

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



A-424

4936/2-78

В.Л.Аксенов, Ю.Шрайбер

9/11-78

P17 - 11753

НЕУСТОЙЧИВОСТЬ РЕШЕТКИ
СВЯЗАННЫХ ПСЕВДОСПИН-ФОНОННЫХ СИСТЕМ

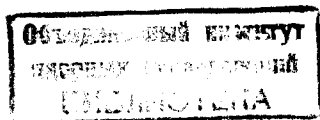
1978

P17 - 11753

В.Л.Аксенов, Ю.Шрайбер*

НЕУСТОЙЧИВОСТЬ РЕШЕТКИ
СВЯЗАННЫХ ПСЕВДОСПИН-ФОНОННЫХ СИСТЕМ

Направлено в ФТТ



* Технический университет, Дрезден, ГДР

Аксенов В.Л., Шрайбер Ю.

P17 - 11753

Неустойчивость решетки связанных псевдоспин-фононных систем

Развит самосогласованный метод описания динамики модели связанной псевдоспин-фононной системы, в которой каждая из подсистем — как псевдоспиновая, так и фононная, может быть неустойчивой относительно коллективного возбуждения соответствующего типа. Исследуется влияние связи между подсистемами на характер фазового перехода и поведение физических величин в модели выше и ниже температуры перехода. Результаты численных расчетов для модели, которая может быть использована при изучении фазовых переходов в соединениях редкоземельных металлов, ферромагнетиков, сегнетоэлектриков, сопоставляются с экспериментальными данными для сегнетоэлектрика KN_2PO_4 .

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОНЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Aksenov V.L., Schreiber J.

P17 - 11753

Lattice Instability of Coupled Pseudospin-Phonon Systems

A self-consistent approach is proposed to describe the dynamics of a coupled pseudospin-phonon model system where each of the subsystems, pseudospin and phonon ones, separately can be unstable in respect to the corresponding collective excitations. The influence of the coupling between subsystems on the character of phase transition and physical quantities of the model are investigated both above and below the phase transition temperature. The results of numerical calculations for the model that can be used for the investigation of phase transitions in compounds of rare-earth metals, ferromagnetics, ferroelectrics, etc., are compared with experimental data for the ferroelectric KN_2PO_4 .

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

1. ВВЕДЕНИЕ

Физика твердого тела изучает целый ряд соединений. (сегнетоэлектрики, сверхпроводники, магнитные материалы и др.), наиболее интересные свойства которых связаны с происходящими в них структурными превращениями. С точки зрения динамики решетки наглядной интерпретацией такого превращения служит представление мягкой моды Гинзбурга-Андерсона-Кокрена^{/1/}. Однако существование мягкой моды — неустойчивости кристалла при определенной температуре относительно критической фононной моды с некоторым волновым вектором \vec{q}_0 является скорее результатом фазового перехода, и не раскрывает механизма такого превращения в кристаллах. Для полного понимания экспериментальных результатов необходимо построить последовательную динамику решетки, что представляет собой весьма трудную задачу ввиду сложности кристаллических структур таких соединений. В этой связи становится актуальной разработка простых моделей, позволяющих на качественном уровне понять механизм возникновения неустойчивости в решетке.

Среди соединений, претерпевающих превращения, имеется широкий класс веществ, в которых можно выделить некоторую подсистему с дискретными состояниями, локализованными на узлах решетки^{/2/}. Это могут быть электронные, молекулярные, вибронные, экситонные и другие состояния. В простейших случаях их можно описать в формализме псевдоспиновых переменных. Типичными примерами таких соединений

являются сегнетоэлектрики с водородными связями типа KN_2PO_4 , редкоземельные металлы типа соединений на основе Dy и Pr, ферромагнетики типа Fe_3O_4 и другие /3,4/. Важную роль в возникновении фазового перехода здесь играет связь с решеткой или, другими словами, псевдоспин-фононная связь. При этом мягкая мода всей системы возникает как результат гибридизации фононной и псевдоспиновой мод, причем ее характер существенно зависит от связи. В простейших моделях учитывалось взаимодействие с гармоническими фононами /2-5/. Однако в общем случае фононная мода является температурно-зависящей, что особенно важно учитывать при рассмотрении структурных превращений. Более того, возможны случаи, когда гармоническое приближение не обеспечивает устойчивого основного состояния, тогда для его стабилизации необходимо учитывать ангармоническое взаимодействие /6/.

В настоящей работе мы рассмотрим модель связанной псевдоспин-фононной системы, в которой может быть неустойчивой относительно коллективных возбуждений как псевдоспиновая, так и фононная подсистемы. В отличие от предыдущих работ /6,7/, динамика модели исследуется как выше, так и ниже температурного фазового перехода, а также более детально исследуется поведение фононной моды и роль связи в механизме возникновения мягкой моды. В разделе 2 обсуждаются гамильтониан модели и условия равновесия системы. В разделе 3 развивается самосогласованный подход для описания динамики связанной псевдоспин-фононной системы. Получена самосогласованная система уравнений в приближении самосогласованного фононного поля для фононной подсистемы и в приближении хаотических фаз для псевдоспиновой. В разделе 4 рассмотрен фазовый переход в модели и проведен анализ экспериментальных данных на примере сегнетоэлектрика KN_2PO_4 .

2. ГАМИЛЬТОНИАН МОДЕЛИ И ПАРАМЕТР ПОРЯДКА

Рассмотрим модель соединения, в котором можно выделить две подсистемы в том смысле, в каком это обсуждалось во введении. Спектр фононной подсистемы в общем случае может содержать мягкую моду. Гамильтониан для последней запишем в модельном виде /8,9/:

$$H_{\Phi} = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} - A \frac{x_i^2}{2} + B \frac{x_i^4}{4} \right] + \frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_{ij} (x_i - x_j)^2 / 2, \quad (1a)$$

где x_i - локальная нормальная координата, которая описывает смещения атомов в i -той элементарной ячейке, участвующих в данном нормальном колебании; p_i - сопряженные импульсы, m - приведенная масса. Параметр A определяет превышение сил дальнего действия над короткодействующим отталкиванием в ячейке и связан с энергией нулевых флуктуаций $\omega_0^2 = A/m$. Взаимодействие ϕ_{ij} характеризует дисперсию критической моды и оценивается частотой $\Omega_0^2 = \phi_0/m$, $\phi_0 = \sum_j \phi_{ij}$. Величину ангармонического взаимодействия характеризует безразмерная константа связи $f_0 = \phi_0/A = \phi_0 S_0^2 / BS_0^4$, где $2S_0 (= 2\sqrt{A/B})$ - расстояние между двумя минимумами в одночастичном потенциале. Квантовые свойства модели характеризуются параметром $\lambda = \omega_0 / 2V_0$, где $V_0 = A^2/4B$ - высота потенциального барьера в одночастичном потенциале.

Подсистема с дискретными состояниями, локализованными на узлах решетки, в простейшем случае описывается гамильтонианом модели Изинга с поперечным полем /3,10/:

$$H_{II} = -\sum_i \Gamma S_i^x - 1/2 \sum J_{ij} S_i^z S_j^z, \quad (16)$$

где S_i^x , S_i^z - операторы псевдоспинов, обладающие свойствами оператора спина $S = 1/2$. Эта относительно простая модель содержит в себе весьма разнообразные физические свойства. Поперечное поле Γ в (1a) может приводить к появлению коллективных возбуждений. При этом $\langle S_i^x \rangle \neq 0$ при всех температурах; упорядочение же спинов по оси z , $\langle S_i^z \rangle \neq 0$ ниже некоторой температуры T_c (фазовый переход за счет обменного взаимодействия J_{ij}) возможно лишь при $\Gamma < \Gamma_c$. Критическое значение $\Gamma_c \approx J_0 / 2$, $J_0 = \sum_j J_{ij}$.

Взаимодействие между подсистемами опишем в простейшей форме /2/:

$$H_{II\Phi} = \sum_{ij} T_{ij} x_i S_j^z. \quad (1B)$$

Природа взаимодействия может быть самой разной, например, электростатической /5/.

Полный гамильтониан модели имеет вид

$$H = H_{\Phi} + H_{II} + H_{II\Phi}. \quad (1)$$

При температуре фазового перехода в модели (1) возникают равновесные смещения атомов $b = \langle x_i \rangle$, соответствующие минимуму свободной энергии. Величина b является параметром порядка и может быть определена из условий равновесия для нормальной координаты в узле решетки i : $d \langle i p_i(t) \rangle / dt = 0$. Используя (1), получаем уравнение

$$\eta (\eta^2 - 1 + 3y) = t_0 \langle S^z \rangle, \quad (2)$$

где введены безразмерные величины

$$\eta = b \sqrt{B/A},$$

$$y = \langle u_i^2 \rangle (B/A),$$

$$t_0 = \sum_j T_{ij} / (A \sqrt{A/B}),$$

$u_i = x_i - b$ - динамические смещения относительно равновесных положений. Уравнение (2) получено в приближении самосогласованного фононного поля, в котором не учитываются члены более высокого порядка $\langle u_i^3 \rangle$. Такие корреляции несущественны в случае относительно слабого ангармонизма /9/.

В уравнение (2) входит средняя "намагниченность" $\langle S^z \rangle$ - параметр порядка в псевдоспиновой подсистеме. В работе /10/ было показано, что в модели (1a) уравнение для $\langle S^z \rangle$ в приближении хаотических фаз имеет такой же вид, как и в приближении молекулярного поля. Здесь мы для упрощения расчетов воспользуемся этим результатом, что фактически означает приближение слабой связи. Тогда уравнения для $\langle S^z \rangle$ и $\langle S^x \rangle$ примут вид

$$\langle S^z \rangle = \frac{h_z}{2h} \text{th} \left(\frac{h\lambda}{T} \right),$$

$$\langle S^x \rangle = \frac{\gamma}{2h} \text{th} \left(\frac{h\lambda}{T} \right), \quad T = \frac{\Theta}{V_0}, \quad (3)$$

где h_z - продольное молекулярное поле $h_z = j_0 \langle S^z \rangle + 2t_0 \eta / \lambda$, $j_0 = J_{g=0}^z / \omega_0$; $h = \sqrt{h_z^2 + \gamma^2}$, $\gamma = \Gamma / \omega_0$.

Уравнения (2) и (3) самосогласованным образом зависят от среднеквадратичных смещений $\langle u_i^2 \rangle$, которые можно вычислить методом двухвременных функций Грина /11/.

3. САМОСОГЛАСОВАННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ СМЕЩЕНИЙ

Рассмотрим коммутаторные функции Грича (ФГ) от операторов смещений

$$D_{ii'}(t-t') = \langle\langle u_i(t); u_{i'}(t') \rangle\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega(t-t')} D_{ii'}(\omega), \quad (4)$$

где приняты обычные обозначения^{/9,11/}. Составляя для ФГ (4) уравнение движения с гамильтонианом (1), для фурье-компонент ФГ в приближении самосогласованного фононного поля^{/9/}: $\langle\langle u_i^3; u_j \rangle\rangle \approx 3\langle u_i^2 \rangle \langle\langle u_i; u_j \rangle\rangle \approx 3(A/B) \langle\langle u_i; u_j \rangle\rangle$ получаем уравнение:

$$D_{ii'}(\omega) = D_{ii'}^{(0)}(\omega) + \sum_{jj'} D_{ij'}^{(0)}(\omega) P_{jj'}(\omega) D_{j'i}^{(0)}(\omega). \quad (5)$$

В уравнении (5) ФГ $D_{ii'}^{(0)}(\omega)$ - ФГ несвязанной (при $T_{ij} = 0$) фононной подсистемы, уравнение для пространственного фурье-образа которой имеет вид

$$D_{ij}^{(0)}(\omega) = \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} D_{ij}^{(0)}(\omega) = \frac{1}{\omega^2 - \omega_{\vec{q}}^2}, \quad (6)$$

где энергия оптической фононной моды в безразмерных переменных выражается следующим образом:

$$\omega_{\vec{q}}^2 / \omega_0^2 = \Lambda_{\vec{q}}^2 = \Delta + (f_0 - f_{\vec{q}}) \approx 3(\eta^2 + \gamma) - 1 + (f_0 - f_{\vec{q}}), \quad (7)$$

где Λ - эффективный одночастичный потенциал, определяющий цель в спектре.

"Поляризационный оператор" в (5) выражается через спиновые ФГ:

$$P_{jj'}(\omega) = \sum_{\ell\ell'} T_{j\ell} G_{\ell\ell'}^{zz}(\omega) T_{\ell'j'}. \quad (8)$$

Спиновые ФГ найдем в приближении хаотических фаз:

$$\begin{aligned} \langle\langle S_{\ell}^{\alpha} S_{i}^{\gamma}; S_j^{\beta} \rangle\rangle &= \langle S_{\ell}^{\alpha} \rangle \langle\langle S_i^{\gamma}; S_j^{\beta} \rangle\rangle + \\ &+ \langle S_i^{\gamma} \rangle \langle\langle S_{\ell}^{\alpha}; S_j^{\beta} \rangle\rangle, \end{aligned}$$

в котором уравнение для коммутаторной спиновой ФГ $G_{\ell\ell'}^{\alpha\beta} = \langle\langle S_{\ell}^{\alpha}; S_{\ell'}^{\beta} \rangle\rangle$ получаем в виде

$$\omega G_{\ell\ell'}^{\alpha\beta}(\omega) = i\delta_{\ell\ell'} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S_{\ell}^{\gamma} \rangle - i\epsilon_{\alpha\chi\gamma} \Gamma G_{\ell\ell'}^{\gamma\beta}(\omega) \quad (9)$$

$$-i\epsilon_{\alpha\gamma\chi} H_{\ell}^z G_{\ell\ell'}^{\gamma\beta}(\omega) - i\epsilon_{\alpha\gamma\chi} \langle S_{\ell}^{\gamma} \rangle \sum_j \tilde{J}_{\ell j}(\omega) G_{j\ell'}^z(\omega),$$

где мы ввели эффективное поле H_{ℓ}^z и эффективное взаимодействие $J_{\ell j}(\omega)$

$$H_{\ell}^z = \sum (J_{\ell j} \langle S_j^z \rangle + T_{\ell j} b) = J_0 \langle S^z \rangle + T_0 b \quad (10)$$

$$\tilde{J}_{\ell j}(\omega) = J_{\ell j} - \sum_{\ell_i} T_{\ell_i} D_{ii}^{(0)}(\omega) T_{i'j} = J_{\ell j} - J_{\ell j}^{\text{эф}}. \quad (11)$$

В отличие от обычного подхода^{/2,5/}, здесь $J_{\ell j}^{\text{эф}}$ зависит от температуры через $\omega_{\vec{q}}^2$ и, более того, может неограниченно возрастать, если в фононной

подсистеме возникнет неустойчивость относительно мягкой моды. Тем не менее, с формальной точки зрения уравнение (9) имеет такой же вид, как и для обычной модели Изинга с поперечным полем /10/. Решая уравнение (9) относительно $G_{\vec{q}}^z(\omega)$ и используя (8), (5), получаем выражение для фоновой ФГ:

$$D_{\vec{q}}^{\pm}(\omega) = \frac{\omega^2 - \epsilon_{\vec{q}}^2}{(\omega^2 - \omega_{\vec{q}^+}^2)(\omega^2 - \omega_{\vec{q}^-}^2)} \quad (12)$$

Энергия связанных псевдоспин-фононных возбуждений определяется выражением

$$\omega_{\vec{q}^{\pm}}^2 / \omega_0^2 \equiv \Omega_{\vec{q}^{\pm}}^2 = \frac{\Omega_{\vec{q}}^2 + E_{\vec{q}}^2}{2} \pm \quad (13)$$

$$\pm \sqrt{\left(\frac{\Omega_{\vec{q}}^2 - E_{\vec{q}}^2}{2}\right)^2 + 2\gamma \langle S^x \rangle t_{\vec{q}}^2 / \lambda},$$

где $\Omega_{\vec{q}}^2$ имеет вид (7), а $E_{\vec{q}}^2 = \epsilon_{\vec{q}}^2 / \omega_0^2$ - энергия возбуждений в псевдоспиновой подсистеме:

$$E_{\vec{q}}^2 = h_z^2 + \gamma^2 - \gamma \langle S^x \rangle j_{\vec{q}}^2. \quad (14)$$

Корреляционная функция смещений $y = \langle u_i^2 \rangle / (A/B)$ вычисляется с помощью (12) и спектральных представлений /11/ и имеет вид

$$y = \frac{\lambda}{2} \int_{-1}^{+1} \frac{d\nu \rho_0(\nu)}{\Omega_+^2(\nu) - \Omega_-^2(\nu)} \left[\frac{\Omega_+^2(\nu) - E^2(\nu)}{2\Omega_+(\nu)} \operatorname{cth}\left(\frac{\Omega_+(\nu)\lambda}{T}\right) - \frac{\Omega_-^2(\nu) - E^2(\nu)}{2\Omega_-(\nu)} \operatorname{cth}\left(\frac{\Omega_-(\nu)\lambda}{T}\right) \right]. \quad (15)$$

В (15) мы перешли от сумм к интегралам

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \phi(\vec{f}_{\vec{q}}, \vec{j}_{\vec{q}}, t_{\vec{q}}) = \int_{-1}^{+1} d\nu \rho_0(\nu) \phi(f_0\nu, j_0\nu, t_0)$$

с помощью модельной плотности состояний

$$\rho_0(\nu) = \frac{2}{\pi} \sqrt{1 - \nu^2}. \quad (16)$$

Здесь мы предполагаем, что плотность состояний возбуждений в фоновой и псевдоспиновой подсистемах одинакова, но различна ширина зон.

Итак, мы получили самосогласованную систему уравнений (13), (14), (7), (2), (3), (15) для описания динамики и термодинамики связанной спин-фононной системы.

4. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В МОДЕЛИ

Рассмотрим самосогласованную систему уравнений (13), (14), (7), (2), (3), (15). Когда фоновая и псевдоспиновая подсистемы не связаны ($t_0 = 0$), в каждой из них может произойти фазовый переход. В псевдоспиновой подсистеме (15), как известно /3/, при определенной температуре T_c^0 возникает спонтанное упорядочение спинов при условии $\Gamma < \Gamma_c \approx J_0/2$. В фоновой системе возможность возникновения неустойчивости определяется параметром λ /12/. Используя (2), (15), а также (7), получаем

$$\eta^2 = 1 - \frac{3}{2} \lambda \int_{-1}^{+1} \frac{\gamma \rho_0(\nu) d\nu}{\sqrt{2\eta^2 + f_0(1-\nu)}} \operatorname{cth}\left(\frac{\sqrt{2\eta^2 + f_0(1-\nu)} \lambda}{T}\right). \quad (17)$$

Отсюда видно, что решение $\eta \neq 0$ существует только при $\lambda < \lambda_c$. При $T = 0$, когда $\operatorname{cth}(\dots) = 1$,

$$\lambda \approx \frac{2}{3} \pi \sqrt{f_0} / \int_{-1}^{+1} \nu \sqrt{1+\nu} d\nu \approx \frac{2}{3} \frac{\sqrt{f_0}}{\mu_1} = \sqrt{f_0} / 0,56568, (18)$$

Таким образом, фазовый переход возможен только в том случае, когда решетка состоит из относительно тяжелых комплексов ионов при $m > (\frac{2}{3} \frac{\sqrt{\Phi_0}}{\mu_1} \frac{A}{B})^{-2}$.

Чтобы оценить влияние связи на поведение системы, рассмотрим самосогласованную систему уравнений в параграфе в приближении слабой связи и в приближении молекулярного поля. Разлагая cth в высокотемпературном пределе, энергию связанных возбуждений (13) представим в виде двух ветвей, фонноподобной и псевдоспиноподобной

$$\Omega_{\phi}^2 = \Omega_0^2 + \frac{\gamma^2 t_0^2}{T} \frac{2}{\Omega_0^2 - \gamma^2}, (19)$$

$$\Omega_n^2 = \gamma^2 - \frac{\gamma^2 t_0^2}{T} \frac{2}{\Omega_0^2 - \gamma^2}.$$

Как видно, картина фазового перехода (обращение в ноль $\Omega_{\phi, n}$) зависит от соотношения Ω_0 и γ . В гармоническом приближении (модель Кобаяши /2, 5/), всегда $\Omega_0 > \gamma$. В этом случае мягкой является псевдоспин-фононная мода Ω_n при $T_c^{(n)} = t_0^2 / (\Omega_0^2 - \gamma^2)$. Интересно отметить, что при $\gamma > \gamma_c$, когда и псевдоспиновая подсистема устойчива, полная система претерпевает фазовый переход. Модель (1) позволяет рассмотреть и такие ситуации, когда оптическая мода зависит от температуры и может стать меньше γ . В этом случае мягкой является фонон-псевдоспи-

новая мода при $T_c^{(\phi)} = 4f_0/3 + t_0^2(4 - 1/f_0)$.

Развитый здесь самосогласованный подход позволяет, в отличие от всех предыдущих рассмотрений модели типа (1), учесть флуктуации параметра порядка через корреляционную функцию смещений $\langle u_i^2 \rangle$. Следствием этого является линейное поведение мягкой моды вблизи T_c . Таким образом, фононная система с учетом ангармонизма существенно меняет характер поведения спиновой системы, где при $t_0 = 0$ $E_0^2 \approx 1 - \text{th}(\frac{\gamma\lambda}{T}) / \text{th}(\frac{\gamma\lambda}{T_0^R})$.

Для более детального описания системы, а также для получения температурного хода параметров порядка как в пара-, так и в феррофазе были проведены численные расчеты при различных соотношениях параметров $\lambda, f_0, \gamma, j_0, t_0$. В результате можно выделить три физически различные ситуации.

1. При $t_0 = 0$ в обеих подсистемах имеется мягкая мода. В этом случае в роли триггерной может выступать каждая из подсистем, в зависимости от того, какая из них является более "мягкой". В обоих случаях температура, при которой обращается в ноль связанная мягкая мода Ω_{\pm} , больше, чем температура обращения в ноль мягких мод подсистемы.

2. При $t_0 = 0$ в одной из подсистем нет мягкой моды. Характер неустойчивости определяется той подсистемой, в которой имеется мягкая мода. На рис. 1 представлена температурная зависимость $\Omega_{\pm}(\vec{q}=0)$ при значениях параметров $\lambda = 7,5, f_0 = 6, \gamma = 0,8, j_0 = 2,0, t_0 = 2$. В этом случае в фононной подсистеме фазового перехода при $t_0 = 0$ не происходит. Связь с фононной системой приводит к увеличению T_c псевдоспиновой подсистемы.

3. При $t_0 = 0$ в обеих подсистемах нет фазового перехода. На рис. 2 представлен расчет такой ситуации при значениях параметров $\lambda = 7,5, f_0 = 6, \gamma = 1,2, j_0 = 2,0, t_0 = 2$. Как видно, гибридизированная мода становится мягкой, показывая фазовый переход первого рода, близкий ко второму.

Общая черта всех трех случаев состоит в наличии фазового перехода первого рода, что является следствием

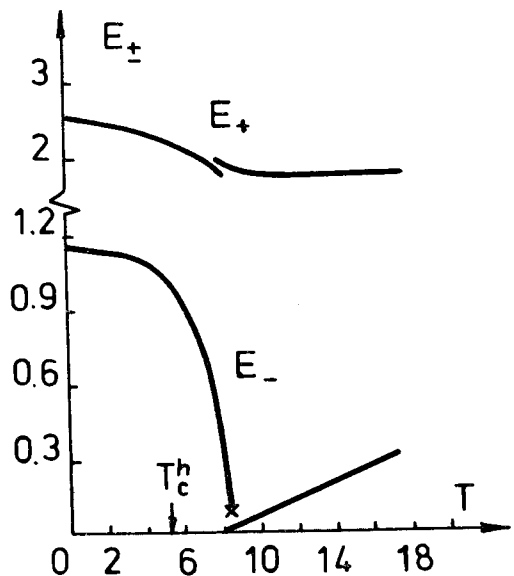


Рис.1. Температурная зависимость энергии связанных псевдоспин-фононных возбуждений при $\vec{q} = 0$ ($\lambda = 7,5$, $\gamma = 0,8$, $f_0 = 6$, $j_0 = 2,0$, $t_0 = 2$). При $t_0 = 0$ фононная подсистема устойчива, в псевдоспиновой подсистеме происходит ФП при $T = T_c^h$.

учета флуктуаций параметра порядка в фононной подсистеме^{/9/}. Заметим, что с увеличением связи увеличивается роль этих флуктуаций.

Модель (1) позволяет качественно понять экспериментальные данные в связанных спин-фононных системах. В качестве примера рассмотрим сегнетоэлектрический фазовый переход в кристалле KN_2PO_4 . В последнее время достигнут существенный прогресс в понимании динамики мягкой моды в этом соединении благодаря исследованиям при высоких давлениях^{/13/}. Оказалось, что модель Кобаяши в общих чертах дает правильное

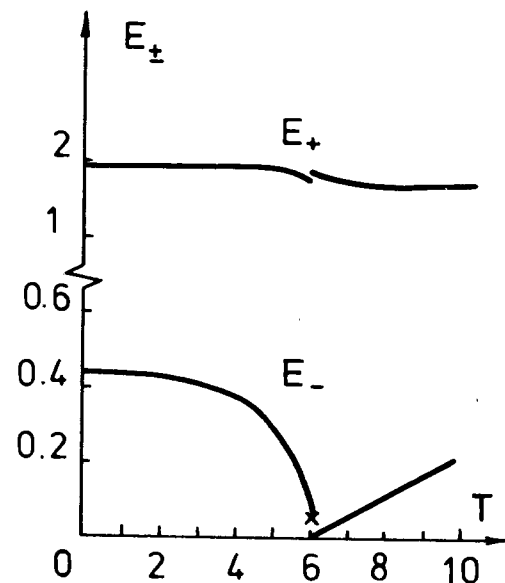


Рис.2. Температурная зависимость энергии связанных псевдоспин-фононных возбуждений при $\vec{q} = 0$ ($\lambda = 7,5$, $f_0 = 6$, $\gamma = 1,2$, $j_0 = 2,0$, $t_0 = 2$). При $t_0 = 0$ как фононная, так и псевдоспиновая подсистемы устойчивы.

представление о механизме фазового перехода, хотя не описывает полученной экспериментально линейной зависимости мягкой моды в параграфе.

Качественное согласие результатов рис. 1 с температурной зависимостью частот Ω_{\pm} в работе^{/13/} показывает, что необходимо учитывать температурную зависимость фононной моды. При этом фононная подсистема при $T_{ij} = 0$ должна быть устойчивой. Еще раз подчеркнем, что линейная зависимость мягкой моды в параграфе обусловлена включением в схему расчета корреляционной функции $\langle u_i^2 \rangle$. Для количественного согласия модели с экспериментальными данными, как отмечалось в^{/13/}, необходимо еще учесть

зависимость от температуры параметра связи t_0 .

Температурное поведение мод Ω_{\pm} в феррофазе имеет интерполяционный смысл, поскольку при $T \rightarrow T_c$ становится существенным взаимодействие с центральной модой ^{/13/}. Для рассмотрения этого вопроса принятые в данной работе приближения являются уже недостаточными. Кроме того, необходимо дополнить модель (1) учетом влияния примесей и, видимо, связью с акустической модой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков, "Наука", М., 1973.
2. Yamada Y. *Ferroelectrics*, 1977, 15, p.49.
3. Stinchcombe R.B. *J.Phys.* C6, 1973, p.2459.
4. Fulde P., Peschel J. *Adv. in Phys.*, 1972, 21, No.89, p.1.
5. Kobajashi K.K. *J.Phys.Soc. Jap.*, 1968, 24, p.497.
6. Консин П.И., Кристофель Н.Н. *ФТТ*, 1972, 14, стр. 2873.
7. Консин П.И. *ФТТ*, 1974, 16, стр. 2337.
8. Gillis N.S. In: *Dynamical Properties of Solids*, ed. G.K.Horton and A.A.Maradudin, North-Holl., Amsterdam, 1975, vol.2, pp.107-150.
9. Аксенов В.Л., Плакида Н.М. *ТМФ*, 1978, 35, стр. 104.
10. Аксенов В.Л., Конвент Г., Шрайбер Ю. ОИЯИ, Р17-11369, Дубна, 1978.
11. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. *ДАН СССР*, 1959, 126, стр. 53.
12. Стаменкович С. и др. ОИЯИ, Р17-10743, Дубна, 1977.
13. Peercy P.S. *Phys.Rev.*, 1975, B12, p.2725.

Рукопись поступила в издательский отдел
13 июля 1978 года.