

## ЭФФЕКТЫ КВАНТОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ В МОДЕЛИ СТРУКТУРНОГО СТЕКЛА

С.Е.Красавин

Исследуются фазовые переходы в модели структурно-неустойчивых твердых растворов типа смещения с конкурирующими ферро- и антиферродисторсионными взаимодействиями при учете квантовых флуктуаций. Показана возможность появления фазы типа спинового стекла.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

### Quantum Fluctuation Effects in the Model of Structure Glass

S.E.Krasavin

Phase transitions in the model of displacement-type structurally-unstable solid solutions with competing ferro- and antiferrodistorptive interactions are investigated taking into account quantum fluctuations. The possibility of appearance of spin glass-like phase is shown.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

### 1. В в е д е н и е

В последнее время все большее внимание в области физики конденсированных сред уделяют структурным стеклам, которые являются диэлектрическими аналогами спиновых стекол в магнитных системах. Структурным стеклом называют стеклоподобное состояние, возникающее в структурно-неустойчивых системах. Твердые растворы, по-видимому, являются наиболее перспективными для экспериментального изучения системами, так как их можно получать при выращивании без дефектов, которые сильно влияют на картину фазового перехода<sup>1/</sup>. Наиболее изучены в настоящее время смеси сегнетоэлектрика  $RbH_2PO_4$  (RDP) и анти-сегнетоэлектрика  $NH_4H_2PO_4$  (ADP), которые являются аналогами концентрированных спиновых стекол с конкурирующими взаимодействиями. Для этих систем имеется большой экспериментальный материал, а также построена модель термодинамических и динамических свойств системы. Исследования показывают, что при концентрации  $X$  в интервале от 0,2 до 0,8 эти смешанные кристаллы имеют характерное стеклоподобное поведение, обусловленное разупорядочением протонов. При этом, как было показано

в работах<sup>/2,3/</sup>, важную роль играют квантовые флуктуации, так как переход в фазу стекла происходит при низких температурах. Данная структура относится к классу систем, испытывающих структурный фазовый переход типа порядок — беспорядок<sup>/4/</sup>.

Другим классом систем, испытывающих структурный фазовый переход, являются системы типа смещения. Примером может служить твердый раствор  $Sr_{1-x}Pb_xTiO_3$ , состоящий из сегнетоэлектрической компоненты  $PbTiO_3$  и антисегнетоэлектрической компоненты  $SrTiO_3$ . Как показывают исследования<sup>/5/</sup>, фазовая диаграмма в этом твердом растворе содержит область сегнетоэлектрической и антисегнетоэлектрической фаз и, возможно, фазу стекла. Стеклоподобное поведение в системах, претерпевающих структурный фазовый переход типа смещения, исследовалось теоретически в работе<sup>/6/</sup>. Однако это исследование было проведено в классическом пределе. В настоящей работе рассматривается модель твердого раствора типа смещения с конкурирующими взаимодействиями при учете квантовых флуктуаций.

## 2. Модель

Рассмотрим модельный гамильтониан:

$$H = \sum_n \left( \frac{P_n^2}{2m_n} - \frac{A_n}{2} x_n^2 + \frac{B_n}{4} x_n^4 \right) + \frac{1}{4} \sum_{nn'} \Phi_{nn'} (x_n - x_{n'})^2, \quad (1)$$

где  $x_n$  — локальная нормальная координата, описывающая смещение атомов  $n$ -й элементарной ячейки,  $P_n$  — соответствующий локальной нормальной координате импульс,  $\Phi_{nn'}$  — силовая константа, описывающая взаимодействие  $n$ -й и  $n'$ -й ячеек. Введем параметр квантовости  $\lambda = \hbar \omega_0 / 4V_0$ , где  $\omega_0 = \sqrt{A/m}$  — частота нулевых колебаний,  $V_0 = A^2 / 4B$  — глубина эффективного одночастичного потенциала ( $A, B$  — параметры ямы).

Фазовый переход в модели, то есть появление при некоторой температуре  $T_c$  отличного от нуля среднего смещения  $\eta_n = \langle x_n \rangle \neq 0$ , возможен, если  $\lambda < \lambda_c$ , где  $\lambda_c$  — критическое значение параметра квантовости. Представим локальные нормальные координаты в виде

$$x_n = u_n(t) + \eta_n,$$

где  $\eta_n$  — статические смещения,  $u_n(t)$  — флуктуационные смещения вблизи положения равновесия.

Выполняя термодинамическое усреднение уравнения движе-

ния  $\frac{d}{dt} \langle P_n(t) \rangle = 0$ , получаем

$$(-A_n + 3B_n \langle u_n^2 \rangle + \Phi_{0n}) \eta_n + B_n \eta_n^3 = \sum_{nn'} \Phi_{nn'} \eta_{n'} \quad (2)$$

где  $\Phi_{0n} = \sum_k \Phi_{nk}$ . Мы отбросили ангармонические члены высокого порядка.

По аналогии со спиновыми стеклами [7] введем следующие два параметра порядка для описания фазы структурного стекла:  $\bar{\eta}_n$  и  $\bar{\eta}_n^2$ . Черта сверху означает конфигурационное усреднение, которое выполняется в приближении виртуального кристалла. Из уравнения (2) имеем

$$(-\bar{A}_n + 3\bar{B}_n \langle \bar{u}_n^2 \rangle + \bar{\Phi}_{0n}) \bar{\eta}_n = \sum_{nn'} \bar{\Phi}_{nn'} \bar{\eta}_{n'} \quad (3)$$

здесь выполнено конфигурационное усреднение и отброшены ангармонические члены. В парафазе  $\bar{\eta}_n = 0$ , и, соответственно, в ферро- и антиферрофазе  $\bar{\eta}_n \sim \cos q_0 R_n$ . Если  $\Phi_{q_0}$  имеет максимум при  $q = 0$  (положительное взаимодействие), то происходит переход парафаза — феррофаза. При  $q = q_{BZ}$  максимум  $\Phi_{q_0}$  определяет переход парафаза — антиферрофаза (отрицательное взаимодействие). Запишем фурье-преобразование уравнения (3):

$$3\bar{B}_n \langle \bar{u}_n^2 \rangle = \bar{A}_n + \bar{\Phi}_{q_0} - \bar{\Phi}_{q=0} \quad (4)$$

Средний квадрат флуктуаций определяется из флуктуационно-диссипационной теоремы:

$$\langle \bar{u}_n^2 \rangle = \frac{1}{2\bar{m}_n N} \sum_q \frac{1}{\omega_q} \text{cth} \frac{\omega_q}{2T}$$

Используя уравнение (3), с учетом выбранных параметров порядка получаем выражение для фазы стекла:

$$3\bar{B}_n^2 \langle \bar{u}_n^2 \rangle = \overline{B_n (A_n - \Phi_{0n})^2} + \{ \overline{B_n (A_n - \Phi_{0n})^2} + \overline{B_n^2 [\Phi_{2n}^2 - (\Phi_{0n} - A_n)^2]} \}^{1/2} \quad (5)$$

где  $\Phi_{2n}^2 = \sum_k \Phi_{nk}^2$ .

Фоновая частота, соответствующая мягкой моде, определяется уравнением

$$\bar{m}_n \omega_q^2 = -\bar{A}_n + 3\bar{B}_n (\langle \bar{u}_n^2 \rangle + \bar{\eta}_n^2) + \bar{\Phi}_{q=0} - \bar{\Phi}_{q_0} \quad (6)$$

Система уравнений (4)-(6) определяет температуру перехода к соответствующей фазе при  $q_0$ , а также температуру перехода к фазе стекла  $T_g$ .

Введем следующие безразмерные параметры:

$$\bar{\Omega}_{q_0}^2 = \frac{\omega_{q_0}^2}{A_n/m_n}; \quad \theta = \frac{T}{A_n^2/B_n}; \quad \bar{f}_{q_0} = \frac{\bar{\Phi}_{q_0}}{A_n}. \quad (7)$$

Используя систему уравнений (4)-(6), с учетом (7) получаем параметрические уравнения для определения критической температуры  $T$  в интегральной форме:

$$\int_0^1 \Omega \operatorname{cth} \frac{\lambda \Omega}{2\theta} \sqrt{(1-p)^2 - 1,2p(1-p)} = \frac{0,2\sqrt{(1-p)^2 - 1,2p(1-p)}}{\lambda}, \quad (8)$$

$$\int_0^1 \Omega \operatorname{cth} \frac{\lambda \Omega}{2\theta} \sqrt{1,2p^2 - 1,2p(1-p)} = \frac{0,2\sqrt{1,2p^2 - 1,2p(1-p)}}{\lambda} \times \quad (9)$$

$$\times (1 + 2,4p^2 - 1,2p),$$

$$\int_0^1 \Omega \operatorname{cth} \frac{\lambda \Omega}{2\theta} \sqrt{(1-p)^2 - 1,2p(1-p) + 1,2p^2} = 0,2\sqrt{(1-p)^2 - 1,2p(1-p) + 1,2p^2} \times \quad (10)$$

$$\times \{-0,1 + 3,52p - 3,74p^2 + \sqrt{1,21 - 4,84p + 13,9p^2 + 10,11p^4}\} / \lambda.$$

Уравнения (8)-(10) описывают переходы парафаза — феррофаза, парафаза — антиферрофаза, парафаза — фаза структурного стекла соответственно.

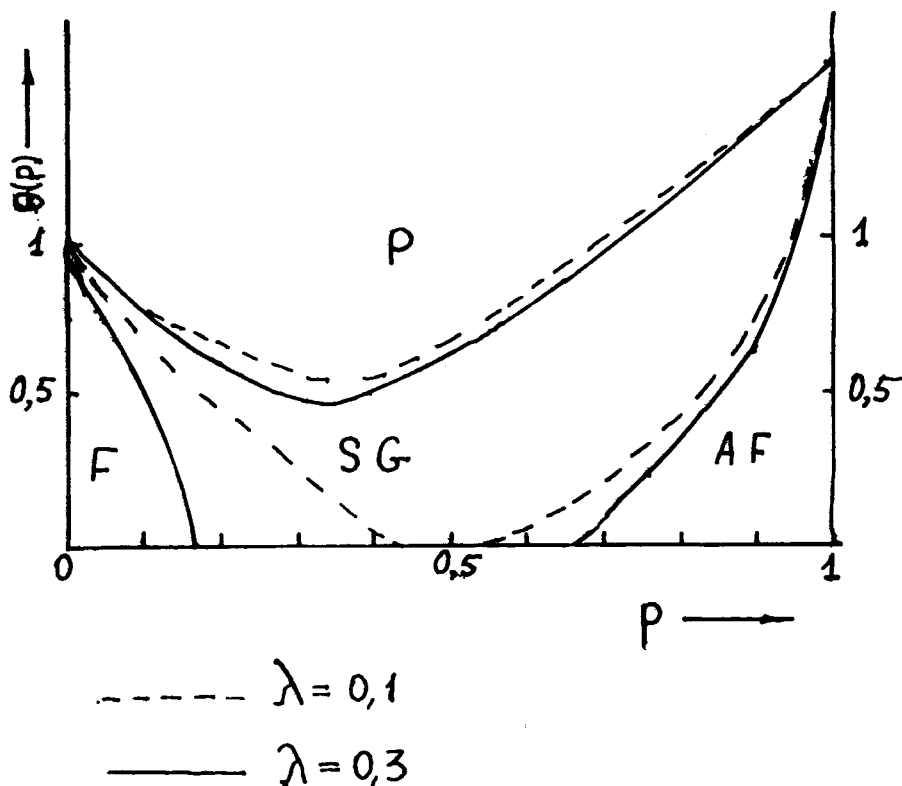
### 3. Фазовый переход в модели

В приближении виртуального кристалла силовые константы и массы описываются выражениями

$$\bar{\Phi}_{nn'} = (1-p)^2 \Phi_{nn'}^{AA} + 2p(1-p) \Phi_{nn'}^{AB} + p^2 \Phi_{nn'}^{BB}, \quad (11)$$

$$\bar{m}_n = (1-p)m_A + pm_B.$$

Здесь компонента А твердого раствора испытывает ферродисторсионный переход ( $\max \Phi_q^{AA} = \Phi_{q=0}^{AA} = \Phi_0^{AA}$ ), компонента В — анти-



ферродисторсионный  $\Phi_q^{VV} = \Phi_{q=q_{BZ}}^{VV}$ . Для численных расчетов были выбраны следующие соотношения между параметрами:

$$A_B = -0,2A_A; \quad B_B = B_A; \quad m_B = m_A; \quad \frac{\Phi_{AA}}{A_A} = 1,1;$$

$$\Phi^{AB} = -0,6\Phi^{AA}; \quad \Phi^{BB} = -1,2\Phi^{AA}.$$

На рисунке показана зависимость температуры перехода  $\theta$  в соответствующую фазу от концентрации  $p$  при значениях параметра квантовости  $\lambda = 0,1$ ,  $\lambda = 0,3$ .

#### 4. Заключение

Как видно из диаграммы (см. рисунок), квантовые флуктуации больше подавляют дальний порядок, чем ближний, причем вклад их при переходе парафаза — феррофаза заметен больше, чем при переходе в другие фазы. С увеличением вклада этих флуктуаций, как показано на рисунке, увеличивается область перехода в фазу стекла. В целом можно заметить, что с ростом вклада

этих эффектов температура перехода в соответствующую фазу уменьшается.

Анализ структурного фазового перехода в классическом случае (без учета квантовых флуктуаций) рассматривается в теоретической работе /6/. При сравнении диаграммы в классическом приближении с полученной нами фазовой диаграммой можно заметить, что в квантовом случае расширяется область перехода в фазу стекла. Это говорит о том, что квантовые эффекты вносят дополнительный вклад в образование системы с ближним порядком.

Таким образом, как показывает проведенное рассмотрение, учет квантовых флуктуаций заметно влияет на фазовые переходы в модели структурного стекла. Представляет интерес экспериментальное изучение этого влияния, например в случае твердого раствора (Sr, Pb) TiO<sub>0</sub>.

В заключение автор благодарит В.Л.Аксенова за постановку задачи и руководство данной работой.

#### Л и т е р а т у р а

1. Gourtens E. — *Helv.Phys.Acta*, 1983, vol.56, p.705.
2. Pirc R., Tadic B., Blinc R. — *Z. Phys. B*, 1985, vol.61, p.69.
3. Aksenov V.L., Bobeth M., Plakida N.M. — *Ferroelectrics*, 1987, vol.72, NN 1, 2, 3, 4, p. 257.
4. Брус А., Каули Р. Структурные фазовые переходы. М.: Мир, 1984.
5. Fischer E. JINR Preprint E8-86-236, Dubna, 1986.
6. Aksenov V.L., Bobeth M. — *Phys.stat. sol (b)*, 1985, v.128, No.2, p.105.
7. Sherrington D. — *J. Phys. C*, 1975, vol. 8, p. L208.

Рукопись поступила в издательский отдел  
26 июля 1988 года.