(безразмерный параметр $Q \sim 1$ для $KTaO_3$, a — постоянная решетки) для $K_{1-x}Li_xTaO_3$ ($x=0.1$) при $T \sim 100$ K выполняется слабо, что делает маловероятным существование в указанной системе сегнетоэластического упорядочения при указанной температуре, как предполагалось в [1].

Дипольный характер нецентральных ионов Li^+ проявляется в уширении линии ЭПР при понижении температуры, когда частота дипольных реориентаций становится меньше создаваемого ими уширения, что имеет место уже при $T=77$ K [5]. Как показано в [9], величина электродипольного уширения $\Delta H^E_{pp} \simeq 130$ Гс в $K_{0.95}Li_{0.05}TaO_3$ при $\mathbf{H} \parallel [100]$, $T=77$ K оказывается значительно меньше наблюдаемой, что, по-видимому, связано с неучетом полного деформационного вклада в ширину линии при этой температуре, как и отмечалось в [9].

Расчет вклада квадрупольного уширения, аналогичный расчету дилатационного уширения, приводит также к лоренцевой форме линии с полушириной при $H \parallel [100]$: $\delta^{\text{кв}}=1.7\, n\gamma\, (\mathcal{G}_{11}/c_{11})\, \Omega_2$. Подставляя в это выражение $\Omega_2=1$ эВ [2], получаем $\Delta H^{\text{кв}}_{pp} \simeq 70$ Гс (при $n \sim 5$ ат.%), что вместе с дилатационным вкладом $\Delta H^{\text{д}}_{pp} \simeq 30$ Гс приводит к полному упругому уширению $\Delta H^{\text{упр}}_{pp} \simeq 100$ Гс. Таким образом, деформационный механизм уширения действительно вносит существенный вклад в ширину линии ЭПР кубических центров Fe^{3+} в KTL и сравним с электродипольным.

Список литературы

[1] Yacoby J. // Z. Phys. B. 1981. V. 41. N 3. P. 269—276.
[2] Höchli U. T., Weibel H. E., Rehwald W. // J. Phys. C. 1982. V. 15. N 30. P. 6129—6140.
[3] Feher E. // Phys. Rev. B. 1964. V. 136. N 1A. P. 145—157.
[4] Вугмейстер Б. Е., Глинчук М. Д., Печеный А. П. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 11. С. 3389—3396.
[5] van der Klink J. J., Rytz D., Borsa F., Höchli U. T. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 1. P. 89—101.
[6] Stoneham A. M. // Rev. Mod. Phys. 1969. V. 41. N 1. P. 82—108.
[7] Глинчук М. Д., Смолянинов И. М. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 4. С. 1197—1199.
[8] Глинчук М. Д., Смолянинов И. М. // Тез. докл. IV Всес. школы-семинара. Днепропетровск, 1988. С. 26—29.
[9] Вугмейстер Б. Е., Лагута В. В., Быков И. П., Кондакова И. В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 8. С. 2449—2453.

Институт проблем
материаловедения АН УССР
Киев

Поступило в Редакцию
9 ноября 1988 г.
В окончательной редакции
13 марта 1989 г.

УДК 621.318

Физика твердого тела, том 31, в. 7, 1989
Solid State Physics. vol. 31, № 7, 1989

О ТЕРМОДИНАМИКЕ КРИСТАЛЛА $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ В ОКРЕСТНОСТИ ТОЧКИ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

А. И. Соколов

Недавно нейтронографическими и рентгеноструктурными методами, а также с помощью техники неупругого рассеяния нейтронов было исследовано поведение монокристаллов семейства $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ при структурном фазовом переходе из тетрагональной в орторомбическую фазу [1, 2]. Фазовый переход является с экспериментальной точностью переходом второго рода и связан с конденсацией в точке X зоны Бриллюэна поперечных оптических фононов, отвечающих поворотам (качаниям) кислородных октаэдров вокруг ионов меди. Этот переход описывается двухкомпонентным параметром порядка, а соответствующее разложение Ландау содержит помимо $O(2)$-симметричного инварианта анизотропный инвариант четвертого порядка [2, 3].

Бирженo, Экс, Ширане и др. определили температурную зависимость параметра порядка в диапазоне 300—430 К и обнаружили, что эта зависимость имеет степенно́й характер. Для чистого кристалла La_2CuO_4 с $T_c=423$ К критический индекс β, восстановленный на интервале в 100 К, оказался равным 0.275 ± 0.04; для кристалла, легированного стронцием, с $T_c=351$ К $\beta=0.29\pm0.04$ на интервале около 50 К. Существенное отличие значений этого индекса от классического $\beta=1/2$ позволило сделать вывод о том, что термодинамика исследованных кристаллов контролируется критическими флуктуациями, а симметрия параметра порядка заставила отнести их к классу универсальности трехмерной анизотропной XY модели [1-3]. При этом заметную разницу между экспериментальными значениями β и теоретической оценкой $\beta\approx0.35$ авторы [1, 2] сочли непринципиальной ввиду невысокой точности эксперимента. В теоретической работе [3] эта разница также игнорировалась, но по причине выбора в качестве теоретического значения β числа 0.3125, даваемого «паркетным» (низшим ренормгрупповым и весьма неточным) приближением.

В настоящем сообщении я хочу обсудить результаты очень интересных экспериментов [1, 2], отталкиваясь от следующих четырех фактов.

1) Неклассическое поведение данных кристаллов наблюдается в аномально широком температурном интервале $\Delta\tau=0.15\div0.2$, где $\tau=(T-T_c)/T_c$. Его протяженность в несколько раз превосходит ширину критической области, характерную для кубических перовскитов $SrTiO_3$, $LaAlO_3$ и $KMnF_3$ ($\Delta\tau\leqslant0.05$) [4, 5], структурные фазовые переходы в которых в остальном весьма похожи на фазовый переход в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$.

2) Экспериментальные значения индекса β отличаются от считающегося сегодня наиболее достоверным в теории числа 0.346 [6-8] на 0.06—0.07, т. е. на величину, существенно бо́льшую погрешности опыта.

3) В эксперименте индекс β не больше, как обычно, теоретического значения, а меньше его, что не позволяет объяснить расхождение теории и эксперимента кроссовером с классического поведения на критическую асимптотику.

4) Кристаллы семейства $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ имеют отчетливо выраженную слоистую структуру и сильно анизотропные фононные спектры.

Эти факты плохо согласуются с предположением о том, что фазовый переход в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ описывается трехмерной XY моделью. Они, однако, естественным образом укладываются в рамки каждой из следующих альтернативных гипотез: а) флуктуации параметра порядка в экспериментально доступном температурном интервале носят преимущественно двумерный характер, т. е. кристалл не успевает выйти на трехмерный критический режим; б) фазовый переход в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ близок к трикритической точке, а флуктуации не играют существенной роли в формировании температурных зависимостей термодинамических величин.

Первая версия позволяет объяснить аномальную ширину критической области понижением эффективной размерности кристалла, которое, как известно, резко усиливает влияние флуктуаций на термодинамику, а неожиданное значение индекса β отнести на счет неуниверсальности критического поведения двумерных систем с двухкомпонентным параметром порядка. Действительно, структурный переход в данном случае должен описываться двумерной XY моделью с одноионной анизотропией, которая во флуктуационной области эквивалентна модели Бакстера (часто называемой также двумерной моделью Ашкина—Теллера), чьи критические индексы

$$\beta=\frac{\pi-\mu}{12\pi-16\mu},\qquad \nu=\frac{2\pi-2\mu}{3\pi-4\mu},\qquad \gamma=\frac{7\pi-7\mu}{6\pi-8\mu},\qquad \alpha=\frac{2\pi-4\mu}{3\pi-4\mu} \tag{1}$$

зависят от затравочной константы связи K [9]

$$\mu = \arccos \frac{e^{4K} - 1}{2}, \quad 0 < \mu < \frac{2\pi}{3}. \tag{2}$$

Экспериментальные значения β близки к верхней границе интервала, задаваемого формулами (1), (2). Соответствующие значения ν и γ оказываются, однако, значительно бо́льшими, чем дает эксперимент [2]. Это расхождение может быть следствием межплоскостного взаимодействия, т. е. проявлением кроссовера с двумерного на трехмерный режим критического поведения. Не исключено, что оно порождается также внутриплоскостной кристаллической анизотропией парного коррелятора, которая ренормируется очень медленно и может существенно влиять на эффективные значения критических индексов [10, 11].

Вторая версия привлекательна тем, что проливает свет на численные значения не только $\beta_{эксп}$, но и остальных двух измеренных индексов: $\nu_{эксп}=0.53\pm0.06$, $\gamma_{эксп}=1.23\pm0.05$ [2]. Действительно, теория дает следующий набор чисел для трикритических точек:

$$\beta_t = \frac{1}{4}, \quad \nu_t = \frac{1}{2}, \quad \gamma_t = 1, \quad \alpha_t^+ = 0, \quad \alpha_t^- = \frac{1}{2}, \quad \eta_t = 0. \tag{3}$$

Первые два из них весьма близки к экспериментальным, а третье хоть и не попадает в «вилку» опытных данных, но отклоняется от $\gamma_{эксп}$ в нужную сторону. Что здесь имеется в виду? Близость фазового перехода к трикритической точке неизбежно предполагает кроссовер с трикритического поведения на критическое (классическое или флуктуационное). Поскольку в теории $\beta=0.346>\beta_t$, $\nu=0.669>\nu_t$ и $\gamma=1.316>\gamma_t$, есть основания считать, что в эксперименте значения указанных индексов должны быть несколько больше трикритических. Именно это и наблюдается в нашем случае. Тот факт, что не только $\gamma_{эксп}>\gamma_t$, но и $\nu_{эксп}>\nu_t$, свидетельствует, по-видимому, о наличии более или менее развитых флуктуаций в критическом секторе фазовой диаграммы кристаллов $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (в трикритическом секторе все индексы, кроме α_t^+, нечувствительны к влиянию флуктуаций [12]).

Какая из двух предложенных версий ближе к действительности? Ответ на этот вопрос могут дать измерения других критических индексов, в первую очередь α и η. Исследование теплоемкости перспективно потому, что в случае трикритической точки она ведет себя очень специфическим образом: неограниченно растет ниже T_t и несингулярна в отсутствие флуктуаций в парафазе (см. (3)). Такой температурный ход резко отличается от симметрично-сингулярного поведения теплоемкости, характерного для обычных фазовых переходов второго рода. Если же в трикритическом секторе флуктуации сильны и $\alpha_t^+=\alpha_t^-=1/2$, значение α_t все равно остается радикально отличающимся от тех, которые даются последней формулой (1) при $\mu\approx2\pi/3$.

Существенно по-разному устроены и корреляторы трикритических и двумерных флуктуирующих систем. Если в трикритической точке поле флуктуаций не имеет аномальной размерности, то у двумерных систем изинговского и бакстеровского типов она есть и не мала, $\eta=1/4$ [9]. Такая величина доступна измерению в современном эксперименте.

Я искренне благодарен Б. Н. Шалаеву за обсуждение вопросов, связанных с моделью Бакстера.

Список литературы

[1] Birgeneau R. J., Chen C. Y., Gabbe D. R. et al. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 12. P. 1329—1331.
[2] Böni P., Axe J. D., Shirane G. et al. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 1. P. 185—194.
[3] Sahu D., George T. F. // Sol. St. Comm. 1988. V. 65. N11. P. 1371—1373.
[4] Müller K. A., Berlinger W. // Phys. Rev. Lett. 1971. V. 26. N 1. P. 13—16.
[5] Shapiro S. M., Axe J. D., Shirane G., Riste T. // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. N 11. P. 4332—4341.

[6] Le Guillou J. C., Zinn-Justin J. // Phys. Rev. Lett. 1977. V. 39. N 2. P. 96—98.
[7] Baker G. A., Nickel B. G., Meiron D. I. // Phys. Rev. B.1978. V. 17. N 3. P. 1365—1374.
[8] Владимиров А. А., Казаков Д. И., Тарасов О. В. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. № 9. С. 1035—1045.
[9] Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985. С. 361.
[10] Nattermann T., Trimper S. // J. Phys. A. 1975. V. 8. N 12. P. 2000—2017.
[11] Nattermann T. // J. Phys. C. 1976. V. 9. N 16. P. 3337—3354.
[12] Соколов А. И. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. № 10. С. 1598—1614.

Ленинградский электротехнический
институт им. В. И. Ульянова (Ленина)
Ленинград

Поступило в Редакцию
1 декабря 1988 г.
В окончательной редакции
20 марта 1989 г.

Поправка к статье *Б. М. Даринского, А. С. Сидоркина* «Колебания доменных границ в сегнетоэлектриках и сегнетоэластиках» (ФТТ. 1987. Т. 29. № 1. С. 3—7)

В уравнении несовместности (3) статьи не вписано слагаемое, отвечающее тензору плотности потока вектора Бюргерса двойникующих дислокаций, на что авторам было указано А. М. Рощупкиным и В. Н. Нечаевым. Как показывают проведенные нами расчеты, для случая совпадения направления спонтанного сдвига с осью y, т. е. отличных от нуля компонент тензора плотности дислокаций ρ_{12} и ρ_{22}, формально это приведет к замене k_y^2 на $(v^2/c_t^2)\,k^2$ в числителе первого слагаемого компоненты тензора напряжений $\sigma_{23'z=0}$ (16). Никаких качественных изменений в дисперсионной зависимости $\omega\,(\mathbf{k})$ при этом не происходит. По-прежнему в квазистатическом пределе $\omega \sim \sqrt{\mathrm{k}}$, а в длинноволновом $\omega \sim k$ и волна изгибных смещений локализована на доменной стенке сегнетоэластика для всех направлений вектора $\mathbf{k}$ (для направления сдвига она представляет собой волну Рэлея), за исключением направления $\mathbf{k}$, перпендикулярного сдвигу, где она переходит в объемную сдвиговую волну. Ориентационная зависимость скорости распространения волны изгибных смещений вдоль доменной стенки при этом подчиняется закону

$$\left(2-\frac{v^2}{c_t^2}\right)^2=4\sqrt{1-\frac{v^2}{c_t^2}}\sqrt{1-\frac{v^2}{c_l^2}+\frac{v^2}{c_t^2}\left(1-\frac{v^2}{c_t^2}\right)\mathrm{tg}^2\,\varphi},$$

где угол φ отсчитывается от направления сдвига.