

поскольку на ней фиксируется интенсивность, суммарная по всем направлениям отраженного пучка, т. е. интегрированная в направлении, составляющем угол  $\nu_B$  с  $\mathbf{H}$ . Это видно из рис. 2, где кривая  $R(\alpha)$  для того же образца содержит лишь один уширенный пик от пленки.

Таким образом, построение развертки интенсивности в двух взаимно перпендикулярных направлениях с помощью трехкристального спектрометра позволяет получить более детальную картину рассеяния в эпитаксиальных структурах и открывает новые возможности при изучении деформаций и нарушений в них.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Кютт Р. Н., Аргунова Т. С. // Тез. докл. V Междунар. конф. «Свойства и структура дислокаций». М., 1986. С. 150.
- [2] Кютт Р. Н., Аргунова Т. С. // ФТТ. 1988. Т. 31. № 1. С. 40—45.
- [3] Kyutt R. N., Petrashen P. V., Sorokin L. M. // Phys. St. Sol. (a). 1989. V. 60. N 2. P. 381—389.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
7 февраля 1989 г.

УДК 537.226.4

Физика твердого тела, том 31, в. 8, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, № 8, 1989

## ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА СВОЙСТВА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ С ОДНОЙ ОСЬЮ СПОНТАННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ВБЛИЗИ ТОЧКИ ЛИФШИЦА

А. А. Исавердиев, Н. И. Лебедев,  
А. П. Леванюк, А. С. Сигов

1. Вопрос об относительной роли флуктуаций параметра порядка и дефектов является одним из центральных при интерпретации экспериментальных данных об аномалиях физических величин, не находящих объяснения в рамках теории фазовых переходов Ландау. Оценки (см., например, [1, 2]) показывают, что для типичных концентраций и «силы» дефектов наблюдаемые при структурных фазовых переходах аномалии обусловлены в основном именно дефектами. Иная ситуация, согласно работе [3], должна, казалось бы, иметь место вблизи точки Лифшица [4]. Авторы [3] утверждают, что аномалии вблизи точки Лифшица определяются главным образом тепловыми флуктуациями параметра порядка, а вклад дефектов существенно уменьшен по сравнению со случаем фазовых переходов, далеких от точки Лифшица, рассматривавшихся в [1, 2]. На основе этих заключений объяснялось наблюдавшееся экспериментально увеличение отклонения от зависимостей, даваемых теорией Ландау, в температурном ходе теплоемкости системы  $\text{Sn}_2\text{P}_2(\text{Se}_x\text{S}_{1-x})_6$  вблизи точки Лифшица [3].

Поскольку соображения, приведенные в работе [3], носили качественный и не вполне обоснованный характер, мы провели детальное и последовательное рассмотрение вопроса применительно к одноосным сегнетоэлектрикам вблизи точки Лифшица, к которым, в частности, относится и  $\text{Sn}_2\text{P}_2(\text{Se}_x\text{S}_{1-x})_6$ . Показано, что для непосредственной окрестности точки Лифшица вывод об относительной роли дефектов и тепловых флуктуаций параметра порядка [1, 2] остается справедливым, хотя на некотором удалении от точки Лифшица вклад определенных типов дефектов может уменьшаться по мере приближения к ней.

Заметим, что термин «точка Лифшица» зачастую употребляется для обозначения всех тройных точек на фазовой диаграмме, в которых пересекаются линии фазовых переходов из нормальной в несоразмерную и из несоразмерной в соразмерную фазы. Ниже мы будем употреблять этот термин в более узком смысле, следуя первоначальному определению [4]. Насколько нам известно, для структурных фазовых переходов такая точка Лифшица наблюдалась лишь в системе  $\text{Sn}_2\text{P}_2(\text{Se}_x\text{S}_{1-x})_6$ .

Поясним теперь, почему представляются неубедительными доводы, приведенные в работе [3]. Уменьшение вклада дефектов по мере приближения к точке Лифшица связывалось [3] со стремлением к нулю коэффициента  $D$  при градиентном члене в термодинамическом потенциале Ландау. Это интерпретировалось как уменьшение радиуса корреляции параметра порядка, т. е. размера области искажений параметра порядка, создаваемых дефектом. Отсюда делался вывод об уменьшении вклада возмущений, вносимых дефектом в кристалл. При этом, однако, молчаливо предполагалось, что характер распределения параметра порядка внутри области с размером, равным радиусу корреляции, остается неизменным. Легко пояснить, используя чисто иллюстративный пример, что характер распределения может в действительности изменяться. Учтем в термодинамическом потенциале лишь члены, квадратичные по параметру порядка  $\eta$  и его производным. Тогда для точки обычного фазового перехода второго рода плотность термодинамического потенциала имеет вид  $D(\nabla\eta)^2/2$ , а для точки Лифшица —  $D_1(\Delta^2\eta)^2/2$ . В первом случае распределение параметра порядка вокруг дефекта  $\eta(\mathbf{r}) \sim r^{-1}$ , а во втором  $\eta = \text{const}$ . На некотором отдалении от точек фазовых переходов такие распределения имеют место вблизи дефекта на расстояниях порядка радиуса корреляции параметра порядка, сменяясь далее экспоненциальным спадом на том же расстоянии. Таким образом, нельзя утверждать, что уменьшение радиуса корреляции приводит к уменьшению возмущений, вносимых дефектами в решетку, поскольку спадание  $\eta$  внутри области корреляции происходит при таком уменьшении более медленно и суммарный эффект неочевиден.

2. Ниже мы ограничимся рассмотрением обусловленных точечными дефектами аномалий в неполярной (нормальной) фазе вблизи точки Лифшица системы  $\text{Sn}_2\text{P}_2(\text{Se}_x\text{S}_{1-x})_6$ . Для этого воспользуемся термодинамическим потенциалом Ландау в  $\mathbf{k}$ -представлении

$$\Phi = \sum_{\mathbf{k}} \{ (A + D(k_x^2 + k_y^2) + D_y k_y^2 + D_1 k_y^4 + 4\pi k_z^2 / (\epsilon_{\perp} k^2)) \eta_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} - h_{\mathbf{k}} \eta_{-\mathbf{k}} \}. \quad (1)$$

Здесь  $\eta$  — компонента вектора поляризации вдоль оси  $z$ ;  $h(\mathbf{r})$  — «случайное» поле, создаваемое дефектами [2];  $\epsilon_{\perp}$  — диэлектрическая проницаемость в направлении, перпендикулярном оси спонтанной поляризации  $z$ . В (1) предполагается, что несоразмерная модуляция возникает вдоль оси  $y$ . Мы пренебрегли членами более высокого, чем второй, порядка по  $\eta$ , роль которых обсудим в дальнейшем. Выражение (1) отвечает фактически более высокой симметрии, нежели кристаллическая симметрия  $\text{Sn}_2\text{P}_2(\text{Se}_x\text{S}_{1-x})_6$ . Однако для последующего это несущественно.

Фурье-образ распределения параметра порядка, индуцируемого системой дефектов, имеет вид

$$\eta_{\mathbf{k}} = h_{\mathbf{k}} / (A + D(k_x^2 + k_y^2) + D_y k_y^2 + D_1 k_y^4 + 4\pi k_z^2 / (\epsilon_{\perp} k^2)), \quad (2)$$

при этом для точечных дипольных дефектов  $h_{\mathbf{k}} = \sum_j h_{1j} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j)$ , где  $\mathbf{r}_j$  — положение  $j$ -го дефекта, а  $h_{1j}$  принимает значения  $\pm h_1$ . Для зарядов  $h_{\mathbf{k}} = -i4\pi k_z / (\epsilon_{\perp} k^2) \sum_j e_j \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j)$ ,  $e_j = \pm e$ ,  $e$  — заряд дефекта.

Определим для примера вклад дефектов в удельную теплоемкость при приближении к точке Лифшица  $T_c = T_{\text{сл}}$ , где  $A = 0$ ,  $D_y = 0$ , вдоль линии  $D_y = 0$ . По аналогии с работами [5, 6] получаем для дипольных дефектов

$$\Delta c \sim \Delta c_{\text{Л}} \epsilon_{\perp}^{1/2} N r_c^{*3} (\eta_0 / \eta_{AT})^2, \quad (3)$$

где  $\Delta c_{\text{Л}} \equiv A_0^2 / (2T_{\text{СЛ}}B)$  — скачок удельной теплоемкости при фазовом переходе согласно теории Ландау;  $r_c^* \equiv (D/A)^{1/2}$ ;  $A = A_0(T - T_{\text{СЛ}}) / T_{\text{СЛ}}$ ;  $N$  — концентрация дефектов;  $\eta_0 \sim \hbar_1 d^{-1/2} D^{-3/2} D_1^{-1/2}$ , имеет смысл значения параметра порядка в точке локализации дефекта ( $d$  — длина порядка постоянной решетки), а  $\eta_{\text{ЛТ}} \sim (D/Bd^2)^{1/2}$  — порядка максимального («атомного») значения величины  $\eta$ . Таким образом, видно, что  $\Delta c \sim (T - T_{\text{СЛ}})^{-1/2}$ , т. е. имеет ту же температурную зависимость, что и связанная с дефектами типа «случайное поле» аномальная часть теплоемкости для несегнетоэлектрических фазовых переходов (или сегнетоэлектриков с тремя осями спонтанной поляризации) вдали от точки Лифшица. Заметим, что вклад в аномалию теплоемкости, связанный с тепловыми флуктуациями величины  $\eta$ , как это можно показать, также фактически отвечает случаю несегнетоэлектрического перехода вдали от точки Лифшица:  $\Delta c_{\phi} \sim (T - T_{\text{СЛ}})^{-1/2}$ . Аналогичные заключения верны здесь и для аномалий других физических величин. Поэтому вывод работы [5] об относительной роли вкладов точечных дефектов и тепловых флуктуаций параметра порядка в аномалии физических величин для несегнетоэлектрических фазовых переходов остается справедливым и в рассматриваемом нами случае, т. е. при  $N = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $\eta_0 / \eta_{\text{ЛТ}} = 10^{-1}$ ,  $r_c^* \geq 10^{-6} \text{ см}$ ,  $T_{\text{СЛ}} = 10^2 \text{ К}$  отношение  $\Delta c_{\phi} / \Delta c \leq 10^{-1}$ . Как показывает анализ, условия применимости теории возмущений имеют вблизи точки Лифшица вид, аналогичный случаю несегнетоэлектрического фазового перехода [1]

$$(\eta_0 / \eta_{\text{ЛТ}}) \ll 1, \quad (4)$$

$$\varepsilon_{\perp}^{1/2} N r_c^{*3} (\eta_0 / \eta_{\text{ЛТ}})^2 \ll 1. \quad (5)$$

Для заряженных дефектов аналогичным образом получаем

$$\Delta c \sim \Delta c_{\text{Л}} e^2 B D^{-3/2} \varepsilon_{\perp}^{-1/2} N r_c^{*2}. \quad (6)$$

Из (6) следует, что аномалия температурной зависимости  $\Delta c$ , вызванная заряженными дефектами, нечувствительна к близости к точке Лифшица.

В заключение заметим, что анизотропный характер рассматриваемой системы, а также наличие дальнедействующих кулоновских сил являются весьма существенными обстоятельствами не только с точки зрения полученных результатов, но и с точки зрения использования подхода, основанного на теории возмущений. Для точки Лифшица в кубическом кристалле подобное рассмотрение было бы беспредметным, поскольку область применимости теории возмущений практически отсутствует.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Levanyuk A. P., Sigov A. S. Defects and Structural Phase Transitiong. N. Y.: Gordon and Breach, 1987. 208 p.
- [2] Леванюк А. П., Сигов А. С. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1985. Т. 49. № 2. С. 219—226.
- [3] Высочанский Ю. М., Фурцев В. Г., Хома М. М., Грабар А. А., Гурзан М. И., Майор М. М., Перечинский С. И., Ризак В. М., Сливка В. Ю. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. № 4. С. 1384—1390.
- [4] Hornreich R. M., Luban M., Shtrikman S. // Phys. Rev. Lett. 1975. V. 35. N 25. С. 1678—1681.
- [5] Леванюк А. П., Осипов В. В., Сигов А. С., Собянин А. А. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 1. С. 345—368.
- [6] Даринский Б. М., Нечаев В. Н., Федосов В. Н. // ФТТ. 1980. Т. 22. № 5. С. 1980—1984.

Московский институт радиотехники,  
электроники и автоматики  
Москва

Поступило в Редакцию  
8 февраля 1989 г.