УДК 536.320

ВЛИЯНИЕ ПРОТЯЖЕННЫХ ДЕФЕКТОВ НА ТЕМПЕРАТУРНЫЕ АНОМАЛИИ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ С ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ

Н. В. Щедрина, М. И. Щедрин

Рассматриваются флуктуационные поправки к затуханию $\varkappa$ и скорости ультразвука v в слоистых кристаллах, где имеет место тенденция к образованию плоских и линейных протяженных дефектов. Расчет производится для двух типов дефектов, имеющих разные граничные условия и вызывающих длинноволновые неоднородности типа «замороженной» флуктуации. Для $\varkappa$ могут иметь место следующие аномалии: $\tau^{-3}\ln^{-2}\tau$, $\tau^{-5/2}\ln^{-2}\tau$, τ^{-2}, $\tau^{-3/2}$ в случае $2D$ и $\tau^{-5/2}$, $\tau^{-3/2}$ в случае $1D$. Для v соответственно $\tau^{-2}\ln^{-2}\tau$, $\tau^{-3/2}\ln^{-2}\tau$, τ^{-1}, $\tau^{-1/2}$ и $\tau^{-3/2}$, $\tau^{-1/2}(1+\mathrm{const}\ln\tau)$, $(\tau=T/T_c-1)$. В зависимости от соотношений между радиусом корреляции флуктуаций, характерным размером протяженных дефектов и масштабом его внутренней неоднородности («шероховатости») реализуются разные температурные аномалии. В отличие от чисто флуктуационных поправок примесные имеют аномалию не только в области низких частот, но и высоких, хотя и менее сильную. Обсуждаются критерии применимости линейного приближения при расчете корреляционных функций дефектов низших размерностей. Отмечается, что аномалии такого же характера должны проявляться в теплоемкости и в спектрах комбинационного рассеяния света на флуктуациях параметра порядка.

В сильно анизотропных слоистых веществах наблюдается тенденция к образованию протяженных плоских и линейных дефектов. Одним из наиболее интересных и актуальных в настоящее время является вопрос о влиянии таких дефектов на физические свойства высокотемпературных сверхпроводников. Экспериментально протяженные дефекты наблюдались уже во многих работах [1, 2] (см. также ссылки к [3]). В [3] теоретически исследуется проводимость металла с плоскими дефектами. Обычно разупорядочение происходит за счет неправильного чередования слоев (у Y—Ba—Cu—O, например, содержащих Y и Ba) или цепочек CO.

Здесь мы будем рассматривать окрестность температур вблизи T_c — температуры структурного фазового перехода (ФП). Вопрос о происхождении и характере температурных аномалий вблизи точки структурного ФП в ВТСП и о возможной связи его с существованием сверхпроводящего перехода является сейчас, по-видимому, одним из ключевых в понимании механизма ВТСП [4, 5]. При этом остается неясным, какой конкретно тип ФП здесь имеет место: является ли он просто структурным или сопровождается сегнетоэлектрическими, ферроэластическими или же какими-либо другими свойствами? Тем не менее имеется достаточно большое число экспериментальных фактов, указывающих на то, что переход идет через механизм мягкой моды [6–9], причем эта мягкая мода имеет передемпфированный характер [6].

В [10, 11] отмечалось, что температурные аномалии вблизи T_c структурного ФП в ВТСП, как показывает эксперимент, оказываются настолько резкими, что не описываются известными формулами для флуктуационных поправок в классическом высокотемпературном приближении. Так, экспериментально аномалия скорости звука $\Delta v \sim \tau^{-n}$, где $\tau=(T-T_c)/T_c$, а $1 < n < 2$ (ближе к 1.5), тогда как теоретическое значение n как для чисто колебательной, так и для передемпфированной моды равно $1/2$. Для затухания звука экспериментально $\varkappa \sim \tau^{-m}$, где $2 < m < 3$ (ближе к 2.6), а теоретическое значение m равно $1/2$ для колебательной моды и $3/2$ для передемпфированной. В работе [11] показано, что в чистом кристалле, без дефектов, близкие к экспериментальным значения n и m могут быть получены для флуктуационных поправок только в низкотемпературной асимптотике и только для передемпфированной мягкой моды. Если же оказывается, что нерегулярность и определенная дефектность являются неотъемлемыми свойствами даже монокристаллических ВТСП, то представляет интерес исследование различных моделей примесных состояний и возникающих при этом температурно-аномальных вкладов и их свойств. Одним из фактов, подтверждающих важность определенного характера дефектной структуры, является хорошо известное влияние нестехиометричности по кислороду (а также и по некоторым другим элементам) на положение T_c и близость ее к температуре сверхпроводящего перехода. Это видно, например, из фазовой диаграммы для $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, приведенной в [5]. Известно [12, 13], что некоторые типы дефектов могут приводить к сильным температурным аномалиям, большим, чем чисто флуктуационные. Однако это справедливо далеко не для всех дефектов. Наличие сильно анизотропной матрицы с ФП дает основание предполагать, что даже точечные дефекты могут быть в определенной степени анизотропны, что отражается на температурном поведении поправок. Здесь мы, как и в [11], ограничимся рассмотрением акустических свойств и получим выражения для примесных поправок от ряда типичных дефектов различной размерности с тем, чтобы можно было судить о том, какие из них в принципе могли быть ответственными за наблюдаемые температурные аномалии. Указывается также, какие другие физические величины должны иметь такие же аномалии, как и акустические.

1. Дефекты рассматриваются в рамках представлений о нарушении симметрии исходного кристалла-матрицы с ФП и возникновении «замороженной» флуктуации параметра перехода η [12–14]. Многие свойства таких дефектов изложены в [12, 13]. Для расчетов, следуя [15–17], используется стандартная методика гриновских функций [18]. Для звуковой волны частоты ω и с волновым вектором $\mathbf{q}$ примесная поправка к комплексному модулю упругости имеет вид

$$\Delta\lambda(\omega, \mathbf{q}) = -g^2\Sigma(\omega, \mathbf{q}),$$

где

$$\Sigma(\omega, \mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{qr}}\Theta(\mathbf{r})\, G(\omega, \mathbf{r})\, d\mathbf{r} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\,\Theta(\mathbf{k})\, G(\omega, \mathbf{q}-\mathbf{k}). \qquad (1)$$

Здесь g — константа взаимодействия рассматриваемой акустической моды с параметром ФП, G — гриновская функция η, Θ — примесная парная корреляционная функция (КФ). Характер пространственного распределения замороженной флуктуации определяется многообразием решений уравнения стационарности для η_0 с различными граничными условиями на ядре дефекта. Требуемую КФ получаем, добавляя в гамильтониан для η слагаемые (со случайной силой f) в виде ηf, $\eta\, \partial f/\partial x_i$ и т. д., что соответствует дефектам S, P,... типа. Величина f имеет вид определенной суммы δ-функций, центрированных в точках нахождения дефектов $\mathbf{r}_i$ [17]

$$f(\mathbf{r}) = f_0 v_0 \sum_{i=1}^{N} a_i \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i),$$

где v_0 — объем дефекта; f_0 — размерная константа (сила дефекта); a_i — безразмерная величина, учитывающая состояние дефекта. Неоднородное распределение $\eta_0(\mathbf{r})$, обусловленное всеми N дефектами в кристалле, записывается как $\eta_0(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$ (для S-дефекта). Здесь $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — гриновская функция при $\omega_n = 0$. После усреднения по расположению дефектов получаем выражение для парной КФ $\Theta(\mathbf{r}) = \overline{\eta_0(\mathbf{r})\,\eta_0}$, а ее Фурье-компонента $\Theta(\mathbf{k}) = n \mid \eta_0(\mathbf{k}) \mid^2$, n — концентрация дефектов. Для P-дефектов в $\eta_0(\mathbf{k})$ возникает лишний множитель k_i из-за производной и соответственно k_i^2 в $\Theta(\mathbf{k})$.

Отметим, что в нижнем порядке по g вклад (1) является единственным и определяется только парной КФ Θ. Высшие КФ для η_0 появляются при учете поправок на взаимодействие флуктуаций (нелинейный член $(1/4!)\,\beta\eta^4$ в эффективном гамильтониане [19]). Запишем выражение для КФ различных типов дефектов в линейном приближении. В этом случае гриновская функция имеет вид [11]

$$G_0(\omega_n, \mathbf{k}) = -[\mu\omega_n^2 + \gamma\,|\omega_n| + \alpha(T, \mathbf{k})]^{-1}, \tag{2}$$

где μ и γ — соответственно эффективная масса и затравочный, неособенный коэффициент затухания; $\alpha(T, \mathbf{k}) = \alpha(T) + \delta_i k_i^2$ определяет температурно-зависимый спектр критических флуктуаций. При не слишком низких T $\alpha(T) = \alpha'(T - T_c) = \alpha_0\tau$. Величины δ_i учитывают анизотропию по $\mathbf{k}$. С учетом сказанного получаем для трехмерных точечных дефектов ($3D$)

$$\Theta_S(\mathbf{k}) = n_3 (f_0 v_0)^2 (\alpha + \delta_i k_i^2)^{-2}, \tag{3}$$

$$\Theta_P(\mathbf{k}) = n_3 (f_0 v_0 d)^2 (k_z / \alpha + \delta_i k_i^2)^2. \tag{4}$$

Здесь индекс «3» у n указывает, что это концентрация с размерностью см$^{-3}$; d имеет смысл среднего размера ядра дефекта. Отметим, что в основополагающих работах [12, 13] по данной модели дефекта предполагалась сферическая форма ядра дефекта с размером d и система с ФП считалась изотропной. При этом указывалось, что характер аномалий определяется видом распределения замороженной флуктуации вокруг дефекта, а не ядром дефекта [20]. Поэтому для анизотропной матрицы с ФП в первую очередь основную роль играет учет возникающей из-за свойств этой матрицы анизотропии зародышей новой фазы, а не пространственной конфигурации ядра дефекта (сфера, эллипсоид и др.), имеющего в макроскопической теории размеры порядка постоянной элементарной ячейки.

Таким образом, в нашем случае трехмерный точечный дефект характеризуется, как и раньше [12, 13], двумя параметрами f_0 и v_0, которые в изотропном случае связаны с d соотношением $f_0 v_0 = 4\pi d \eta_c \delta$; η_c есть параметр дефекта (характеризующий его «силу» или «интенсивность») и имеет смысл значения параметра η на дефекте. Учитывая, что $v_0 \sim d^3$, имеем $f_0 \sim \eta_c \delta / d^2$. Для анизотропной матрицы уравнение для η_0 содержит теперь $\delta_i \partial^2 \eta_0 / \partial x_i^2$, поэтому решение для одного изолированного точечного дефекта имеет вид

$$\eta_0(\mathbf{r}) = f_0 v_0 G(\mathbf{r}) = (4\pi)^{-1} f_0 v_0 (\delta_1\delta_2\delta_3)^{-1/2} e^{-\varkappa r'} / r',$$

где

$$r' = \sqrt{x^2/\delta_1 + y^2/\delta_2 + z^2/\delta_3}.$$

Связь между f_0 и η_c теперь по порядку величины имеет вид

$$f_0 v_0 = 3^{-1/2} \eta_c d \sqrt{\delta_1\delta_2\delta_3} \sqrt{\delta_1^{-1} + \delta_2^{-1} + \delta_3^{-1}}.$$

Один изолированный ($2D$) S-дефект имеет следующее распределение:

$$\eta_0^S(\rho) = \eta_c \mathscr{K}_0(\rho / r_{c\parallel}) / \mathscr{K}_0(d / r_{c\parallel}) \approx \eta_c \frac{\mathscr{K}_0(\rho / r_{c\parallel})}{\ln(r_{c\parallel}/d)}, \tag{5}$$

где $\rho=(x, y)$, $r_{c\parallel}$ — радиус корреляции в плоскости (ab) и соответственно

$$\Theta_S(\varkappa)=n_2\frac{(\eta_c\delta_\parallel)^2}{\ln^2(r_{c\parallel}/d)}\left(\frac{2\pi}{\alpha+\delta_\parallel\varkappa^2}\right)^2, \tag{6}$$

$\varkappa=(k_x, k_y)$, а n_2 — концентрация линейных дефектов с размерностью см$^{-2}$. Один из возможных типов P-дефекта

$$\eta_0^P(x, y)=\eta_c\left(\frac{x}{\rho}\right)\frac{\mathcal{K}_1(\rho/r_{c\parallel})}{\mathcal{K}_1(d/r_{c\parallel})}\approx\eta_c\left(\frac{d}{r_{c\parallel}}\right)\left(\frac{x}{\rho}\right)\mathcal{K}_1\left(\frac{\rho}{r_{c\parallel}}\right), \tag{7}$$

$\mathcal{K}_1(x)$ — функция Бесселя мнимого аргумента. Парная $2D$ КФ P-дефекта

$$\Theta_P(\varkappa)=n_2(\eta_c d\delta_\parallel)^2\left(\frac{2\pi k_x}{\alpha+\delta_\parallel\varkappa^2}\right)^2. \tag{8}$$

В общем случае для плоских $1D$ дефектов

$$\Theta(k_z)=\frac{n_1}{r_{c\perp}^{-2}+k_z^2}\left[(\eta_{c1}+\eta_{c2})^2-4\eta_{c1}\eta_{c2}\frac{k_z^2}{r_{c\perp}^{-2}+k_z^2}\right]. \tag{9}$$

Здесь η_{c1} и η_{c2} — граничные значения на ядре по обе стороны дефекта. Отсюда для $1D$ S-дефекта $\eta_{c1}=\eta_{c2}=\eta_c$, а для P-дефекта $\eta_{c1}=-\eta_{c2}=\eta_c$

$$\Theta_S(k_z)=n_1\eta_c^2(4\alpha\delta_\perp)(\alpha+\delta_\perp k_z^2)^{-2}, \tag{10}$$

$$\Theta_P(k_z)=n_1\eta_c^2(4\delta_\perp^2 k_z^2)(\alpha+\delta_\perp k_z^2)^{-2}, \tag{11}$$

n_1 — концентрация в см$^{-1}$.

При оценке возможных температурных аномалий, согласно (1), с учетом КФ (5)—(11) подчеркнем следующие обстоятельства. Проявление специфических свойств протяженных дефектов различных размерностей зависит от соотношения между параметром, характеризующим протяженность дефекта L (длина для линейного и средний или характерный размер для плоского), величиной R_0, связанной с внутренними свойствами протяженного дефекта и имеющей смысл масштаба неоднородностей вдоль оси линейного $2D$ дефекта или в плоскости для $1D$ дефекта и радиусом корреляции флуктуаций r_c. При этом, естественно, для анизотропных систем (как для структуры ВТСП) вводится несколько длин корреляции вдоль кристаллографических осей $r_{ci}=\sqrt{\delta_i/\alpha}$. Для нормальной фазы ВТСП, как и для сверхпроводящих флуктуаций, при структурных ФП достаточно использовать продольный и поперечный радиусы корреляции: $r_{c\parallel}$ и $r_{c\perp}$ $(r_{c\parallel}>r_{c\perp})$. Отметим, что обе длины корреляции в нашей задаче имеют двоякий смысл: это и длины корреляции термических флуктуаций параметра перехода η и в то же время это характерные размеры неоднородности η_0 — «замороженной» флуктуации.

Если $L\gg R_0\gg r_{c\parallel}, r_{c\perp}$ (область I), т. е. не слишком близко к T_c, должно обнаруживаться поведение дефекта низшей размерности. Действительно, это неравенство означает, что внутренняя неоднородность дефекта (его «шероховатость») проявляется слабо и в предельном случае вдоль оси $2D$ дефекта (или в плоскости $1D$ дефекта) фактически устанавливается дальний порядок $\sim L$ через граничное условие на ядре дефекта. Тогда, например, для $2D$ это означает, что корреляционная функция $\Theta\sim\delta(k_z)$, интегрирование по k_z в (1), таким образом, убирается, G становится двумерной («спуск» размерности) и результирующий вклад оказывается чисто двумерным.

В теории, рассматривающей точечные дефекты в кристалле [12, 13], введенный выше параметр η_c есть просто число. Для протяженного дефекта естественным обобщением является задание функции $\eta_c(r_s)$ — значения граничных условий, взятых на поверхности дефекта. Тогда шероховатость дефекта описывается внутренней КФ $\overline{\gamma_{ic}(\mathbf{r}_{1s})\,\gamma_{ic}(\mathbf{r}_{2s})}$, где черта означает усреднение по статистическим свойствам неоднородности в граничном условии. Мы рассматриваем здесь только предельные виды этой корреляции: однородный — область I, мелкомасштабная неоднородность — область II, когда Фурье-компонента этой КФ не зависит от волнового числа при $k\to 0$. Тогда в (1) сохраняется интегрирование по k_z (для $2D$), G — трехмерна и вид температурной особенности изменяется по сравнению с областью I. Рассмотренный случай может реализоваться при выполнении следующих условий: $R_0\ll r_{c\perp}\ll L$ для $2D$ и $R_0\ll r_{c\parallel}\ll L$ для $1D$.

Когда все длины корреляций являются самыми большими параметрами, т. е. выполняется неравенство $R_0\ll L\ll r_{c\parallel},\ r_{c\perp}$ (область III), проявляется $3D$ поведение.

2. Температурные аномалии появляются в (1) при интегрировании по волновому вектору. Приведем соответствующие выражения для таких интегралов в различных ситуациях. Для точечного $3D$ S-дефекта

$$I_0=\int\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\left(\frac{1}{\alpha+\delta_i k_i^2}\right)^2\frac{1}{\alpha-\mu\omega^2+i\gamma\omega+\delta_i(q-k)_i}=\frac{1}{8\pi\sqrt{\delta_1\delta_2\delta_3}}\,\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\,\frac{1}{(\sqrt{\alpha}+\sqrt{a})^2},\qquad(12)$$

$$a=\alpha-\mu\omega^2+i\gamma\omega+\delta_i q_i^2.$$

Рассмотрим частные случаи. Кроме частоты звука ω, в задаче есть характерные частоты: $\omega_c=\sqrt{\alpha/\mu}$ — собственная частота мягкой моды, $\omega_r=\alpha/\gamma$ — релаксационная частота, а также затухание $\Gamma=\gamma/\mu$. В зависимости от соотношения между этими параметрами получаются предельные случаи с разной аномалией по T. Важным параметром является также отношение длины волны звука λ_3 и соответствующего r_c, отделяющее область высоких частот $\lambda_3/r_c\lesssim 1$ ($\delta_i q_i^2\gtrsim\alpha$ или $\omega\gtrsim v\delta_i^{-1/2}\alpha^{1/2}$, v — скорость звука) от низких $\lambda_3/r_c\gg 1$ ($\delta_i q_i^2\ll\alpha$, $\omega\ll v\delta_i^{-1/2}\alpha^{1/2}$). Поскольку такие параметры, как γ, μ, v, не связаны между собой, в принципе допустимо большое разнообразие соотношений между ω и другими характерными частотами. Из (12) видно, что особенностью примесных вкладов в отличие от чисто флуктуационных является появление температурной аномалии (хотя и не очень большой $\alpha^{-1/2}$) в области больших частот, что характерно для существования в системе замороженных флуктуаций (во всяком случае S-типа). Тем не менее наиболее сильные особенности имеют место для малых частот ($\delta_i q_i^2\ll\alpha$)

$$I_0^S(0,\ 0)=\frac{1}{32\pi}(\delta_1\delta_2\delta_3)^{-1/2}\,\alpha^{-3/2}.\qquad(13)$$

Такая аномалия у скорости звука. Для затухания звука наибольшая аномалия при передемпфированной моде ($\Gamma\gg\omega_c$)

$$\operatorname{Im} I_0^S(\omega,\ 0)\approx-\frac{1}{64\pi}(\delta_1\delta_2\delta_3)^{-1/2}\,\gamma\omega\alpha^{-5/2}.\qquad(14)$$

Этот результат получен в изотропном случае в [12, 21]. В чисто колебательном режиме ($\Gamma\ll\omega_c$) затухание отлично от нуля только для $\omega>\omega_c$, т. е. имеет место порог.

Для P-дефектов имеем общий результат

$$I_0^P(\omega,\ \mathbf{q})=\frac{1}{24\pi}\,\delta_1^{-1/2}\delta_2^{-1/2}\delta_3^{-3/2}\,\frac{2\sqrt{a}+\sqrt{\alpha}}{(\sqrt{a}+\sqrt{\alpha})^2}\qquad(15)$$

и соответственно аномальные части с меньшими, чем в (13), (14), особенностями

$$I_0^P(0,\ 0)=\frac{1}{32\pi}\,\delta_1^{-1/2}\delta_2^{-1/2}\delta_3^{-3/2}\alpha^{-1/2},$$

$$\operatorname{Im} I_0^P(\omega,\ 0) = -\frac{1}{96\pi}\delta_1^{-1/2}\delta_2^{-1/2}\delta_3^{-3/2}\gamma\omega\alpha^{-3/2}. \tag{16}$$

Для $2D$ S-дефектов с учетом (6) получаем из (1) вклад, имеющий чисто двумерный характер

$$I_1^S(\omega,\ 0) = \frac{1}{4\pi}(\delta_1\delta_2)^{-1/2}\frac{1}{\alpha\ln^2\alpha}\frac{(\alpha-\mu\omega^2)-i\gamma\omega}{(\alpha-\mu\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2}. \tag{17}$$

Аномалии скорости звука и затухания в этом случае

$$I_1^S(0,\ 0) = \frac{1}{4\pi}(\delta_1\delta_2)^{-1/2}(\alpha\ln\alpha)^{-2},$$

$$\operatorname{Im} I_1^S(\omega,\ 0) \approx -\frac{1}{4\pi}(\delta_1\delta_2)^{-1/2}\frac{\gamma\omega}{\alpha(\alpha\ln\alpha)^2}. \tag{18}$$

Последняя формула в (18) справедлива для релаксационной динамики. Отметим, что при оценке приведенных выше формул (12)—(18) пренебрежение анизотропией, т. е. использование одного коэффициента δ, изменяет только числовой множитель, не затрагивая характера температурной аномалии. Поэтому, имея в виду лишь определение вида температурной особенности, ниже мы приводим результаты в этом приближении.

В области II (I) допускается дополнительное интегрирование по сравнению с предыдущим случаем, что приводит к уменьшению особенностей

$$I_2^S(\omega,\ \mathbf{q}) = \left(\frac{1}{8\pi}\right)\delta^{-3/2}\alpha^{-1}\ln^{-2}\alpha a^{-1/2}, \tag{19}$$

откуда имеем в области низких частот

$$I_2^S(0,\ 0) = \left(\frac{1}{8\pi}\right)\delta^{-3/2}\alpha^{-3/2}\ln^{-2}\alpha,$$

$$\operatorname{Im} I_2^S(\omega,\ 0) \approx -\left(\frac{1}{16\pi}\right)\delta^{-3/2}\gamma\omega\alpha^{-5/2}\ln^{-2}\alpha. \tag{20}$$

Результаты для $2D$ P-дефектов: аномалии для области I

$$I_1^P(0,\ 0) \sim \alpha^{-1}, \quad \operatorname{Im} I_1^P(\omega,\ 0) \sim \alpha^{-2}, \tag{21}$$

для области II

$$I_2^P(0,\ 0) \sim \alpha^{-1/2}, \quad \operatorname{Im} I_2^P(\omega,\ 0) \sim \alpha^{-3/2}. \tag{22}$$

В случае плоских $1D$ S-дефектов, используя КФ (10), имеем общий результат

$$I_3^S(\omega,\ \mathbf{q}) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)\delta^{-1/2}\frac{\alpha+a+\sqrt{\alpha a}}{\sqrt{\alpha}\,a^{3/2}(\sqrt{a}+\sqrt{\alpha})}, \tag{23}$$

откуда следуют низкочастотные аномалии

$$I_3^S(0,\ 0) \sim \alpha^{-3/2}, \quad \operatorname{Im} I_3^6(\omega,\ 0) \sim \gamma\omega\alpha^{-5/2}. \tag{24}$$

Это вклад области I, где проявляются чисто одномерные свойства дефекта. Область II для $1D$ S-дефектов дает следующий результат:

$$I_4^S(\omega,\ 0) = \left(\frac{1}{8\pi}\right)\delta^{-3/2}\left[\alpha^{-1/2}\ln\left(\frac{\sqrt{\delta k_m^2}}{\sqrt{\alpha+i\gamma\omega}+\sqrt{\alpha}}\right)+(\alpha+i\gamma\omega)^{-1/2}\right],$$

откуда в асимптотике малых частот

$$I_4^S(0,\ 0) \sim \alpha^{-1/2}\left(1+\ln\sqrt{\delta k_m^2/4\alpha}\right),$$

$$\operatorname{Im} I_4^S \sim \gamma\omega\alpha^{-3/2}. \tag{26}$$

В асимптотике высоких частот $\gamma\omega \gg \alpha$

$$\operatorname{Re} I_4^S(\omega,\ 0) \sim \alpha^{-1/2} \ln \sqrt{\delta k_m^2/\gamma\omega},$$
$$\operatorname{Im} I_4^S \sim \alpha^{-1/2}. \tag{27}$$

Здесь k_m — параметр, определяющий максимальное значение k для квадратичного спектра.

Аналогично для $1D$ P-дефектов в области I имеем

$$I_3^P(\omega,\ 0) = \frac{1}{4} \delta^{-3/2} \alpha^{-1/2} (\alpha + i\gamma\omega)^{-1/2} \left(\sqrt{\alpha + i\gamma\omega} + \sqrt{\alpha}\right)^{-1}. \tag{28}$$

Видно, что, хотя этот общий результат и отличается от (23), тем не менее низкочастотные аномалии совпадают с (24). Такое же совпадение имеет место и для области II, т. е. здесь справедлива асимптотика (26), (27).

3. Таким образом, имеется достаточно большое количество вкладов даже всего от двух типов (S и P) дефектов различной размерности, дающих большой спектр температурных аномалий вблизи T_c. Учитывая значения n и m, приведенные выше, и результаты (13)—(28), можно указать, какие дефекты дают температурную особенность, близкую к экспериментальной. Это, во-первых, $3DS$ (13), (14). Для $2D$ множитель $\ln^2 \alpha$ в знаменателе несколько уменьшает особенность, поэтому здесь подходящим кандидатом является $2DS$, причем лучше в области II (20). $2DP$, как и $3DP$, дают более слабую особенность. Интересно, что $1DS$- и P-дефекты дают одинаковую аномалию. Это связано с наличием множителей α и k_z^2 в (10) и (11), уменьшение Θ при малых $\mathbf{k}$ приводит к ослаблению особенности. Физически это обусловлено тем, что мы считаем $\eta_0=0$ (неполяризованные дефекты). Чтобы обеспечить это условие, необходимо, чтобы для S-дефектов η_c на разных дефектах имело, например, переменные знаки ($\pm$); для P-дефектов разные знаки имеют место уже на одном дефекте, что и приводит в среднем к одинаковому результату.

Из (24) видно, что аномалия $1D$ совпадает с $3DS$, причем, как видно из (23) и (12), совпадение температурных особенностей имеет место не только в области малых, но и больших частот. Остается только разной общая частотная зависимость. При этом из (17) и (18) видно, что $2D$ случай является наиболее сильным в смысле появления температурной аномалии. Следует подчеркнуть (в плане сравнения с экспериментом), что, как уже отмечалось в [11], указанные значения n и m не удается получить для всей температурной области, где проводились экспериментальные измерения. Можно предположить, что это является проявлением свойств размерности дефектов (области I—III) при различной степени близости к T_c.

Для поляризованных дефектов, когда $\bar{\eta}_0 \neq 0$, имеет место размытие особенностей [12], при этом во всех формулах α нужно заменить на $\bar{\alpha}=\alpha+(1/2)\,\bar{\eta}_c^2$, откуда $\bar{\alpha}\ (T=T_c)=(\beta/2)\ (6\bar{f}/\beta)^{2/3}$, $\bar{\eta}_0\ (T=T_c)=(6\bar{f}/\beta)^{1/3}$, а $\bar{f}=4\pi n\ (d\delta\,\eta_c)$.

Рассмотрим теперь вопрос об условиях применимости линейного приближения. Имеем две поправки первого порядка по β: чисто флуктуационную «петлю» βG ($\tau=0$, $\mathbf{r}=0$) и примесную $\sim\beta\bar{\eta}_0^2$, они обе дают поправки к α. Условие малости первой хорошо известно и определяется числом Гинзбурга Gi [19]. Для нас важно второе условие $\beta\bar{\eta}_0^2/\alpha \ll 1$, оно существенно зависит от размерности дефекта. Для $3DS$, интегрируя (3), получаем

$$\overline{\eta_0^2} = 2\pi n_3 d^2 r_c \left(\frac{\eta_c}{\eta_a}\right)^2 \left(\frac{T_a}{\delta d}\right), \tag{29}$$

где для удобства сравнений введены параметры $T_a=\delta^2/\beta d$ и $\eta_a^2=\delta/\beta d^2$, имеющие смысл величин порядка атомных. Тогда условие малости поправки имеет вид

$$(n_3 r_c^3)\,(\eta_c/\eta_a)^2 \ll 1. \tag{30}$$

Считается [12–14], что $n_3 r_c^3 \ll 1$. Это связано с тем, что при $n_3 r_c^3 = 1$ среднее расстояние между дефектами $r_0 \sim r_c$ и они могут испытывать сильное взаимное влияние, так что, если дефекты не слишком «жесткие», в системе дефектов могут иметь место коллективные эффекты, т. е. рассматриваемая модель может оказаться неадекватной. Поэтому для максимальной концентрации остается простое требование, достаточно хорошо выполняемое: $(\eta_c/\eta_a)^2 \ll 1$. Для $3DP$ условие оказывается даже еще менее ограничительным. Из (4) среднеквадратичная флуктуация статической неоднородности получается $\sim (d/r_c)\,\overline{\eta_0^2}$, откуда критерий малости содержит в левой части лишний по сравнению с предыдущим малый параметр $(d/r_c) < 1$

$$(n_3 r_c^3)(d/r_c)(\eta_c/\eta_a)^2 \ll 1. \tag{31}$$

Однако для дефектов низших размерностей ограничение оказывается довольно жестким. Так, для $2DS$ из (6) имеем для КФ в координатном представлении

$$\Theta_S(\rho) = \overline{\eta_0^2}\,(\rho/r_c)\,\mathscr{K}_1(\rho/r_c). \tag{32}$$

Здесь уже статическая среднеквадратичная флуктуация неоднородности имеет вид

$$\overline{\eta_0^2} = \pi n_2 \eta_c^2 r_c^2/\ln^2(r_c/d), \tag{33}$$

откуда критерий малости записывается как

$$(n_2 r_c^2)(\eta_c/\eta_a)^2\,[(r_c/d)/\ln(r_c/d)]^2 \ll 1. \tag{34}$$

Наличие большого параметра $[(r_c/d)/\ln(r_c/d)]^2$ налагает сильные ограничения на n_2 и η_c, так что (34) может выполняться лишь для достаточно «слабых» дефектов. Расчет для $1D$ дефектов дает

$$(n_1 r_c)(r_c/d)^2(\eta_c/\eta_a)^2 \ll 1. \tag{35}$$

Эти довольно жесткие условия являются, очевидно, отражением того факта, что для низших размерностей возрастает роль взаимодействия флуктуаций и нелинейных эффектов вследствие уменьшения фазового объема. В этой связи интересно посмотреть, в какой степени точный учет нелинейности при вычислении $\eta_0(z)$ может изменить температурную аномалию вклада. В $1D$ уравнение $\alpha\eta_0 - \delta\eta_0'' + \beta\eta_0^3 = 0$ имеет точное решение

$$\eta_0(z) = b\eta_c e^{-a|z|}\left(1 - ce^{-2a|z|}\right)^{-1}, \tag{36}$$

где

$$a = \sqrt{\alpha/\delta} = r_c^{-1},$$

$$b = 2\sqrt{\alpha}\left(\sqrt{\alpha + \frac{\beta}{2}\eta_c^2} + \sqrt{\alpha}\right)^{-1},$$

$$c = \frac{\beta}{2}\eta_c^2\left(\sqrt{\alpha + \frac{\beta}{2}\eta_c^2} + \sqrt{\alpha}\right)^{-2}.$$

Это частный случай решения нелинейного уравнения, взятого на сепаратрисе, для S-дефекта. Находя $\Theta(k_z)$ и подставляя в (1), поправку, например, к скорости звука $\Sigma(0, 0)$ можно выразить через интеграл

$$\Sigma(0,\ 0) = \frac{1}{2}(b\eta_c)^2\,\delta^{1/2}\alpha^{-3/2}\int\limits_0^\infty \frac{dx}{e^x - ce^{-x}}\int\limits_0^\infty \frac{dy}{e^y - ce^{-y}}\left[e^{-(x+y)} + e^{-|x-y|}\right]. \tag{37}$$

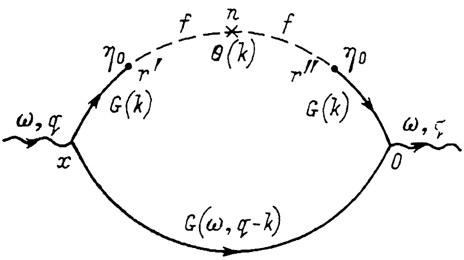
При $\beta = 0$, $c = 0$ и $b = 1$ имеем старый результат (24), а при $\beta \neq 0$ и $\alpha \to 0$, $c \to 1$, $b^2 \sim \alpha$ интеграл в (37) имеет порядок $\ln^2(1-c) \sim \ln^2\alpha$ и, таким образом, вместо особенности $\alpha^{-3/2}$ имеем более слабую $\alpha^{-1/2}\ln^2\alpha$. Естественно, что этот результат нельзя считать точным, поскольку нелинейность была учтена точно лишь в Θ, а G осталась в линейном приближении. Результат лишь указывает на тенденцию к уменьшению особенности при точном учете β; тогда как члены разложения в ряды по β имеют обычно более сильную особенность.

В заключение отметим, что полученные результаты, определяемые петлевой диаграммой для различных типов дефектов, применимы и к другим физическим величинам. В частности, аномальная часть теплоемкости записывается в виде [19]

$$C = T^2 (\partial\alpha/\partial T)^2 \sum_{\nu} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} G^2(\mathbf{k},\ \omega_\nu),$$

поэтому имеет ту же особенность, что и $\Delta v \sim \Sigma(0,\ 0)$.

Интенсивность рассеянного света дается Фурье-компонентой парной КФ флуктуаций диэлектрической проницаемости ε' [22]. В симметричной фазе $\varepsilon' \sim \eta^2$, так что флуктуационный вклад $\sim \langle \eta^2(x)\ \eta^2 \rangle$ и выражается через двухчастичную гриновскую функцию, изображаемую также петлевой диаграммой (см. рисунок).



Структура простейшей примесной диаграммы.

Список литературы

[1] Eibl O., Hoenig H. E., Triscone J. M. et al. // Physica C. 1990. V. 172. N 3/4. P. 373.
[2] Pande C. S., Singh A. K., Toth L. et al. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 10. P. 5669—5671.
[3] Кошелев А. Е. // ЖЭТФ. 1987. Т. 95. № 2. С. 662—667.
[4] Леманов В. В., Шерман А. Б., Андрианов Г. О., Эргошев И. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 7. С. 2161—2164.
[5] Изюмов Ю. А., Плакида Н. М., Скрябин Ю. Н. // УФН. 1989. Т. 159. № 4. С. 621.
[6] Böni P., Axe J. D., Shirane G. et al. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 1. P. 185—194.
[7] Suzuki T., Fujita T. // Physica C. 1989. V. 159. N 1. P. 111—116.
[8] Boolchand P., Enzweiler R. N., Zitkovsky I. et al. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 7.
[9] Bourne L. C., Zettl A., Chang K. J. et al. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 16. P. 8785—8787.
[10] Щедрина Н. В., Щедрин М. И. // Изв. вузов, физика. 1989. Т. 32. № 1. С. 70—74.
[11] Щедрин М. И., Щедрина Н. В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 139—145.
[12] Лебедев Н. И., Леванюк А. П., Сигов А. С. // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. № 4. С. 1429—1436.
[13] Levanyuk A. P., Sigov A. A. Defects and Structural Phase Transitions. N. Y.: Gordon and Breach, 1987. 208 p.
[14] Брус А., Каули Р. Структурные фазовые переходы. М., 1984. 408 с.
[15] Щедрин М. И. // Изв. вузов, физика. 1989. Т. 32. № 3. С. 29—33.
[16] Щедрин М. И. // Изв. вузов, физика. 1989. Т. 32. № 5. С. 39—44.
[17] Щедрина Н. В., Щедрин М. И. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 5. С. 1479—1487.
[18] Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., 1962. 443 с.
[19] Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М., 1982. 382 с.
[20] Кишинец Ю. М., Леванюк А. П., Морозов А. И., Сигов А. С. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 2. С. 601—603, 604—605.
[21] Щедрина Н. В. // Изв. вузов, физика. 1978. № 10. С. 60—65.
[22] Ginzburg V. L., Levanjuk A. P., Sobyanin A. A. // Phys. Reports. 1980. V. 57. N 3.

Нижегородский институт инженеров водного транспорта

Поступило в Редакцию
15 апреля 1991 г.
В окончательной редакции
25 сентября 1991 г.