

УДК 536.320

©1993

О ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ В КРИСТАЛЛАХ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ

Н. В. Щедрина, М. И. Щедрин

Рассматривается вопрос о вычислении флуктуационных поправок к электро-механическим коэффициентам сегнетоэлектриков в области температур T , близких к точке фазового перехода T_c . Основное внимание уделяется стрикционным коэффициентам и пьезокоэффициентам. При этом речь идет об «истинных» коэффициентах, т.е. таких, которые в отсутствие нелинейных взаимодействий температурне-зависимы. Поправки к стрикционным коэффициентам могут иметь следующие аномалии: $g \sim (T - T_c)^{-1/2}$ для трехосного сегнетоэлектрика, $g \sim \ln(T - T_c)$ для одноосного без пьезоэффекта в высокосимметричной фазе и $g \sim (T - T_c)^{-1/2}$ при наличии пьезоэффекта. Эти особенности имеют место в низших порядках по нелинейностям. Данный пример показывает, что существуют такие величины, для которых аномалии увеличиваются за счет пьезоэффекта вследствие того, что при линейной связи упругая система также становится критической. Для пьезоконстанты d в низших порядках температурная поправка растет при $T \rightarrow T_c$, но не аномально, однако ее мнимая часть (при учете частотной дисперсии) аномальна как $(T - T_c)^{-1/2}$. Коротко обсуждаются возможные сингулярности нелинейных коэффициентов высших порядков.

Величина и характер поведения электро-механических коэффициентов (ЭК) кристаллов с фазовыми переходами в различных температурных условиях определяют эффективность и устойчивость работы многочисленных приборов, в которых эти кристаллы используются в качестве рабочего вещества [1,2]. Хорошо также известно, что многие кристаллы часто обладают целым набором различных типов структурных фазовых превращений (ФП), которые могут сопровождаться электрическими, упругими, оптическими и другими аномалиями. Вблизи температур T_c этих ФП резко возрастает роль температурных флуктуаций параметров порядка (ПП), что существенно проявляется в температурном поведении физических констант кристалла [3]. Это происходит за счет взаимодействий (как линейных, так и нелинейных) ПП с другими, некритическими степенями свободы системы, а также из-за взаимодействия некритических степеней между собой. При этом наличие нелинейностей приводит к перенормировкам затравочных констант взаимодействия (а также, вообще говоря, к возникновению новых типов взаимодействия в высших порядках), а перепутывание различных мод вследствие их линейной связи ведет к ряду специфических особенностей в температурном поведении этих перенормировок.

Целью данной работы является вычисление этих температурных перенормировок для таких практически важных параметров кристалла, какими являются ЭК различных типов. При этом мы ограничились областью парафазы вблизи температуры сегнетоэлектрического ФП. В этом случае интересующие нас ЭК входят в следующее выражение для свободной энергии сегнетоэлектрика (СЭ) [2]:

$$F = \frac{1}{2} \alpha_{ij} P_i P_j + \frac{1}{2} \delta_{ijkl} \frac{\partial P_i}{\partial x_k} \frac{\partial P_j}{\partial x_l} + \frac{1}{4!} \beta_{ijkl} P_i P_j P_k P_l +$$

$$\frac{1}{2} c_{ijkl} u_{ij} u_{kl} + \frac{1}{3!} c'_{ijklmn} u_{ij} u_{kl} u_{mn} + d_{ijk} P_i u_{jk} +$$

$$g_{ijkl} P_i P_j u_{kl} + M_{ijklmn} P_i P_j u_{kl} u_{mn} + N_{ijklmn} P_i P_j P_k P_l u_{mn} + \dots \quad (1)$$

Здесь выписаны следующие ЭК: d_{ijk} — тензор пьезоэффекта, g_{ijkl} — стрикционные коэффициенты, M и N представляют собой примеры различных нелинейностей высших порядков. Выражение (1) записано для собственного СЭ, где \mathbf{P} является вектор поляризации P_i . Остальные обозначения в (1) стандартные [1,2]: α_{ij} связан с электрической восприимчивостью, β_{ijkl} — диэлектрическая нелинейность (это слагаемое учитывает взаимодействие между критическими флуктуациями), δ_{ijkl} — коэффициенты корреляции, c_{ijkl} — упругие модули. Будем считать, что диполь-дипольное взаимодействие, важное для полярных кристаллов, может быть учтено, если считать, что при переходе в \mathbf{k} -представление $\alpha_{ij}(\mathbf{k}) = \alpha_i(\mathbf{k}) \delta_{ij} + 4\pi n_i n_j$, $n_i = k_i/k$, \mathbf{k} — волновой вектор.

Выяснению характера флуктуационных поправок в физике ФП уделяется большое внимание. Такие поправки рассчитывались, например, для α , как для трехосного, так и одноосного СЭ [4], и для ситуаций различных размерностей. Поправки к линейному модулю упругости с определяют скачок и температурное поведение скорости звука при переходе в низкосимметричную фазу, а мнимая часть добавки ответственна за поглощение звука [5-7]. Эти флуктуационные поправки рассматривались и в присутствии примесей [8,9], а также в различных температурных режимах [10]. В [11] получены поправки к нелинейным модулям упругости.

Отметим сразу же, что в данной работе речь идет о поправках к так называемым «истинным» ЭК, т.е. таким, которые в отсутствие флуктуаций не аномальны по T [3]. Напомним, что, например, существуют четыре пьезоэлектрических константы (или модуля), связывающие векторы поляризации P_i или электрического поля E_i с деформацией u_{ij} или упругим напряжением σ_{ij} . Они отвечают разным экспериментальным условиям измерения. При переходе от одного набора модулей к другому затрагиваются тензоры c_{ijkl} , α_{ij} и другие, поэтому может возникнуть температурная аномалия, являющаяся просто следствием аномалии диэлектрической восприимчивости α_{ij} . Так, в простейшем случае двух степеней свободы P и v (где P — одна из компонент P_i , v — одна из компонент u_{ij}) термодинамический потенциал с точностью до квадратичных членов запишется в виде

$$\Phi = \frac{\alpha}{2} P^2 + dPv + \frac{c}{2} v^2 - PE.$$

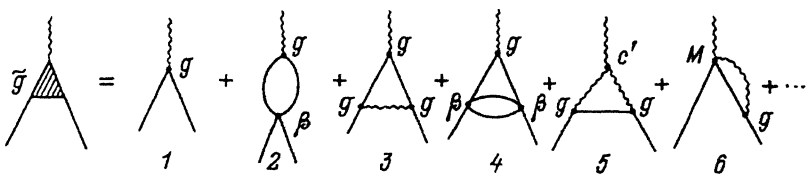


Рис. 1. Графики низших порядков, дающие вклад в перенормировку стрикционных коэффициентов.

Из условия

$$E = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial P} \right)_v = \alpha P + dv$$

имеем

$$P = \frac{1}{\alpha} E - \frac{d}{\alpha} v,$$

и термодинамический потенциал в переменных (E, v) будет иметь вид

$$\Phi' = -\frac{1}{2} \frac{1}{\alpha} E^2 + \left(\frac{d}{\alpha} \right) E v + \frac{1}{2} \left(c - \frac{d^2}{\alpha} \right) v^2.$$

В этих условиях новый пьезомодуль $d' = (d/\alpha)$ имеет температурную аномалию при $\alpha \rightarrow 0$ ($T \rightarrow T_c$). Мы будем рассматривать ЭК, связывающие P_i и U_{ij} , которые в указанном смысле являются «истинными».

1. Для расчетов будем использовать температурную диаграммную технику [12]. С этой точки зрения флуктуационные температурные поправки изображаются диаграммами с различным числом концевых линий («многохвостки»), причем эти концевые линии отвечают гриновским функциям ($\Gamma\Phi$) динамических переменных в (1). Здесь мы рассматриваем (1) как эффективный гамильтониан задачи [13]. Тогда однохвостки — просто среднее значение соответствующей величины. Двуххвостки с одинаковыми концами — одночастичная $\Gamma\Phi$, с разными концами — смешанная функция. Многохвостки высших порядков дают поправки к нелинейным коэффициентам. При этом температурные аномалии, даваемые определенной диаграммой, определяются количеством внутренних критических функций и числом интегрирований по ним.

Для определения стрикционных коэффициентов рассмотрим $\Gamma\Phi$

$$\Gamma_{ijmn} = \langle T P_i P_j u_{mn} \rangle,$$

из которой интересующая нас вершинная часть получается отбрасыванием $\Gamma\Phi$ концевых линий. Первые члены этого ряда изображены на рис. 1. Здесь волнистые линии — акустические $\Gamma\Phi$ $D_{ijkl} = -\langle T u_{ij} u_{kl} \rangle$, сплошные — $\Gamma\Phi$ поляризации $G_{ij} = -\langle T P_i P_j \rangle$. $\Gamma\Phi$ D_{ijkl} путем дифференцирования могут быть выражены через акустические $\Gamma\Phi$ смещений $D_{ij} = -\langle T u_i u_j \rangle$. Вершинная часть входит в связанные диаграммы соотношением

$$K_{ijkl} G_{mn} G_{sp} \tilde{g}_{npkl}.$$

Поправки к g имеют разный порядок по константам взаимодействий и различные температурные аномалии. В нижнем порядке наибольшую

аномалию дает диаграмма 2. Ее вклад равен

$$i\tilde{j}kl^2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \Omega_1, \Omega_2) = -\frac{1}{2}\beta_{ijmnp}g_{spkl}T \times \\ \times \sum_{n_1} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} G_{ms}(\mathbf{q}, \omega_{n_1}) G_{np}(-\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, -\Omega_1 - \Omega_2 - \omega_{n_1}). \quad (2)$$

Мы ограничимся здесь рассмотрением только статической перенормировки. Поэтому все внешние частоты и импульсы полагаются равными нулю; кроме того, флуктуации будем считать классическими. Для трехосного СЭ

$$G_{ij}(\mathbf{k}) = (\delta_{ij} - n_i n_j)G(k), \quad G(k) = (\alpha + \delta k^2)^{-1}, \quad (3)$$

где $n_i = k_i/k$, $\alpha(T)$ определяет температурную зависимость щели в спектре критических флуктуаций, $G(k)$ — ГФ поперечной поляризации. Тогда

$$\tilde{g}_{ijkl}^2 = -\frac{1}{2}\beta_{ijmnp}g_{spkl}T \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} (\alpha + \delta q^2)^{-2} \times \\ \times (\delta_{ms} - n_m n_s)(\delta_{np} - n_n n_p). \quad (4)$$

В (4) интегрирование по q и углам разделяется, и результат может быть записан в следующем виде:

$$\tilde{g}_{ijkl}^{(2)} = -\frac{1}{16\pi}\beta_{ijmnp}g_{spkl}T\delta^{-3/2}\alpha^{-1/2}L_{mnp}^{(2)}, \quad (5)$$

где

$$L_{mnp}^{(2)} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\Theta d\Theta (\delta_{ms} - n_m n_s)(\delta_{np} - n_n n_p) = \\ = \int \frac{d\Omega}{4\pi} (\delta_{ms} - n_m n_s)(\delta_{np} - n_n n_p) = \\ \delta_{ms}\delta_{np} - \delta_{ms}\overline{n_n n_p} - \delta_{np}\overline{n_m n_s} + \overline{n_m n_s n_n n_p} = \\ \frac{2}{5}\delta_{ms}\delta_{np} + \frac{1}{15}\delta_{mn}\delta_{sp} + \frac{1}{15}\delta_{mp}\delta_{ns}. \quad (6)$$

При вычислении угловой части (6) отметим, что $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ — элемент телесного угла, а $\frac{d\Omega}{4\pi}$ — плотность вероятности при равномерном распределении по углам. Поэтому черта означает усреднение по этому распределению. Тогда

$$n_i n_j = \frac{1}{3}\delta_{ij}, \\ n_i n_j n_k n_l = \frac{1}{15}(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}).$$

Из (5) видно, что температурная аномалия $\tilde{g}^{(2)} \sim (T - T_c)^{-1/2}$, если считать, что $\alpha \sim (T - T_c)$. Отметим также анизотропию (5), являющуюся следствием анизотропии ГФ G_{ij} , в результате чего каждая константа $\tilde{g}^{(2)}$

выражается через определенную комбинацию констант β и g с различными числовыми коэффициентами.

В одноосном СЭ имеем одну мягкую моду с ГФ $G_{ss}(\mathbf{k})$, равной

$$G_{ss}(\mathbf{k}) = \alpha^{-1}(\mathbf{k}), \quad \alpha(\mathbf{k}) = \alpha + \delta k^2 + 4\pi n_s^2, \quad (7)$$

где S означает направление оси спонтанной поляризации. Тогда вместо (4) имеем

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{ijkl}^{(2)} &= -\frac{1}{2}\beta_{ijss}g_{sskl}T \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} G_{ss}^2(\mathbf{q}) = \\ &= -\frac{1}{128\pi^2} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \beta_{ijss}g_{sskl}T \delta^{-3/2} \ln \left(\frac{16\pi}{\alpha} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Из-за ограничения фазового объема критических флуктуаций аномалия (8)

$$\tilde{g}^{(2)} \sim |\ln \alpha|$$

оказывается меньше, чем в трехосном СЭ. Интересным в данном случае является то обстоятельство, что температурно-аномальными оказываются даже те стрикционные коэффициенты $\tilde{g}_{ijkl}^{(2)}$, которые связывают деформацию с некритическими компонентами поляризации.

Определенные специфические особенности возникают при наличии линейной связи между поляризацией и деформацией. В этом случае они обе становятся критическими и их ГФ могут быть получены из следующих выражений:

$$\begin{aligned} G_{ij}^{-1}(\mathbf{k}, \omega_n) &= [\mu\omega_n^2 + \gamma|\omega_n| + \alpha_0(\mathbf{k})]\delta_{ij} - \\ &- d_{ikl}d_{jmn}k_k k_m \frac{[\rho\omega_n^2 + (\lambda + 2\mu)k^2]\delta_{ln} - (\lambda + \mu)k_l k_n}{(\rho\omega_n^2 + \mu k^2)[\rho\omega_n^2 + (\lambda + 2\mu)k^2]}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$D_{ln}^{-1}(k, \omega_n) = (\rho\omega_n^2 + \mu k^2)\delta_{ln} + (\lambda + \mu)k_l k_n - \frac{d_{ikl}d_{jmn}k_k k_m \delta_{ij}}{\mu\omega_n^2 + \gamma|\omega_n| + \alpha_0(\mathbf{k})}. \quad (10)$$

Здесь мы, следуя [14], описываем упругую систему в приближении сплошной среды с коэффициентами Ламэ λ и μ . Величина α_0 имеет смысл α вжатом кристалле. Видно, что возникает дополнительный вклад в анизотропию спектра критических флуктуаций, который определяется тензором d .

Обычно рассматривается взаимодействие типа $d_{zxy}P_z u_{xy}$, характерное для кристаллов группы КДР. В этом случае, например, для (9) это приводит к перенормировке $\alpha_0(\mathbf{k})$

$$\alpha(\mathbf{k}) = \alpha + \delta k^2 + dn_z^2 + 4mn_x^2 n_y^2, \quad (11)$$

где

$$d = 2d_{zxy}, \quad \alpha = \alpha_0 - \frac{d^2}{4\mu}$$

— значение для свободного кристалла,

$$S = 4\pi + \frac{d^2}{4\mu}, \quad m = \frac{d^2}{4\mu} \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu}.$$

Заменяя в (7) $\alpha(\mathbf{k})$ на (11), вместо (8) получим

$$\tilde{g}_{ijkl}^{(2)} = -\frac{1}{8}\beta_{ijss}g_{sskl}T\delta^{-3/2}s^{-3/2}\left[\ln\left(\frac{4\sqrt{s}}{\sqrt{\alpha+m}}\right) - \sqrt{\frac{\alpha}{\alpha+m}}\right]. \quad (12)$$

Вклад (12) растет при $T \rightarrow T_c$, но не аномально с бесконечной производной в точке $T = T_c$.

Отметим, что участие в линейном взаимодействии любой сдвиговой деформации также приводит к подавлению флуктуаций. Так, если вместо u_{xy} присутствует u_{xz} , то

$$\alpha(k) = \alpha + \delta k^2 + 4\pi n_z^2 + \frac{d^2}{4\mu}n_y^2 + 4mm_x^2n_z^2.$$

Наличие продольной деформации u_{xx} , перпендикулярной к оси Z , приводит к аналогичному результату, хотя выражение для $\alpha(\mathbf{k})$ имеет другой вид

$$\alpha(\mathbf{k}) = \alpha_0 + \delta k^2 + 4\pi n_z^2 - \frac{d^2}{4\mu}n_x^2 \left[1 - \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu}n_x^2\right].$$

Единственный случай, когда за счет пьезоэффекта не происходит «гашения» флуктуаций, — это когда поляризация P_z взаимодействует с продольной деформацией того же направления. Здесь

$$\alpha(\mathbf{k}) = \alpha_0 + \delta k^2 + \left(4\pi - \frac{d^2}{\mu}\right)n_z^2 + 4mn_z^4.$$

В этом случае аномалии будут такими же, как у одноосного СЭ без пьезоэффекта в высокосимметричной фазе, но в точке $\alpha_0 = 0$. Такое сильное «гашение» флуктуаций обусловлено совместным эффектом диполь-дипольного взаимодействия в одноосном СЭ, при котором критическими являются только флуктуации в плоскости, перпендикулярной оси спонтанной поляризации, и линейной связи, которая оставляет критическими только выделенные направления в этой плоскости. Заметим в этой связи, что если ФП не является СЭ, то указанное подавление аномалий может и не иметь места. Для СЭ взаимодействие $P_z u_{zz}$ может быть единственным, только если пьезомодули при сдвиговых деформациях оказываются по какому-то причине случайно малыми.

2. Следующая диаграмма 3 (рис. 1) представляет собой перенормировку коэффициента g только за счет стрикционного взаимодействия

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{ijkl}^3(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \Omega_1, \Omega_2) &= -g_{stkl}g_{imnp}g_{jcdf}T^\times \\ &\times \sum_n \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} G_{ms}(\mathbf{q}, \omega_n) G_{tc}(-\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}, -\Omega_1 - \omega_n)(\mathbf{q} - \mathbf{k}_2)_n \times \\ &\times (\mathbf{q} - \mathbf{k}_2)_d D_{pf}(\mathbf{q} - \mathbf{k}_2, \omega_n - \Omega_2), \end{aligned} \quad (13)$$

где D_{pf} — акустическая $\Gamma\Phi$, равная

$$D_{pf}(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{[\rho\omega_n^2 + (\alpha + 2\mu)k^2]\delta_{pf} - (\alpha + \mu)k_p k_f}{(\rho\omega_n^2 + \mu k^2)[\rho\omega_n^2 + (\alpha + 2\mu)k^2]}. \quad (14)$$

Отметим, что выражение (13) можно рассматривать и самосогласованно в принятом приближении. Тогда в левой и правой частях стоят одни и те же g , т.е. g должно определяться из решения этой системы уравнений. Здесь мы ограничимся рассмотрением только по теории возмущений. Тогда в правой части (13) g нужно рассматривать как затравочные, не имеющие температурной зависимости.

В статическом случае для трехосного СЭ имеем следующий результат:

$$\begin{aligned} \bar{g}_{ijkl}^{(3)} &= -g_{stkl}g_{imnp}g_{jcdf} \frac{T}{\mu} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} (\alpha + \delta q^2)^{-2} \times \\ &\times (\delta_{ms} - n_m n_s)(\delta_{tc} - n_t n_c) [\delta_{pf} n_n n_d - \left(\frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \right) n_p n_f n_d] = \\ &= -\frac{1}{8\pi} g_{stkl}g_{imnp}g_{jcdf} \frac{T}{\mu} \delta^{-3/2} \alpha^{-1/2} L_{mnpcdfst}^3, \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} L_{mnpcdfst}^3 &= \int \frac{d\Omega}{4\pi} (\delta_{ms} - n_m n_s)(\delta_{tc} - n_t n_c) \times \\ &\times [\delta_{pf} n_n n_d - \left(\frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \right) n_p n_f n_d]. \end{aligned} \quad (15a)$$

Температурная аномалия (15) оказывается такой же, как и (5), но анизотропия L^3 имеет более сложный вид (она может быть вычислена аналогично (6)).

Для одноосного СЭ, поскольку $\alpha(\mathbf{k})$ зависит от n_s (формула (7)), интегрирование по q и углам в (13) уже не разделяется и вклад имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{g}_{ijkl}^{(3)} &= -g_{sskl}g_{isnp}g_{jdsf} \frac{T}{\mu} \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \left[\delta_{pf} n_n n_d - \right. \\ &\left. - \left(\frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \right) n_p n_f n_n n_d \right] \int q^2 dq G_{ss}^2(q). \end{aligned} \quad (16)$$

Ненулевой вклад в (16) дают только слагаемые, содержащие попарно совпадающие индексы p, f, n и d . Не все отличные от нуля слагаемые имеют аномалию по α . Аномалия получается, когда $p, f, n, d \neq s$, причем у всех слагаемых она одинакова и пропорциональна $|\ln \alpha|$. Анизотропия же в данном случае проявляется в различной комбинации затравочных коэффициентов g и числовых множителей.

Наличие пьезоэффекта играет для диаграммы 3 существенно другую роль, чем для диаграммы 2. Как уже отмечалось выше, линейная связь приводит, вообще говоря, к двум эффектам — подавлению флуктуаций и увеличению числа критических степеней свободы. В рассматриваемой диаграмме как раз в большей степени проявляется второе свойство за счет увеличения числа критических внутренних линий, что приводит в конечном итоге не к уменьшению аномалии, а к ее увеличению. Продемонстрируем это на примере вычисления поправки к определенной константе

$$\bar{g}_{3311}^{(3)} = -g_{3311}^3 \frac{T}{\mu} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} G_{33}^2(\mathbf{q}) q_1^2 D_{11}(\mathbf{q}). \quad (17)$$

Здесь из всех возможных слагаемых в (13) выписано только одно из тех слагаемых, которые приводят к наибольшей аномалии. Акустическая ГФ $D_{11}(\mathbf{q})$ находится из (10) и может быть записана в виде

$$D_{11}(\mathbf{q}) = D_{11}^0(\mathbf{q}) + \frac{d^2}{4\mu} G_{33}(q) \frac{1}{\mu q^2} [(n_2^2 + n_3^2) + \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} n_1^2 n_3^2], \quad (18)$$

где $D_{11}^0(\mathbf{q})$ — один из элементов матрицы $D_{ij}^0(\mathbf{q})$ (14). Аномалию дает второе слагаемое в (18)

$$\tilde{g}_{3311}^{(3)} = -\frac{1}{64(2\pi)^{3/2}} g_{3311}^3 \frac{d^2}{4\mu} T \delta^{-3/2} (\alpha + m)^{-1/2} \alpha^{-1/2}. \quad (19)$$

Видно, что особенность $\sim (T - T_c)^{-1/2}$, тогда как диаграмма 2 в аналогичной ситуации не имеет особенности.

Оценим относительную величину поправок, даваемых диаграммами 2 и 3. Отношение (15) к (5) имеет порядок

$$g^2/\lambda\beta = \Delta\lambda/\lambda \sim 0.1 \div 0.3,$$

где $\Delta\lambda$ — величина порядка скачка модуля упругости при ФП [3]. Тот же порядок величины имеет отношение вкладов (16) и (8). При наличии же пьезоэффекта отношение (19) к (12) имеет порядок

$$(\Delta\lambda/\lambda) (d^2/\mu) (1/\sqrt{\alpha}) \approx (\Delta\lambda/\lambda) (r_c/a),$$

где r_c — радиус корреляции флуктуаций, a — порядка постоянной решетки. Вблизи T_c $r_c \sim 10^3 a$ [4] (т.е. $(r_c/a) \gg 1$), так что отношение вкладов 10^2 .

Из рассмотренного выше ясно, что диаграмма типа 5 в последнем случае имеет ту же особенность, что и диаграмма 3, хотя без пьезоэффекта она вообще неаномальна. Диаграмму 4 можно рассматривать как следующую поправку к вершине β диаграммы 2 с известным корреляционным параметром $\xi = \beta T \delta^{-3/2} \alpha^{-1/2}$ [4]. Вообще количество диаграмм высших порядков по всем константам взаимодействий очень быстро возрастает. Мы ограничимся здесь рассмотрением статических перенормировок низших порядков.

3. Перейдем к следующему часто используемому ЭК — пьезоконстанте. В этом случае простейшая поправка дается диаграммой, содержащей смешанную ГФ (рис. 2)

$$R_{ij} = -\langle T u_i P_j \rangle,$$

где она условно изображается заштрихованным прямоугольником с волнистой и сплошной концевыми линиями. Ее вклад имеет вид

$$\tilde{d}_{ikl}(\mathbf{k}, \Omega) = g_{ipmn} g_{stkl} T \sum_n \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} G_{sp}(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \omega_n - \Omega) \times$$

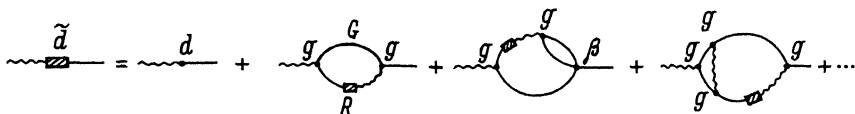


Рис. 2. Графическое изображение первых членов ряда для пьезоконстанты.

$$\times (-iq)_m R_{nt}(-\mathbf{q}, -\omega_n). \quad (20)$$

Смешанная $\Gamma\Phi$ получается из уравнений движения

$$\begin{aligned} -(G^0)_{is}^{-1} G_{sj} &= \delta_{ij} + id_{is} k_l R_{sj}, \\ -(D^0)_{sm}^{-1} R_{mj} &= id_{is} k_l G_{ij}, \end{aligned} \quad (21)$$

откуда смешанную $\Gamma\Phi$ можно выразить следующим образом:

$$R_{ij} = -D_{is}^0 d_{msl} (ik)_l G_{mj}. \quad (22)$$

Подставляя (22) в (20) и учитывая (11), для статической поправки имеем

$$\begin{aligned} \tilde{d}_{ikl} &= d_{jcf} g_{ipmn} g_{stkl} T \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} G_{sp}(\mathbf{q}) G_{jt}(-\mathbf{q}) q_m q_c D_{nf}^0(-\mathbf{q}) = \\ &= d_{scf} g_{ismn} g_{sskl} T \mu \int \frac{d\Omega}{4\pi} \left[\delta_{nf} n_m n_c - \left(\frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \right) n_m n_n n_c n_f \right] \times \\ &\times \int \frac{1}{2\pi^2} d^2 q [\alpha + \delta q^2 + s n_3^2 + m n_1^2 n_2^2]^{-2}. \end{aligned} \quad (23)$$

Оценка интеграла (23) показывает, что при $T \rightarrow T_c$ вклад возрастает, но не аномально

$$\tilde{d} \sim \left[\ln \left(\frac{4\sqrt{s}}{\sqrt{\alpha + m}} \right) - \sqrt{\frac{\alpha}{\alpha + m}} \right].$$

Температурные аномалии $\text{Re } \tilde{d}$ могут, вообще говоря, появиться в высших порядках теории возмущений, однако они, по-видимому, не представляют особого интереса ввиду малости числового коэффициента, так что могут стать заметными в очень узкой окрестности T_c .

В практическом отношении для пьезоконстанты может оказать существенным появление аномальной $\text{Im } \tilde{d}$. При малых частотах $\Omega \ll \Omega_p = \alpha/\gamma$, где γ — кинетический коэффициент, описывающий релаксацию мягкой моды, из (20) можно получить

$$\text{Im } \tilde{d} \sim \gamma \Omega \alpha^{-1/2},$$

т.е. ведет себя как $(T - T_c)^{-1/2}$ при приближении к точке ФП.

Уже на примере вычисления поправок к двум наиболее важным ЭК — стрикционному и пьезоконстанте — видно, что вклады могут быть как аномальными, так и неаномальными (см. формулы (12), (23)). Отсутствие аномалии во флуктуационных поправках у собственных СЭ с пьезоэффектом в высокосимметричной фазе известно для α [15], теплоемкости [14], скорости звука [7]. Это дало основание ввести термин «ФП без особенности» [14]. По-видимому, это действительно верно для величин, которые графически можно представить двуххвостками, и может быть для некоторых выделенных типов диаграмм высших порядков (например, диаграмма 2). В общем же случае температурные аномалии, как

правило, могут иметь место для многохвосток. Поэтому указанный термин, по-видимому, является достаточно условным. Это видно на примере восприимчивости второго порядка χ^2 , которая является треххвосткой со сплошными концевыми линиями. В статическом случае она имеет вид

$$\chi_{ijk}^{(2)} = g_{ismn}g_{jpdf}g_{klfh}T \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} G_{sp}(\mathbf{q}) \times \\ \times q_d q_f D_{ht}(q) (-iq)_m R_{ni}(-q). \quad (24)$$

Вычисляя (24), получаем

$$\chi^2 \sim \alpha^{-1/2} \sim (T - T_c)^{-1/2}.$$

Интересно отметить, что (24) фактически не является поправкой (член, пропорциональный P^3 , в затравочном гамильтониане отсутствует, а его возникновение обязано нелинейным взаимодействиям в системе с пьезоэффектом).

Аналогично могут быть рассчитаны температурные поправки к высшим ЭК M и N и т.д. Во многих случаях их аномалии можно легко определить путем дифференцирования по некоторым параметрам поправок к ЭК более низких порядков (например, используя соотношение $\frac{\partial G}{\partial \alpha} = -G^2$).

В заключение еще раз отметим, что практически важные ЭК кристаллов с ФП, так же как и многие другие физические характеристики кристалла, обнаруживают вблизи T_c температурные аномалии, а при учете частотной дисперсии могут содержать температурно-аномальную мнимую часть. Показано также, что наличие пьезоэффекта может приводить не только к подавлению флуктуационных аномалий, но для определенных процессов, наоборот, к их увеличению.

Список литературы

- [1] Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. М.: Мир, 1984. 736 с.
- [2] Сегнетоэлектрики в технике СВЧ / Под ред. О.Г.Вендика. М.: Сов. радио, 1979. 272 с.
- [3] Струков Б.А., Леванюк А.П. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. М.: Наука, 1983. 240 с.
- [4] Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М.: Наука, 1973. 327 с.
- [5] Леванюк А.П. // ЖЭТФ. 1965. Т. 49. № 4. С. 1304-1312.
- [6] Леванюк А.П., Минаева К.А., Струков Б.А. // ФТТ. 1968. Т. 10. № 8. С. 2443-2451.
- [7] Леванюк А.П., Шедрина Н.В. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 10. С. 3012-3017.
- [8] Лебедев Н.И., Леванюк А.П., Сигов А.С. // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. № 4. С. 1423-1436.
- [9] Шедрина Н.В., Шедрин М.И. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 2. С. 594-602.
- [10] Шедрин М.И., Шедрина Н.В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 139-145.
- [11] Шедрина Н.В., Шедрин М.И. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 5. С. 1479-1487.
- [12] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статической физике. М.: ГИФМЛ, 1962. 443 с.
- [13] Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982. 382 с.
- [14] Леванюк А.П., Собянин А.А. // Письма в ЖЭТФ. 1982. Т. 11. № 11. С. 540-543.
- [15] Леванюк А.П., Шедрина Н.В. // ФТТ. 1972. Т. 14. № 4. С. 1204-1211.

Институт инженеров водного транспорта
Нижний Новгород

Поступило в Редакцию
26 февраля 1993 г.