимому, близок к 3/14. В случае сегнетоэластиков $\beta=0$ для всех типов дефектов, что соответствует логарифмической зависимости плотности солитонов от $|T-T_c|$. Зная индекс $\beta$, можно найти индексы других величин [1].

2. В соответствии с [1, 2] центральным пунктом в решении рассматриваемой задачи является выяснение свойств изолированного солитона в среде с дефектами, а именно, определение так называемого индекса шероховатости $\zeta$

$$w \approx \lambda\left(\frac{L}{\lambda}\right)^{\zeta},$$

здесь $\lambda$ — некоторый масштаб длины, зависящий от типа дефектов; $w$ — характерное поперечное (ось $z$) смещение участка доменной стенки размером $L \times L$.

Рассмотрим сначала случай сегнетоэлектрика. Вектор спонтанной поляризации $\mathbf{P}$ лежит, естественно, в плоскости доменной стенки (ось $x$). Эффективный гамильтониан свободной стенки имеет вид

$$H=\frac{1}{2} J \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\left(k^2+\frac{8\mathbf{P}^2}{J} \frac{k_x^2}{\sqrt{\varepsilon_z}\sqrt{\varepsilon_y k_y^2+\varepsilon_x k_x^2}}\right)|f\mathbf{k}|^2,$$

где $J$ — «жесткость» доменной стенки по отношению к изгибу $\nabla f$, $\varepsilon_x$, $\varepsilon_y$, $\varepsilon_z$ — компоненты тензора диэлектрической проницаемости. Для несобственного сегнетоэлектрика анизотропией $\varepsilon$ можно пренебречь и привести данный гамильтониан к виду

$$H=\frac{1}{2} J \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}\left(k^2+g\frac{k_x^2}{|\mathbf{k}|}\right)|f\mathbf{k}|^2, \tag{1}$$

где $g=8P^2/\varepsilon J$. Это можно сделать также и в случае собственного однокомпонентного сегнетоэлектрика ($\varepsilon_x \gg \varepsilon_y, \varepsilon_z$), для которого оказываются существенными (см. ниже) лишь $k_x^2 \ll \varepsilon_y k_y^2/\varepsilon_x$. Тогда в (1) $g=8\mathbf{P}^2/\sqrt{\varepsilon_y\varepsilon_z}\,J$. Гамильтониан (1) совпадает фактически с гармонической частью гамильтонианов, использовавшихся в работах [12, 13], где рассматривались магнитные фазовые переходы на поверхности. Как показано в этих работах, учет диполь-дипольного взаимодействия сводится по существу к тому, что эффективная размерность пространства становится равной 3.5. Для дефектов типа случайного поля и размерности пространства $d$ от 2 до 5 имеется результат [5, 14]

$$\zeta=\frac{5-d}{3}, \tag{2}$$

который, по-видимому, является точным [9, 10]. Для $d=3.5$ имеем $\zeta=1/2$. Используя связь между $\beta$ и $\zeta$ [1, 2],

$$\beta=\frac{\zeta}{2(1-\zeta)},$$

находим $\beta=1/2$. Аналогичным образом для дефектов типа случайная температура, используя результаты [2, 9], заключаем, что индекс $\beta$ находится в интервале от 3/14 до 3/10. Согласно результатам $5-\varepsilon$-разложения, которое обладает, по-видимому, большой точностью [10], этот индекс равен 0.227, что весьма близко к 3/14. Полученные результаты требуют пояснения. Возможность сведения многосолитонной задачи к односолитонной связана с тем, что в пределах участка порядка $L_0$, где $L_0$ — длина, отвечающая $w \approx l$, поведение солитона такое же, как если бы он был изолирован. Используя методы работ [10, 15], можно убедиться, что для сегнетоэлектрика сказанное справедливо для участков размером $L_x \times L_y$, если $L_x \sim g^{1/2} L_y^{3/2}$, а роль $L_0$ играет $L_y$. При таком выводе можно пренебречь градиентами вдоль оси $x$ в первом члене гамильтониана (1). Это может оказаться незаконным при достаточном удалении от точки фазового перехода, при этом можно пренебречь и дипольными силами.

Рассмотрим подробнее условия, при которых можно пренебречь диполь-дипольными силами. В этой области $L_x \sim L_y$, т. е. для характерных конфигураций $k_x \sim k_y$. Сравнивая при этом первый и второй члены в гамильтониане (1), находим, что диполь-дипольное взаимодействие несущественно, если $L_0 < g^{-1}$. Учитывая связь между $L_0$ и $l$ [2], находим $l < \lambda^{1-\zeta} g^{-\zeta}$, где $\zeta$ отвечает случаю отсутствия диполь-дипольного взаимодействия. Для дефектов типа случайного поля $\zeta = 2/3$, $\lambda = (H^2/J^2) \frac{N}{N_{\text{ат}}}$ [2]. Здесь $H^2 \frac{N}{N_{\text{ат}}}$ — среднеквадратичная локальная флуктуация случайного поля, определенного согласно [1, 2]. В итоге имеем

$$l < a \left(\frac{H}{H_{\text{ат}}}\right)^{2/3} \left(\frac{N}{N_{\text{ат}}}\right)^{1/3} \left(\frac{P_{\text{ат}}}{P}\right)^{1/2} \left(\frac{\varepsilon}{8}\right)^{2/3}, \tag{4}$$

где $a$ — межатомное расстояние, а индексом «ат» обозначены атомные (максимально возможные) величины, $N$ — концентрация дефектов. Для несобственных сегнетоэлектриков последним множителем в (4) можно пренебречь, а $P \sim P_{\text{ат}}\, \tau$, $\tau = \Delta T/T_c$ либо $\Delta T/T_{\text{ат}}$ для систем типа порядок—беспорядок и типа смещения соответственно, $\Delta T$ — температурный интервал существования несоразмерной фазы, $T_{\text{ат}}$ — атомная температура ($10^4$—$10^5$ К). Полагая, что $\Delta T \sim 10$—$10^2$ К, $T_c \sim 10^2$ К, $H/H_{\text{ат}} \sim 10^{-1}$—$10^{-2}$, приходим к выводу, что для систем типа порядок—беспорядок при любых концентрациях дефектов учет диполь-дипольного взаимодействия является существенным для типичных экспериментальных значений $l \sim (10$—$100)\, a$. Для систем типа смещения при концентрации дефектов $10^{-4}$ учет дальнодействия становится существенным при $l \sim 100$ а. Подчеркнем, что такие оценки носят лишь ориентировочный характер и для каждой системы их следует проводить отдельно. Для собственных сегнетоэлектриков величина $l$ оказывается несколько меньше, чем по формуле (4) (в $\tau^{-2/3}$ раз). Для сравнения теории с экспериментом следует учесть также, что влияние дефектов (как с учетом, так и без учета сил дальнодействия) становится существенным лишь в достаточно малой окрестности $T_c$. Можно ввести две характерные величины $l$ : $l_1$ и $l_2$, отвечающие границам областей, в которых существенны соответственно влияние дефектов (без учета дальнодействия) и роль дальнодействия в поведении дефектной системы. Если $l_2 > l_1$, то при $l_1 < l < l_2$ величина $\beta \approx 1$ и лишь при $l > l_2$ $\beta = 1/2$. Если $l_2 < l_1$, то учет дальнодействующих сил ($\beta = 1/2$) необходим для всей области существенного влияния дефектов. Используя результаты работы [16], для $l_1$ имеем

$$a \left(\frac{H}{H_{\text{ат}}}\right)^2 \left(\frac{N}{N_{\text{ат}}}\right) \tau^{-3} \approx l_1 \exp(-\varkappa l_1),$$

где $\varkappa^{-1} = a\tau^{-1/2}$. Величина $l_2$ дается формулой (4). Используя те же оценки, что и выше, убеждаемся, что в случае систем типа порядок—беспорядок $l_2 < l_1$ при любых реальных концентрациях дефектов. Для систем типа смещения реализуется обратная ситуация, т. е. влияние дальнодействующих сил проявляется в более узкой температурной области вблизи $T_c$, чем влияние дефектов вообще. Таким образом, для систем типа порядок—беспорядок при оценке условий существенности влияния дефектов необходимо учитывать силы дальнодействия. Естественно, что при наличии дальнодействия ситуации, в которых влияние дефектов является несущественным, становятся для систем типа порядок—беспорядок еще более вероятными. Для систем типа смещения типичной, по-видимому, является ситуация, когда наблюдается область как с $\beta=1$, так и (ближе к точке фазового перехода) с $\beta=1/2$.

Для дефектов типа случайная температура (без учета дальнодействия): $\zeta\approx2/5$, $\lambda\approx(\Delta/J^2)^{1/3}$, где $\Delta$ — среднеквадратичная локальная флуктуация случайной температуры [1, 2]. Для дефектов этого типа имеет смысл рассматривать лишь системы типа смещения. Как отмечалось выше, для систем типа порядок—беспорядок даже дефекты типа случайного поля оказывают относительно слабое влияние на температурную зависимость $l$ в экспериментально реализуемых условиях. Это еще в большей степени справедливо для дефектов типа случайная температура. Для систем типа смещения в отсутствие дальнодействия при условии, что $\Delta\sim10^{-2}$. $\Delta_{\text{ат}}\dfrac{N}{N_{\text{ат}}}l\sim10a$ влияние дефектов на температурную зависимость $l$ ($\beta\approx\approx1/3$) становится существенным при концентрациях $N\sim10^{-4}$ $N_{\text{ат}}$. Как показывает оценка, проведенная аналогично полученной выше (формула (4)), влияние дальнодействия начинает сказываться при тех же

$$l>l_2\approx J^{-1}\Delta^{1/2}g^{-1}\sim10^3a$$

характеристиках дефектов. Таким образом, эффекты дальнодействия сказываются на свойствах систем с дефектами типа случайная температура лишь в специальных экспериментальных условиях. Подчеркнем, что все полученные выше формулы носят асимптотический характер, т. е., строго говоря, верны для очень больших $l$. Заранее вовсе не очевидно, что ими можно пользоваться для значений $l$, наблюдаемых в эксперименте. Мы не можем, к сожалению, оценить те значения $l$, для которых эти формулы верны количественно. Это еще один источник неопределенности в проведенных выше оценках.

3. Обратимся теперь к случаю сегнетоэластиков. Эффективный гамильтониан свободной стенки при этом имеет вид

$$H=\frac{J}{2}\int\frac{d^2k}{(2\pi^2)}\left(k^2+\frac{ck_x^2+ek_y^2}{|\mathbf{k}|}\right)|f\mathbf{k}|^2. \tag{5}$$

Здесь считается, что домены отличаются знаком спонтанной деформации $u_{xz}$, и анизотропией упругих свойств кристалла можно пренебречь. Такое пренебрежение возможно в случае несобственного сегнетоэластика, который только и обнаружен экспериментально [11]. При этом коэффициенты $c$ и $e$ порядка $u_{xz}^2\mu/J$, где $\mu$ — величина порядка модуля упругости. Поясним смысл формулы (5). При искривлении стенки с характерным масштабом $1/k$ возникают упругие искажения, сосредоточенные в основном в приповерхностной области шириной порядка $1/k$. Умножая плотность упругой энергии, пропорциональную $\mu k^2$, на толщину слоя, в котором она сосредоточена, приходим к формуле (5). В длинноволновом приближении можно пренебречь первым членом (5) по сравнению со вторым. Кроме того, для определения индексов различие между $c$ и $e$ несущественно. Таким образом, гамильтониан (5) приобретает вид (для произвольной размерности пространства)

$$H\sim\frac{d^{d-1}k}{(2\pi)^{d-1}}|\mathbf{k}||f\mathbf{k}|^2. \tag{6}$$

Используя методы работ [10, 15], можно убедиться в том, что выражение для $\zeta$ имеет вид

$$\zeta=\frac{3-d}{3} \tag{7}$$

для дефектов типа случайного поля и $\zeta=(3-d)\,b$ для дефектов типа случайная температура ($b\approx0.2083$ из результатов $\varepsilon$-разложения [10]). В случае, представляющем физический интерес, $d=3$, $\zeta=0$ для обоих типов дефектов. Заметим, что эффективная размерность пространства в случае сегнетоэластика равна 5, в чем можно убедиться, сравнивая формулы (2) и (7).

Поскольку при получении формулы (3) в [1, 2] существенно использовалась квадратичность гамильтониана свободной стенки по $k$, то для сегнетоэластика этот результат должен быть пересмотрен. Используя метод работ [1, 2], находим

$$\beta = \frac{\zeta}{1-2\zeta}. \tag{8}$$

Из (8) видно, что при $\zeta=0$, $\beta=0$, что, видимо, соответствует логарифмической зависимости $l$ от $|T-T_c|$. Таким образом, в случае сегнетоэластика дальнодействующие силы настолько подавляют изгибы стенки, что логарифмический характер зависимости $l$ от $|T-T_c|$ в пределе больших $l$ сохраняется и при наличии дефектов. К сожалению, использованные методы не позволяют (в рамках своей точности) найти то значение $l$, при котором упругое дальнодействие становится существенным. Можно ожидать, что для сегнетоэластических систем типа порядок—беспорядок влияние дефектов вообще будет незаметно. Для систем же типа смещения возможна как ситуация, когда во всей области заметного влияния дефектов эффекты дальнодействия оказываются существенными, так и случай, когда эти эффекты сказываются лишь в непосредственной окрестности $T_c$.

Авторы выражают благодарность В. Л. Инденбому за полезное обсуждение результатов работы.

## Литература

[1] *Fisher M. E.* J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2, 1986, vol. 82, N 20, P. 1569—1603.
[2] *Nattermann T.*, *Villain J.* To be published in «Phase Transitions».
[3] *Frank F. C.*, *Van der Merwe J. H.* Proc. Roy. Soc., 1949, vol. A198, p. 205—216.
[4] *Bak P.* Rep. Prog. Phys., 1982, vol. 45, N 6, p. 587—629.
[5] *Villain J.* J. Phys. Lett., 1982, vol. 43, N 15, p. L551—L558.
[6] Incommensurate Phases in Dielectrics., R. Blinc and A. P. Levanyuk eds., North Holland, Amsterdam, 1986, ch. 14, p. 129—148.
[7] *Feigelman M. V.*, *Lyuksyutov I. F.* Sol. St. Commun., 1983, vol. 48, N 4, p. 397—398.
[8] *Nattermann T.* Phys. St. Sol. (b), 1983, vol. 119, N 1, p. 209—213.
[9] *Kardar M.* J. Appl. Phys., 1987, vol. 61, N 8, p. 3601—3604.
[10] *Fisher D. S.* Phys. Rev. Lett., 1986, vol. 56, N 18, p. 1964—1967.
[11] *Sawada A.*, *Sugiyama J.*, *Wada M.*, *Ishibashi Y.* J. Phys. Soc. Japan, 1980, vol. 48, N 5, p. 1773—1774.
[12] *Малеев С. В.* ЖЭТФ, 1976, т. 70, № 6, с. 2375—2389.
[13] *Булаевский Л. Н.*, *Вехтер В. Г.* ЖЭТФ, 1986, т. 91, № 4, с. 1444—1453.
[14] *Grinstein G.*, *Ma S.-K.* Phys. Rev. Lett., 1982, vol. 49, N 9, p. 685—688.
[15] *Grinstein G.*, *Ma S.-K.* Phys. Rev., 1983, vol. B. 28, N 5, p. 2588—2601.
[16] *Villain J.*, *Semeria B.*, *Lancon F.*, *Billard L.* J. Phys. C: Sol. St. Phys., 1983, vol. 16, N 32, p. 6153—6178.

Институт кристаллографии АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
22 сентября 1987 г.