

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



20/4-77

P17 - 10496

A-424

2309/2-77

В.Л.Аксенов, Н.М.Плакида

ФЛЮКТУАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

В МОДЕЛИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА ТИПА СМЕЩЕНИЯ

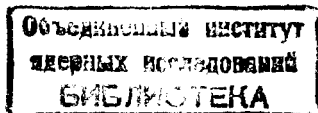
1977

P17 - 10496

В.Л.Аксенов, Н.М.Плакида

**ФЛЮКТУАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ
В МОДЕЛИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА ТИПА СМЕЩЕНИЯ**

Направлено в ТМФ



P17 - 10496

Аксенов В.Л., Плакида Н.М.

Флюктуационные эффекты в модели сегнетоэлектрика типа смещения

Методом самосогласованного фононного поля исследуется фазовый переход в модели сегнетоэлектрика типа смещения. Показано, что нулевое приближение метода учитывает флюктуации параметра порядка и эквивалентно ренормированному разложению свободной энергии Ландау. Предложена итерационная процедура, последовательно учитывающая главные члены второго порядка теории.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Aksienov V.L., Plakida N.M.

P17 - 10496

Fluctuation Effects in the Model of Displacive Ferroelectrics

The phase transition in the model of displacive ferroelectrics is investigated on the basis of the self-consistent phonon field (SCP) method. The fluctuations of the order parameter are taken into account in the zero order approximation that results in the renormalization of the phenomenological Landau expansion for the free energy. The iteration procedure is proposed to consider the leading second order terms in the SCP theory.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

В последнее время в ряде работ ^{/1-3/} обсуждался вопрос о применимости теории самосогласованного фононного поля (СФП), развитой ранее при описании динамики решетки, к исследованию фазового перехода (ФП) в простой модели сегнетоэлектрика типа смещения. В работах ^{/1/} исследовался первый порядок теории СФП-приближение самосогласованных фононов (SCI -приближение). Основным выводом этого исследования состоит в том, что SCI -приближение дает разумное описание структурного перехода типа смещения, которое тем лучше, чем больше радиус взаимодействия. С другой стороны, в работах ^{/2/} на основе диаграммного разложения по константе ангармонического взаимодействия были вычислены поправки второго порядка к теории Ландау - приближению молекулярного поля (ПМП). Пользуясь итерационной процедурой вычислений, эквивалентной известному в теории СФП улучшенному самосогласованному приближению (ISC -приближение), автор пришел к выводу о неприменимости теории СФП для исследования температурного поведения параметра порядка в данной модели.

Ранее нами ^{/4/} обсуждался вопрос о точности вычислений в теории СФП при исследовании устойчивости ангармонических кристаллов с простой решеткой. Было показано, что ISC -приближение приводит к ложной мягкой моде, в то время как более последовательная итерационная процедура с учетом главных членов второго порядка (RSC2 -приближение) позволяет получить разумные физические результаты. Поскольку проблема динамической устойчивости ангармонических кристаллов имеет много общего с теорией структурных ФП, представляет

определенный интерес рассмотреть предложенное нами приближение (RSC2) и в этой теории и еще раз обсудить область применимости метода СФП.

В настоящей работе рассмотрена простая модель ФП типа смещения^{/1/} на основе общего подхода, развитого в работе^{/5/}.

В разделе 2 вычисляется свободная энергия и получена самосогласованная система уравнений для описания модели во втором порядке теории СФП (SC2 - приближение), а также рассмотрены различные варианты этого приближения.

В разделе 3 выясняется роль флуктуаций параметра порядка. Показано, что SC1-приближение, как нулевое приближение метода СФП, учитывает флуктуации параметра порядка в отличие от обычной теории возмущений^{/2,6/}, приводит к ФП первого рода без расходимостей в коэффициентах разложения Ландау свободной энергии. При увеличении радиуса взаимодействия полученные результаты переходят в результаты обычной теории возмущений. В частности, при бесконечном радиусе взаимодействия ФП первого рода в методе СФП становится переходом второго рода в ПМП (полное подавление флуктуаций).

В разделе 4 рассмотрены результаты численного решения самосогласованной системы уравнений в различных приближениях метода СФП. С физической точки зрения наиболее последовательным оказывается RSC2 - приближение. Параметры модели полуэмпирически оцениваются для кристаллов BaTiO₃ и SrTiO₃.

1. САМОСОГЛАСОВАННАЯ СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ

Наиболее простая модель сегнетоэлектрика типа смещения, в которой рассматривается движение лишь активных атомов, ответственных за фазовый переход, в статическом поле остальных атомов решетки описывается гамильтонианом^{/1/}.

$$H = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{A}{2} (f_0 - 1) s_i^2 + \frac{B}{4} s_i^4 \right] - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij} s_i s_j, \quad (1)$$

где параметры A и B определяют одночастичный потенциал, создаваемый статическим окружением, а взаимодействие активных атомов описывается гармонической силовой постоянной ϕ_{ij} , при этом $f_0 = \sum_j \phi_{ij} / A$ играет роль безразмерного параметра связи: $f_0 > 1$ для перехода типа смещения^{/1/}. Как обычно, в данной модели рассматриваются смещения атомов s_i относительно центра ячейки x_i^0 вдоль одной из осей кристалла, но взаимодействие ϕ_{ij} связывает атомы в трехмерной решетке.

Далее удобно ввести статические смещения атомов $b_i = \langle s_i \rangle$ в одно из возможных положений равновесия ниже температуры перехода и зависящие от времени t динамические смещения $u_j(t) = s_j(t) - b_j$. Рассматривая однодоменный кристалл, будем полагать $b_i = b$.

Для вычисления свободной энергии введем в гамильтониан (1) формальный параметр связи λ :

$$H = H_0 + H_1(\lambda), \quad (2)$$

$$H_0 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \Phi_{ij}^0 u_i u_j + N \left(-\frac{A}{2} b^2 + \frac{B}{4} b^4 \right), \quad (2a)$$

$$H_1(\lambda) = \sum_i \left[-\frac{A}{2} (1 - f_0) + \frac{3}{2} B b^2 \lambda^2 u_i^2 - \frac{\lambda^2}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij} u_i u_j + \sum_i B (b^3 \lambda u_i + b \lambda^3 u_i^3 + \frac{\lambda^4}{4} u_i^4) - \frac{\lambda^2}{2} \sum_{ij} \Phi_{ij}^0 u_i u_j \right], \quad (2b)$$

где H_0 - пробный гамильтониан, матрица силовых постоянных которого Φ_{ij}^0 определяет пробные гармонические фононы.

Следуя процедуре вычисления свободной энергии, изложенной в^{/5/}, получаем в первом порядке теории СФП

$$\Phi_{ij}^0 = [-A(1 - f_0) + 3B(b^2 + \langle u_i^2 \rangle)] \delta_{ij} - \phi_{ij} \quad (3)$$

и выражение для свободной энергии $F_1 =$

$$= -T \ln \text{Sp} \exp\left(-\frac{H_0}{T}\right) + \langle H - H_0 \rangle_0 \quad \text{в виде}$$

$$f_1 = \frac{F_1}{N(A^2/B)} = -\frac{1}{2}\eta^2 + \frac{1}{4}\eta^4 + \frac{\theta}{N} \sum_q \ln \text{sh} \frac{\omega_q}{2T} - \frac{3}{4}y^2, \quad (4)$$

что удовлетворяет вариационному условию $\delta f_1 / \delta \Phi_{ij}^0 = 0$.

В (3) и (4) введены безразмерные величины:

$$\eta^2 = Bb^2/A, \quad y = B\langle u_i^2 \rangle / A, \quad \theta = T/(A^2/B).$$

Для безразмерной частоты фононов $\Omega_q^2 = m\omega_q^2/A$ согласно (3) получаем уравнение

$$\Omega_q^2 = \delta^2 + (f_0 - f_q), \quad (5)$$

где щель в спектре δ , обусловленная одночастичным потенциалом, имеет вид

$$\delta^2 = -1 + 3(\eta^2 + y) \quad (6)$$

и дисперсия фононной частоты определяется межатомным взаимодействием

$$f_q = \frac{1}{A} \sum_j \phi_{ij} e^{-iq(\bar{x}_i^0 - \bar{x}_j^0)}, \quad f_0 = f_{-q} = 0. \quad (7)$$

Корреляционные функции y определяются с помощью однофононных функций Грина согласно уравнению (1.22)* и в приближении высоких температур $T \gg T_D$ имеют вид

$$y = \frac{B}{A} \frac{1}{mA} \sum_q \frac{1}{2\omega_q} \text{cth} \frac{\omega_q}{2T} \approx \frac{\theta}{N} \sum_q \frac{1}{\Omega_q^2} = \frac{\theta}{N} \sum_q y_q. \quad (8)$$

Равновесные положения атомов η можно определить из условия равенства нулю средней силы $\partial/\partial t \langle p_i(t) \rangle = 0$ или, эквивалентно, из условия минимума для свободной энергии: $\partial F/\partial \eta = 0$. В результате получаем уравнение

$$\eta(-1 + \eta^2 + 3y) = 0, \quad (9)$$

*Здесь и далее (1.22) - формула (22) в работе /5/.

которое вместе с (4)-(8) образует замкнутую систему уравнений, описывающую поведение модели в SC1 - приближении.

При вычислении поправок второго порядка массовый оператор однофононной функции Грина (1.23) вычислим в высокотемпературном классическом пределе, когда для корреляционной функции y имеет место соотношение

$$y^{(2)} \approx \frac{BT}{NA^2} \sum_q \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} D_q^{(2)}(\omega + i\epsilon) \right] =$$

$$= \frac{\theta}{N} \sum_q \text{Re} D_q^{(2)}(0 + i\epsilon) = \frac{\theta}{N} \sum_q \frac{1}{\delta^2 + \delta_{q^2} + (f_0 - f_q)} \quad (10)$$

$$= \frac{\theta}{N} \sum_q y_q^{(2)},$$

где δ_q - действительная часть массового оператора

$$\delta_q = 2\Omega_q^{(2)} \text{Re} \Pi_q(\omega = 0) =$$

$$= -18b^2 \frac{\theta}{N} \sum_q y_q^{(2)} y_{q-q}^{(2)} - \frac{6\theta^2}{N} \sum_{q_1 q_2} y_{q_1}^{(2)} y_{q_2}^{(2)} y_{q_1+q_2}^{(2)} \quad (11)$$

В этом же приближении для поправки второго порядка к свободной энергии $\Delta_2 F$ (1.30) получаем выражение

$$\Delta_2 f = \frac{\Delta_2 F}{N(A^2/B)} = -\frac{6\theta}{N^2} \eta^2 \sum_{q_1 q_2} y_{q_1}^{(2)} y_{q_2}^{(2)} y_{q_1+q_2}^{(2)} -$$

$$- \frac{24\theta^3}{N^3} \sum_{q_1 q_2 q_3} y_{q_1}^{(2)} y_{q_2}^{(2)} y_{q_3}^{(2)} y_{q_1+q_2+q_3}^{(2)}. \quad (12)$$

Уравнение для параметра порядка в SC2-приближении получаем в виде

$$-Ab + B(b^3 + 3b \langle u_i^2 \rangle + \langle u_i^3 \rangle) = 0,$$

где корреляционную функцию $\langle u_i^3 \rangle$ определим в низшем приближении по кумулянтному разложению, как в (1.23), что приводит к уравнению

$$\eta(-1 + \eta^2 + 3y^{(2)} + y_1) = 0, \quad (13)$$

где

$$y_1 = -6 \frac{\theta^2}{N^2} \sum_{q_1 q_2} y_{q_1}^{(2)} y_{q_2}^{(2)} y_{q_1 + q_2}^{(2)}. \quad (14)$$

Система уравнений (10)-(14) описывает поведение модели в SC2-приближении.

При конкретных расчетах ввиду сложности решения самосогласованной системы уравнений обычно рассматривают лишь решение в SC1-приближении^{/1/}, а члены второго порядка учитывают по теории возмущений^{/2/}. Это улучшенное самосогласованное приближение (ISC) оказалось успешным при исследовании термодинамики сильно ангармонических кристаллов^{/7/}, но, как было показано нами^{/14/}, приводило к ложной мягкой моде при изучении устойчивости решетки простых кристаллов. Последнее обусловлено тем, что основное уравнение самосогласования для корреляционной функции y , определяющее температуру неустойчивости, в ISC-приближении решается лишь в первом порядке, как в (8), тогда как члены второго порядка в (10) дают сравнимый вклад и значительно меняют температуру неустойчивости. В связи с этим в^{/4/} было рассмотрено самосогласованное решение системы уравнений второго порядка с использованием итерационной процедуры при вычислении массового оператора. Это упрощенное приближение второго порядка (RSC2) для настоящей модели структурного перехода сводится к системе уравнений для корреляционной функции

$$y^{(2)} \approx \tilde{y} = \frac{\theta}{N} \sum_q \frac{1}{\tilde{\Omega}_0^2 + (f_0 - f_q)} \equiv \frac{\theta}{N} \sum_q \frac{1}{\tilde{\Omega}_q^2} \quad (15)$$

и щели в спектре фононов $\tilde{\Omega}_0$ с учетом членов второго порядка, вычисленных по фононным частотам первого порядка Ω_q , определенным в (5):

$$\tilde{\Omega}_0^2 = \delta^2 - 18\eta^2 \frac{\theta}{N} \sum_q \frac{1}{\Omega_q^4} - \frac{6\theta^2}{N^2} \sum_{q_1 q_2} \frac{1}{\Omega_{q_1}^2 \Omega_{q_2}^2 \Omega_{q_1 + q_2}^2}. \quad (16)$$

При этом δ^2 и η^2 определяются из уравнений

$$\delta^2 = 3(\eta^2 + \tilde{y}) - 1, \quad (17)$$

$$\eta^2 = 1 - 3\tilde{y} + \frac{6\theta^2}{N^2} \sum_{q_1 q_2} \frac{1}{\Omega_{q_1}^2 \Omega_{q_2}^2 \Omega_{q_1 + q_2}^2}. \quad (18)$$

В ISC-приближении система уравнений (17), (18) решается с помощью уравнения самосогласования (8), а не (15). Таким образом, система уравнений (15)-(18) очевидным образом полнее ISC-приближения. В то же время RSC2-приближение проще приближения SC2, поскольку уравнение (11) решается итерацией с помощью (16).

2. ФЛЮКТУАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

Взаимодействие между атомами (7) представим в модельном виде^{/1/}:

$$f_q = f_0 e^{-r_0^2 q^2}, \quad (19)$$

где параметр r_0 характеризует безразмерный радиус взаимодействия и определяет размер области дисперсионной зависимости фононного спектра. Переходя в (15) от суммы к интегралу по безразмерному \vec{q} :

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (...) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q (...),$$

и используя (19), получаем

$$\tilde{y} = \frac{\theta}{\tilde{\Omega}_0^2 + f_0} \left(1 + \frac{C_1(\Omega_0)}{r_0^3} \right), \quad (20)$$

где

$$c_1(\tilde{\Omega}_0) = \frac{1}{8\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f^k}{k^{3/2}} (\tilde{\Omega}_0^2 + f_0)^{-k+1}.$$

Рассмотрим разложение Ландау свободной энергии по параметру порядка η в данной модели: $f(\eta) = f_0 + \alpha\eta^2 + \frac{1}{2}\beta\eta^4$. В SC1-приближении, используя (4), получаем выражение для первого коэффициента:

$$\alpha(T) = \left(\frac{df_1}{d\eta^2} \right)_{\eta=0} = \frac{1}{2} (3y|_{\eta=0} - 1) = \frac{1}{2} \delta |_{\eta=0}, \quad (21)$$

где y определяется уравнением (8) и для взаимодействия (19) принимает вид (20) с $\tilde{\Omega}_0 = \delta$. Следовательно, в данной модели возможен структурный переход при некоторой температуре T_c , определяемой из уравнения $\alpha(T_c) = 0$ или $\delta(T_c) = 0$, которая с учетом (20) равна:

$$\theta_c = \frac{f_0}{3} \frac{1}{1 + c_1/r_0}, \quad (22)$$

где

$$c_1 = c_1(\tilde{\Omega}_0 = 0) = f_0 \zeta\left(\frac{3}{2}\right) / 8\pi^{3/2} \approx f_0 / 17.$$

Приближению молекулярного поля соответствует предел $r_0 \rightarrow \infty$, когда восприимчивость χ ниже (χ_-) и выше (χ_+) точки перехода имеет стандартный вид в теории Ландау:

$$\chi_-^{-1} = \delta_-^2 = 2\tau, \quad \chi_+^{-1} = \delta_+^2 = \tau, \quad (23)$$

$$\tau = \frac{\theta - \theta_c^{(0)}}{\theta_c^{(0)}}, \quad \theta_c^{(0)} = \frac{f_0}{3}.$$

Как видно, температура перехода (22) в SC1-приближении понижается по сравнению с ПМП.

Второй коэффициент разложения, учитывая неявную зависимость свободной энергии (4) от параметра порядка η в силу (8), получаем в виде

$$\beta(T) = \frac{d^2 f_1}{(d\eta^2)^2} \Big|_{\eta=0} = \frac{1}{2} \left[1 - 3 \frac{\frac{3\theta}{N} \sum_q \frac{1}{\Omega_q^4}}{1 + \frac{3\theta}{N} \sum_q \frac{1}{\Omega_q^4}} \right]. \quad (24)$$

Приближенное интегрирование при $\delta \rightarrow 0$ для суммы в (24) дает

$$\frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{\Omega_q^4} \approx \frac{1}{8\pi f_0^{3/2} r_0^3} \frac{1}{\delta} \approx \frac{1}{16\pi f_0^{3/2}} \frac{1}{r_0^3 \sqrt{\tau}}. \quad (25)$$

В ПМП $r_0 \rightarrow \infty$ и при $\tau \neq 0$ получаем $\beta^{(0)} = \frac{1}{2}$. При любом конечном r_0 учет флуктуаций приводит к расходящимся при $\tau \rightarrow 0$ вкладам (25) в коэффициент β (24), которые становятся существенными в корреляционной области температур $\tau < (r_0^2 f_0)^{-3}$, как и в модели Изинга /8/. Однако в методе СФП, как показано нами в общем виде в предыдущей работе /5/ (см. (1.37)), проводится суммирование расходящихся петлевых диаграмм для флуктуационной поправки и значение коэффициента (24) оказывается конечным: $\beta(\tau = 0) = -1$. Это суммирование, как и при вычислении модулей упругости в методе СФП /9/, обусловлено неявной зависимостью частот фононов Ω_q (5) от параметра порядка η (или деформации в /9/) через корреляционную функцию y в (6). Поскольку $\beta(\tau \rightarrow 0) < 0$, то фазовый переход в SC1-приближении (при конечном r_0) вследствие учета флуктуаций оказывается переходом первого рода.

Известно, что при размерности пространства $d > 5$ теория Ландау выполняется и в критической точке. Рассмотрим выражения (21), (24) в этом случае. Полу-

* В работах /2/ использовался более простой по сравнению с (19) дебаевский спектр фононов $f_q - f_0 \approx c_2 q^2$ и параметром разложения служила величина $\gamma \sim 1/c^2 q_D^2 \sim 1/\omega_D^2$, которая не отражает в явном виде зависимость от радиуса взаимодействия. Для спектра (19) параметр разложения $\gamma \sim 1/f_0 r_0^2$ может быть мал даже в случае узкой фононной зоны, $\omega_{\max} \sim f_0 \sim 1$, при большом радиусе взаимодействия, $r_0 \gg 1$. В последнем случае фазовый объем длинноволновых неустойчивых фононов мал по сравнению с полным числом фононных состояний и метод СФП хорошо описывает динамику решетки при $\tau \gg (f_0 r_0^2)^{-3}$.

чаем, что при $d \geq 5$ в SC1-приближении ФП II рода возможен лишь при условии

$$\left(\frac{2}{N} \sum_q \frac{1}{\Omega_q^4} \right) / \left(\frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{\Omega_q^2} \right) < 1. \quad (26)$$

В частности, при $d=5$ получаем условие ФП II рода в виде $\gamma_0 f_0 > 12$. Условие, аналогичное (26), было получено также в работе^{/3/}, где разложение Ландау на основе SC1-приближения проводилось при пренебрежении неявной зависимостью Ω_q от η (учет только первой петлевой диаграммы), когда в выражении (24) знаменатель равен единице.

Очевидно, что полученные здесь выводы являются результатом принятого приближения: учет членов второго порядка в спектре фононов (16) дает расходящиеся при $\tau \rightarrow 0$ члены. Поэтому выяснение рода ФП в методе СФП, как и в любой другой теории среднего поля, невозможно.

Однако SC1-приближение, эквивалентное ренормированному при учете флуктуаций феноменологическому разложению Ландау, может быть использовано для интерполяционного описания ФП. При этом члены второго порядка могут быть учтены с помощью некоторой итерационной процедуры, например RSC2.

3. ПРИБЛИЖЕНИЯ ВТОРОГО ПОРЯДКА СФП

Для сравнения приближений второго порядка метода СФП, введенных в разделе 1, рассмотрим численное решение самосогласованной системы уравнений. С целью упрощения расчетов и сравнения с результатами работ^{/2/} ограничимся дебаевским приближением для спектра фононов, полагая

$$q(\Omega^2) = \frac{1}{N} \sum_q \delta(\Omega_q^2 - \Omega^2) = \frac{3\Omega}{2\Omega_D^3}, \quad (27)$$

где будем считать в соответствии с (19) $\Omega_q^2 = f_0 \gamma_0^2 q^2$.

С использованием (27) интегрирование по импульсам фононов легко выполняется и для системы уравнений,

например, в RSC2-приближении (15)-(18) получаем

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}_0^2 = \delta^2 - \frac{27\eta^2\theta}{\Omega_D^4} \left[\frac{\Omega_D}{\delta} \arctg \frac{\Omega_D}{\delta} - \frac{1}{1 + \delta^2/\Omega_D^2} \right] - \\ - \frac{27\pi^2}{4} \frac{\theta^2}{\Omega_D^6} \ln \left(1 + 0,05 \frac{\Omega_D^2}{\delta^2} \right). \end{aligned} \quad (28)$$

При вычислении последнего слагаемого в (16), (28) мы воспользовались результатом работ^{/2/}.

Для параметров δ и η получаем уравнения

$$\delta^2 = 3\eta^2 - 1 + \frac{9\theta}{\Omega_D^2} \left[1 - \frac{\tilde{\Omega}_0}{\Omega_D} \arctg \frac{\Omega_D}{\tilde{\Omega}_0} \right], \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \eta^2 = 1 - \frac{9\theta}{\Omega_D^2} \left[1 - \frac{\tilde{\Omega}_0}{\Omega_D} \arctg \frac{\Omega_D}{\tilde{\Omega}_0} \right] + \\ + \frac{27\pi^2}{4} \frac{\theta^2}{\Omega_D^6} \ln \left(1 + 0,05 \frac{\Omega_D^2}{\delta^2} \right). \end{aligned} \quad (30)$$

В ISC-приближении самосогласованно решается лишь система уравнений (29), (30), где $\tilde{\Omega}_0^2 = \delta^2$, а уравнение (28) независимо определяет температурную зависимость щели в спектре фононов. В SC1-приближении система уравнений еще упрощается, так как последний член в (29) отсутствует, и сводится к одному уравнению в силу равенства $\tilde{\Omega}_0^2 = \delta^2 = 2\eta^2$.

На рис. 1 и 2 приведены результаты численных расчетов для температурного поведения щели в спектре фононов при двух значениях параметра $\Omega_D = 2$ и $\Omega_D = 10$ соответственно. (Температура приведена к температуре ФП в SC1-приближении, $t = \theta/\theta_c^{(SC1)}$). Как видно, последовательный учет главных членов второго порядка (линейных по $1/\gamma_0^3$) в RSC2-приближении приводит к достаточно сильной перенормировке пробных фононов, в результате чего ФП первого рода происходит

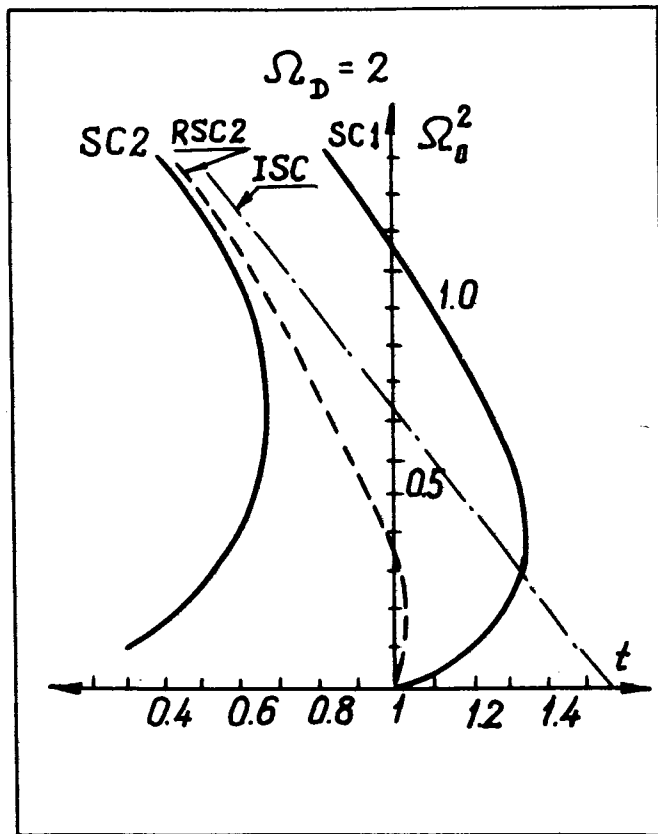


Рис. 1. Зависимость безразмерной щели в спектре фононов от температуры при $\Omega_D = 2$.

раньше, чем в SC1-приближении. В противоположность этому в ISC-приближении температура ФП второго рода больше, чем в нулевом для данного метода приближении.

При расчетах в SC2-приближении возникают расходящиеся при $\tau \rightarrow 0$ поправки, что приводит к значительному отклонению результатов этого приближения от SC1 и RSC2. SC2-приближение можно улучшить, если просуммировать соответствующие расходящиеся

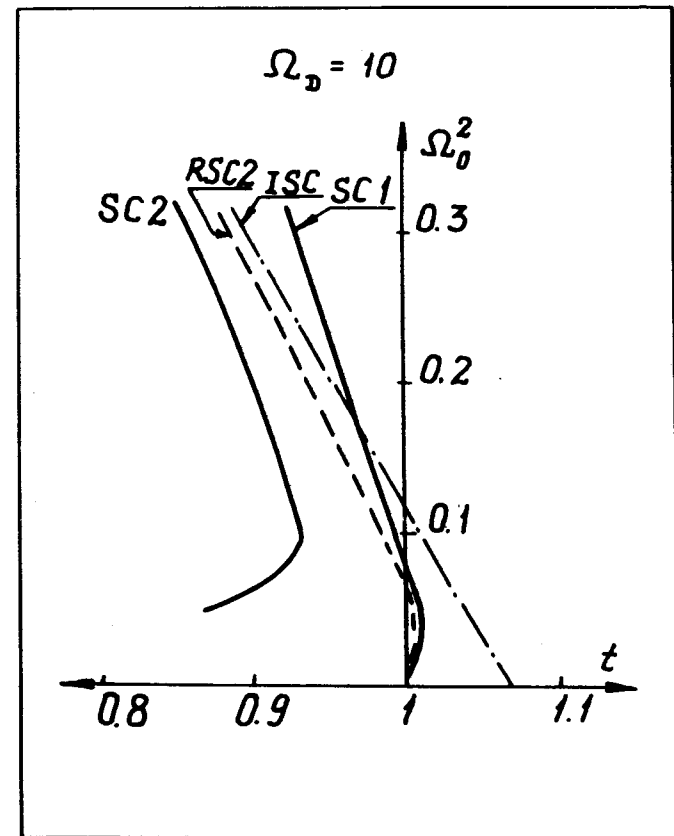


Рис. 2. Зависимость безразмерной щели в спектре фононов от температуры при $\Omega_D = 10$.

диаграммы более высоких порядков (аналогично (1.37)) или, эквивалентно, учесть перенормировку вершины ангармонического взаимодействия.

Используя результаты экспериментального изучения ФП в перовскитах, приведенные, например, в ^{16/}, можно сделать полуэмпирическую оценку параметров модели. Рассмотрим для примера ФП в центре зоны Бриллюэна в BaTiO_3 при 391°K и в SrTiO_3 при 37°K . Для частоты фононов в рассматриваемой модели

используем представление (5): $\omega_k^2 = \omega_0^2 + \frac{\phi_0}{m} R_0^2 k^2 = \omega_0^2 + s_1 k^2$. Полагая $R_0 = a'$ — постоянной решетки, получаем для BaTiO_3 $\phi_0 \approx 3 \text{ эВ \AA}^{-2}$ и для SrTiO_3 $\phi_0 \approx 5 \text{ эВ \AA}^{-2}$. Далее, используя соотношения (22) для температуры Кюри $T_c = \phi_0 A / 3B$ и постоянной Кюри-Вейса $C = \lambda m \phi_0 / 3B$ (λ — эффективный заряд ячейки), получаем для BaTiO_3 параметр $\Omega_D \approx 2$, а для SrTiO_3 — $\Omega_D \approx 7$. Таким образом, для BaTiO_3 область корреляционных эффектов достаточно велика и применение обычной теории возмущений, например относительно параметра $\gamma = 1/\Omega_D^{2/2}$, затруднительно. Для интерполяционного описания ФП в таком случае вполне может служить RSC2-приближение, которое является первым шагом итерационного решения самосогласованной системы уравнений во втором порядке теории и учитывает главный вклад взаимодействия флюктуаций. Для количественного же описания критической точки необходимо использование других методов, например, метода ренормализационной группы (см., например, /10/).

ЛИТЕРАТУРА

1. Gillis N.S. Phys.Rev., 1975, B11, p.309; см. также в кн.: "Dynamical Properties of Solids", ed Horton G.K. and Maradudin A.A. North-Holl., 1975, vol.2, pp.107-150.
2. Соколов А.И. ФТТ, 1974, 16, 733; ЖЭТФ, 1975, 68, 1137.
3. Conte R. J.de Phys., 1974, 35, p.67.
4. Плакида Н.М., Аксенов В.Л. ФТТ, 1973, 15, 2575.
5. Плакида Н.М., Аксенов В.Л. ОИЯИ, P17-10445, Дубна, 1977.
6. Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. Наука, М., 1973.
7. Klein M.L., Koehler T.R. В кн.: "Rare Gas Solids", Academic Press, London-N.Y.-San Franc., 1976. vol.1, pp.301-382.

8. Вакс В.Г., Ларкин А.И., Пикин С.А. ЖЭТФ, 1966, 51, 361.
9. Klein M.L., Horton G.K., Goldman V.V. Phys.Rev., 1970, B2, p.1995.
10. Паташинский А.З., Покровский В.А. УФН, 1977, 121, 55.

Рукопись поступила в издательский отдел
15 марта 1977 года.