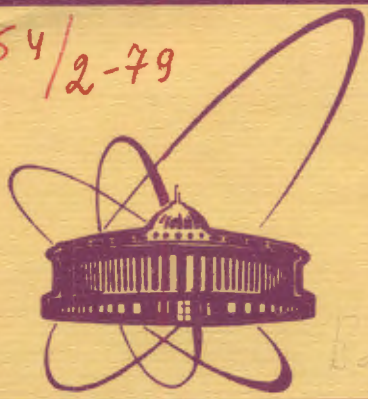


100

5154/2-79



Объединенный
институт
ядерных
исследований
Дубна

Волпр-31

12/12-79

P-22

P17 - 12594

И.М.Рангелов

КОЛЕБАНИЯ ПРОТОНОВ В ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПочКЕ
ИЗ ДВУХМИНИМУМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

1979

P17 - 12594

И.М.Рангелов

КОЛЕБАНИЯ ПРОТОНОВ В ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКЕ
ИЗ ДВУХМИНИМУМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Направлено в ТМФ

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

скоков должна тоже уменьшаться, и при T_c сегнетоэлектрического перехода туннелирование исчезает. Ниже T_c все протоны "упорядочены", т.е. они занимают или левую, или правую ямку. Отсюда следует, что модель с разделенным движением протонов необходима всегда, когда связь $O^- - H^+ - O^-$ рассматривается как основная при сегнетоэлектрическом переходе, т.е. когда упорядочение протонов необходимо для объяснения появления спонтанной поляризации. Точнее, в этой модели сегнетоэлектрический СФП наступает только как следствие поляризуемости $O^- - H^+ - O^-$ связи и взаимодействия диполей со средним полем в кристалле, без учета устойчивости решетки.

Однако возможно, что сегнетоэлектрический СФП является следствием неустойчивости кристаллической решетки, и поляризуемость $O^- - H^+ - O^-$ связи только увеличивает дальнедействующее кулоновское взаимодействие между ионами, которое должно компенсировать их квантовое, близкоедействующее взаимодействие. В настоящей работе предполагается, что колебания протонов происходят только между двумя потенциальными минимумами каждой ямы, и что уменьшение a не исчезновение/интенсивности этих перескоков сильно увеличивает поляризуемость $O^- - H^+ - O^-$ связи.

Необходимо отметить, что существование двух минимумов в потенциальной яме, где движется ион водорода /дейтерий/, является следствием статического взаимодействия между O^- и H^+ ионами. Об этом было известно давно, такое взаимодействие использовалось Френкелем при исследовании устойчивости кристаллической решетки^{/12/}. Поэтому не стоит принимать всерьез предположение о том, что электрон-фоонное взаимодействие способно привести к появлению двухминимумного потенциала^{/13,14/}. Для этого необходимо: 1/ не отличать колебаний решетки от ее искажения; и 2/ предположить, что глубины минимумов самосогласованно увеличиваются с увеличением искажения решетки. Именно поэтому в дальнейшем мы предполагаем, что двухминимумная потенциальная яма, в которой движется каждый протон /рис. 1/, является следствием суммирования двух потенциалов, созданных двумя соседними кислородными анионами. Поэтому

$$U(x) = U_1(x) + U_2(x), \quad /1/$$

где

$$U_1(x) = -A_0 + B_0(x-x_0)^2/2 + C_0(x-x_0)^3/3 + D_0(x-x_0)^4/4 \quad /2a/$$

$$U_2(x) = -A_0 + B_0(x+x_0)^2/2 - C_0(x+x_0)^3/3 + D_0(x+x_0)^4/4. \quad /2b/$$

и поэтому имеем

$$U(x) = -2A_0 + B_0(x_0^2 + x^2) - 2C_0 x_0 x^2 + \quad /3a/$$

$$+ 3D_0 x_0^2 x^2 - 2C_0 x_0^3/3 + D_0 x^4/4 + D_0 x_0^4/4 =$$

$$= U_0 - a x^2/2 + \beta x^4/4, \quad /3b/$$

где

$$U_0 = -2[A_0 - B_0 x_0^2/2 + C_0 x_0^3/3 - D_0 x_0^4/4] \quad /4/$$

$$-a = 2B_0 - 4C_0 x_0 + 6D_0 x_0^2; \quad \beta = 2D_0. \quad /5a,6/$$

Определение коэффициента a как $a = -2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Big|_{x=0}$ показывает,

что кривизна одноионного потенциала определяет ее знак и величину. Обычно $a > 0$, и поэтому получается, что протон движется в двухминимумной потенциальной яме. Здесь необходимо категорически отбросить как ошибочное, но иногда используемое, квазигармоническое приближение, при котором вместо

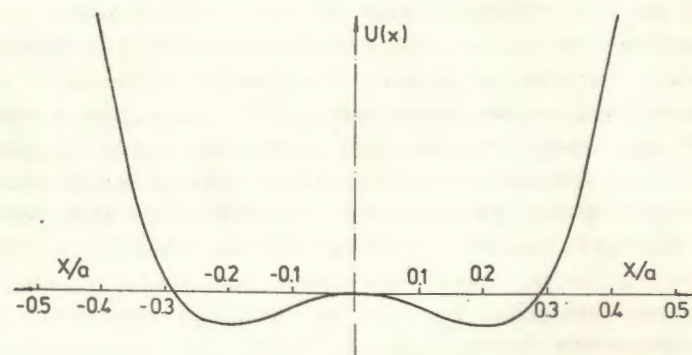


Рис. 1. Локальный двухминимумный потенциал, в котором движется протон.

Колебания протонов в одномерной цепочке
из двухминимумных потенциалов

Исследовано влияние среды на колебание частиц в одномерной с упругим взаимодействием между ближайшими соседями цепочке. Показано, что в цепочке из одноминимумных потенциалов частицы будут колебаться около своего равновесного положения, причем отклонения частиц описываются колоколообразной кривой. В цепочке из двухминимумных потенциалов частицы должны колебаться между двумя минимумами каждой потенциальной ямы, причем их отклонение от центра горба между минимумами каждой ячейки описывается кривой "доменная стенка". Получены энергетические спектры "колоколообразного" и "доменной стенки" колебаний. Построена статистика для обоих колебаний.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Proton Oscillations in One-Dimensional Chain
from Double-Minimum Potentials

The influence of medium of particle oscillation in one-dimensional chain with elastic interaction between the nearest neighbours is described. It is shown that particles will oscillate around their equilibrium position in one-dimensional chain with one-minimum local potentials. Their deviations are described by a curve of a "bell" type. In one-dimensional chain ω with a double-well local potentials the particles have to oscillate between two minima of each potential well. Their deviations are described by a curve of a "domain well" type. The energy spectra of the "bell" type and the "domain-well" type oscillations are obtained. The statistics for both type oscillations are constructed.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

Обычно при структурных фазовых переходах /СФП/ сложных соединений симметрия элементарной ячейки нарушается перегруппировкой только некоторых атомов, тогда как положение всех остальных остается неизменным. Поэтому при изучении динамики "мягкой" моды в этих системах не только можно, но и необходимо для упрощения расчета предположить, что существуют активные ионы, поведение которых обеспечивает энергетическую выгодность СФП, и неактивные ионы, которые можно рассматривать как упругую среду или термостат.

В сегнетоэлектриках, содержащих водород /дейтерий/, температура СФП T_c сильно зависит от массы водорода /или дейтерия/ $T_c = 122^\circ K$ для KH_2PO_4 и $T_c = 220^\circ K$ для KD_2PO_4 , и поэтому всегда предполагалось, что движение протонов на связях $O^- - H^+ - O^-$ является триггерным механизмом для сегнетоэлектрического СФП ^{/1,2/}. Экспериментальные данные и теоретические исследования показывают, что коллективные движения протонов в одномерной цепочке, составленной из двухминимумных потенциальных ям, можно описать с помощью волн "доменная стенка" ^{/3-5/}. Вопреки этому, иногда ^{/6-11/} движение протона разлагается на два движения: 1/ колебание протона в одном из двух минимумов и 2/ перескоки протона из одного минимума в другой. Такое разделение физически бессмысленно, так как вместо одного реального колебания протона между двумя минимумами в каждой потенциальной яме вводятся два вида колебаний: а/ высокочастотные колебания возле точки равновесия одного минимума, амплитуда которых зависит от температуры; и б/ туннелирование протона через центральный горб между двумя минимумами потенциальной ямы. Частота перескоков намного меньше частоты одноминимумного колебания. Однако самое важное - это то, что с понижением температуры и увеличением поляризуемости кристалла частота пере-

точного ангармонического потенциала /36/ применяется приближенный гармонический потенциал

$$\tilde{U} = \tilde{U}' + (\beta \langle x^2 \rangle - a) \tilde{x}^2 / 2. \quad /6/$$

Конечно, очень удобно утверждать, что пока $\beta \langle x^2 \rangle \gg a$, то система устойчива, и протон должен колебаться возле горба между двумя минимумами, а при $\beta \langle x^2 \rangle = a$ происходит сегнетоэлектрический СФП, и при $T < T_c$ протон должен выбрать свою новую равновесную точку $\langle \tilde{x}_0 \rangle$. После искажения протон должен двигаться в гармоническом потенциале

$$\tilde{U}' = \tilde{U}_0' + (3\beta \langle \tilde{x}_0 \rangle^2 + \beta \langle \tilde{x}^2 \rangle - a) \tilde{x}^2 / 2, \quad /7/$$

где $\tilde{x} = x - \langle \tilde{x}_0 \rangle$. Так как искажение обеспечивает неравенство

$$3\beta \langle \tilde{x}_0 \rangle^2 + \beta \langle \tilde{x}^2 \rangle \gg a, \quad /8/$$

то квадрат частоты колебаний

$$\tilde{\omega}^2 = (3\beta \langle \tilde{x}_0 \rangle^2 + \beta \langle \tilde{x}^2 \rangle - a) / M \quad /9/$$

положителен, и поэтому решетка устойчива. Это предположение равносильно разделению роли члена четвертого порядка $\beta x^4 / 4$ на два: 1/ роль эффективного потенциала $\beta \langle x^2 \rangle / 2$; 2/ роль координаты x^2 , т.е. множителя в упругой энергии колеблющегося протона. Последующее исследование покажет, что такое приближение здесь неприменимо. Дело не в том, что всегда сильный ангармонизм нельзя приближенно описывать с помощью квазигармонического приближения, а только в том, что нельзя применять приближенное описание сильно ангармонического осциллятора в случае, когда протон не находится в точке устойчивого равновесия. Действительно, если ангармонизм приводит только к слабой перенормировке констант упругости, то тогда можно применять приближенное, квазигармоническое описание. Но если ангармонизм приводит к коренным изменениям параметров колебания, то необходимо сначала перейти в новую точку устойчивого равновесия, и только потом применять квазигармоническое приближение для описания колебаний частиц.

Так как двухминимумный потенциал является следствием взаимодействия протона со всеми остальными ионами /и, в частности, с кислородными аннионами/, то сначала нам необходимо исследовать влияние среды на колебания протонов. Для этого необходимо сначала рассмотреть движение частицы в одномерной цепочке с одноминимумным потенциалом взаимодействия частицы со средой, дополненной упругими силами взаимодействия между ближайшими соседями. Поэтому мы предполагаем, что n -ая частица движется в потенциале

$$U_n = \frac{\kappa}{2} [(u_{n+1} - u_n)^2 + (u_n - u_{n-1})^2] + \frac{a u_n^2}{2} \dots \quad /10/$$

Уравнение движения для отклонения n -ой частицы от ее равновесного положения u_n имеет следующий вид:

$$M \ddot{u}_n = \kappa (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) - \nu \kappa u_n, \quad /11/$$

где принято, что $a = \nu \kappa$. В длинноволновом приближении, когда имеет место приближенное разложение /12/,

$$u_{n \pm 1} = u_n \pm a \frac{\partial u_n}{\partial x} + \frac{a^2}{2!} \frac{\partial^2 u_n}{\partial x^2} \pm \dots \quad /12/$$

После сохранения только первых не исчезающих членов вместо /11/ имеем:

$$M \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \kappa a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \nu \kappa u. \quad /13/$$

Это - уравнение струны в упругой среде /15/, которое путем подбора параметров может совпадать с уравнением Клейна-Гордона для бесспиновой частицы с нулевым зарядом /16,17/.

Оба уравнения /11/ и /13/ имеют решения в виде плоских волн

$$u_{n,k} = A_k e^{i n a k - i \omega t}; \quad /14a/$$

$$u_q = A_q e^{i q x - i \omega t}, \quad /14b/$$

причем их энергетические спектры

$$\omega_k = \sqrt{\frac{\kappa}{M}} \sqrt{\nu + 4 \sin^2\left(\frac{\kappa a}{2}\right)}; \quad /15a/$$

$$\omega_q = \sqrt{\frac{\kappa}{M}} \sqrt{\nu + (q a)^2} \quad /15b/$$

также связаны $\omega_q = \lim_{k \rightarrow q \ll \frac{1}{a}} \omega_k$. Из плоских волн можно по-

строить волновые пакеты, максимум которых движется со скоростью

$$v_k = \sqrt{\frac{\kappa a^2}{M}} \frac{\sin(\kappa a)}{\sqrt{\nu + 4 \sin^2\left(\frac{\kappa a}{2}\right)}}; \quad /16a/$$

$$v_q = \sqrt{\frac{\kappa a^2}{M}} \frac{(q a)}{\sqrt{\nu + (q a)^2}}. \quad /16b/$$

Ради простоты дальше будем исследовать только длинноволновое уравнение /13/ и его решение. Для него с /16b/ можно получить:

$$q a = \frac{\sqrt{\nu} v}{\sqrt{s^2 - v^2}}, \quad /17/$$

где $s = \sqrt{\frac{\kappa a^2}{M}}$ - скорость звука в цепочке.

После сделанного введения можно приступить к решению уравнения движения /13/ в x, t -пространства. Для этого необходимо переписать его в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - s^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -\frac{\nu s^2}{a^2} u. \quad /18/$$

В случае, когда $\nu = 0$ ($\nu = 0$), уравнение /18/ описывает движение волны в непрерывной среде /струне/ со скоростью звука s . Поэтому и при $\nu \neq 0$ мы можем потребовать, чтобы $u(x, t) = u(z)$, где $z = x - vt$. Уравнение /18/ после перехода с x, t -переменных в z -переменную принимает более простую форму

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{\nu s^2}{a^2 (s^2 - v^2)} u = \Lambda u. \quad /19/$$

Дифференциальное уравнение /19/ имеет решение в виде колокола /рис. 2/

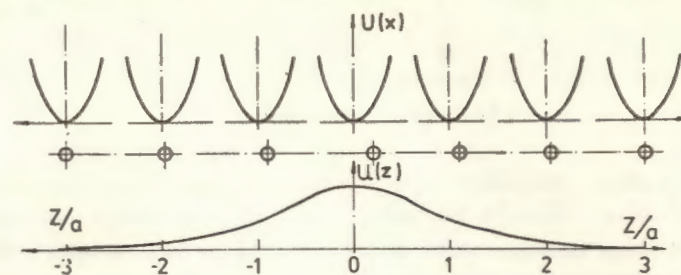


Рис. 2. Локальные одноминимумные потенциалы среды, отклонения ионов и колоколообразная кривая, описывающая последние.

$$u(x, t) = u_0^v e^{-\sqrt{\Lambda} |z|} = u_0^v e^{-\sqrt{\Lambda} |x - vt|} \quad /20/$$

с экспоненциально затухающими концами. Решение /20/ подтверждает сделанное нами предположение о том, что из плоских волн /14/ можно создать волновой пакет, который благодаря упругому воздействию среды все время сохраняет свою форму. Колоколообразное решение /20/ показывает, что без наличия упругой среды / $\nu = 0$ и поэтому $\Lambda = 0$ / невозможно создать устойчивого частицеподобного решения. Поэтому уравнение Клейна-Гордона надо рассматривать как более общее и точное уравнение "свободной" частицы, чем уравнение Шредингера, потому что оно имеет частицеподобное /колоколообразное/ решение

$$\Psi = \Psi_0 \exp\left(-\frac{m c^2 |x - vt|}{h \sqrt{c^2 - v^2}}\right). \quad /21/$$

Из /21/ видно, что самая большая неопределенность координаты частицы в колоколе /при $v = 0$ / совпадает с ее комптоновской длиной $\lambda_c = \hbar / m c$.

Чтобы вычислить энергию волнового пакета /колокола/, необходимо вместо суммирования по номеру частицы n в цепочке произвести интегрирование. Так, при учете потенциальной /10/ и кинетической энергии частиц получаем:

$$E = \frac{1}{a} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \frac{\kappa a^2}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{\nu \kappa}{2} u^2 \right] dx. \quad /22/$$

где $L = Na$. После замены дифференцирования по t и x дифференцированием по z , вместо /22/ можно получить

$$E = \frac{1}{2a} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} [(Ms^2 + Mv^2) \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) + \nu \kappa u^2] dz. \quad /23/$$

Если учесть, что s /13/ легко получается

$$\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 = \frac{\nu s^2 u^2}{a^2(s^2 - v^2)}, \quad /24/$$

то после подстановки /24/ в /23/ энергию искажения цепочки в виде движущегося колокола можно записать в следующем виде:

$$E = \frac{Ms^4\nu}{a^3(s^2 - v^2)} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} u^2 dz. \quad /25/$$

После подстановки u из /20/ в /25/ для E получаем

$$E = \frac{2\kappa\nu s^2(u_0^0)^2}{a(s^2 - v^2)} \int_0^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{2z\sqrt{\nu}s}{a\sqrt{s^2 - v^2}}\right) dz = \\ = [\kappa s\sqrt{\nu} (u_0^0)^2] / \sqrt{s^2 - v^2}. \quad /26/$$

Если учесть связь /17/ между (v/s) и (qa) , то из /26/ можно получить

$$E = \frac{Ms^2}{a^2} \frac{\sqrt{\nu}}{\sqrt{\nu}} (u_0^0)^2 \sqrt{\nu + (qa)^2} = \kappa (u_0^0)^2 \sqrt{\nu + (qa)^2}. \quad /27/$$

Имея в виду /156/, для E получаем окончательное выражение

$$E_q = \sqrt{\kappa M} (u_q^0)^2 \omega_q. \quad /28/$$

Так как амплитуда колебания u_q^0 зависит от числа фононов n_q , то, используя знакомое выражение

$$E_q = \hbar \omega_q \left(n_q + \frac{1}{2}\right), \quad /29/$$

легко можно получить

$$(u_q^0)^2 = \left(n_q + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar}{\sqrt{\kappa M}} = \left(n_q + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar a}{Ms^2}, \quad /30/$$

где $n_q = \left\{ \exp\left(\frac{\hbar \omega_q}{k_0 T}\right) - 1 \right\}^{-1}$ - бозе-эйнштейновская функция заполнения состояний фононами.

После того как закончили исследование влияния упругой среды на движение частиц в упругой цепочке, можем перейти к рассмотрению движения протонов в двухминимумных локальных потенциальных ямах. Для этого необходимо предположить, что n -ый протон движется в потенциале

$$U_n = \frac{\kappa}{2} [(u_{n+1} - u_n)^2 + (u_n - u_{n-1})^2] - \frac{\alpha u_n^2}{2} + \frac{\beta u_n^4}{4}. \quad /31/$$

Тогда уравнение движения для его отклонения от середины горба имеет следующий вид:

$$M \ddot{u}_n = \kappa (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \nu \kappa u_n - \mu \kappa u_n^3, \quad /32/$$

где принято, ради удобства, что $\alpha = \nu \kappa$ и $\beta = \mu \kappa$.

В длинноволновом приближении, когда разложение /12/ хорошо выполняется, разностное уравнение /32/ переходит в следующее частное дифференциальное уравнение:

$$M \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \kappa a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \nu \kappa u - \mu \kappa u^3. \quad /33/$$

Если снова предположить, что отклонение $u(x, t)$ зависит от x и t через переменную $z = x - vt$ (т.е. $u(x, t) = u(x - vt)$), то тогда частное дифференциальное уравнение /33/ переходит в обычное

$$(Mv^2 - Ms^2) \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \nu \kappa u - \mu \kappa u^3. \quad /34/$$

Первый интеграл уравнения /28/ имеет вид

$$\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 = C_1 + (R - Su^2)^2 / 2S. \quad /35/$$

где

$$R = \frac{\alpha}{M(s^2 - v^2)} \quad \text{и} \quad S = \frac{\beta}{M(s^2 - v^2)} \quad /36/$$

Здесь также возможны несколько решений в зависимости от выбора константы C_1 . Обычно выбирают $C_1 = -(R - Su_0^2)^2 / 2S$, при котором /35/ принимает следующий вид:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 = R(u_0^2 - u^2) + \frac{S}{2}(u^4 - u_0^4) \quad /37/$$

Константа u_0 описывает максимальное значение отклонения протона. Тогда уравнение /34/ имеет решение:

$$\int_0^u \frac{du}{\sqrt{u_0^2 - u^2} \sqrt{R - S(u_0^2 + u^2) / 2}} = z \sqrt{R - Su_0^2 / 2} \quad /38/$$

После подстановки $u = u_0 \sin \phi$ вместо /38/ получим /18/

$$\int_0^\phi \frac{d\phi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi}} = z \sqrt{R - Su_0^2 / 2} \quad /39/$$

где $k^2 = Su_0^2 / [2R - Su_0^2]$. При $Su_0^2 \ll 2R$ решение /39/ является почти гармоническим, но с увеличением амплитуды колебаний u_0 ангармоничность усиливается, хотя колебание и остается периодическим, с новым периодом

$$\bar{a} = 4K(k) / \sqrt{R - Su_0^2 / 2} \quad /40/$$

где $K(k)$ - полный эллиптический интеграл 1 рода.

При $k=1$, т.е. когда $R = Su_0^2$, период ангармонического колебания становится бесконечным, и отклонения протонов описываются волной "доменная стенка". Действительно, с /38/ можно получить

$$z \sqrt{2Su_0^2} = \int_0^u \frac{2u_0 du}{u_0^2 - u^2} = \ln \left| \frac{u_0 + u}{u_0 - u} \right| \quad /41/$$

После преобразований с /41/ получается, что

$$u = u_0 \operatorname{th} \left(z \sqrt{\frac{R}{2}} \right) = u_0 \operatorname{th} \left(\sqrt{\frac{R}{2}} (x - vt) \right) \quad /42/$$

Итак, мы получили, что если колебания протонов происходят между двумя минимумами потенциальной ямы, когда $k=1$ и $k = Su_0^2$ ($\alpha = \beta u_0^2$), то отклонение протонов от центра горба между минимумами можно описать доменными стенками /рис.3/. Это означает, что далеко от фронта волны протоны находятся в одном из двух минимумов потенциальной ямы соответствующего узла ($u = u_0$), а вблизи фронта волны они смещены по закону $u = u_0 \operatorname{th} \left(\sqrt{\frac{R}{2}} (x - vt) \right)$.

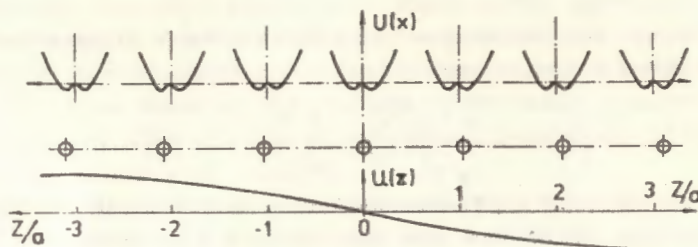


Рис. 3. Локальные двухминимумные потенциалы среды, отклонение протонов и кривая "доменная стенка", описывающая последние.

Экспериментальные данные, полученные при исследовании квадрупольного расщепления, показывают, что как выше, так и ниже T_c , расстояние между двумя равновесными положениями протона /т.е. $2u_0$ / меняется очень слабо, и то только как следствие теплового расширения образца. А это подтверждает наше предположение, что равновесные положения протонов совпадают с минимумами двухминимумной потенциальной ямы соответствующего узла, расстояние между которыми меняется от температуры при расширении образца.

Чтобы получить энергию колеблющихся протонов в цепочке, необходимо вместо суммы

$$E = \sum_n \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\partial u_n}{\partial t} \right)^2 + \frac{\kappa a^2}{2} \left(\frac{\partial u_n}{\partial x} \right)^2 - \frac{\alpha u_n^2}{2} + \frac{\beta u_n^4}{4} \right] \quad /43/$$

написать интеграл

$$E = -\frac{1}{a} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left[\frac{M}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \frac{\kappa a^2}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 - \frac{\alpha u^2}{2} + \frac{\beta u^4}{4} \right] dx \quad /44/$$

Если перейти с переменных x и t к переменной z , то с /44/ можно получить

$$E = \frac{1}{a} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left[\left(\frac{Mv^2}{2} + \frac{Ms^2}{2} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 - \frac{\alpha u^2}{2} + \frac{\beta u^4}{4} \right] dz. \quad /45/$$

После учета связи /35/ между $\frac{\partial u}{\partial z}$ и u , вместо /45/ получим

$$E = \frac{1}{a} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left[\frac{\beta u_0^4}{4} - \frac{\alpha u_0^2}{2} + a(u_0^2 - u^2) - \beta(u_0^4 - u^4) / 2 \right] dz. \quad /46/$$

После подстановки u из /42/ в /46/ и после вычисления интегралов получаем, что

$$E = - \frac{N \alpha u_0^2}{4} + \frac{\kappa s \sqrt{\nu} u_0^2}{\sqrt{s^2 - v^2}} \frac{2\sqrt{2}}{3}. \quad /47/$$

Первый член в /47/ описывает понижение энергии протонов вследствие того, что все они находятся в минимумах потенциальных ям, а не на горбе, а второй член описывает увеличение энергий протонов вследствие их участия в волне "доменная стенка", т.е. вследствие перепрыгивания с одного минимума в другой. Хотя второй член в /47/ очень похож на увеличение энергии частиц /26/, все-таки между ними есть существенное различие. Если в /26/ зависимость u_0^2 от температуры выражена числом возбужденных фононов n_q /30/, то в /47/

амплитуда колебаний $u_0 = \sqrt{\frac{a}{\beta}}$ определяется расстоянием меж-

ду двумя минимумами, и поэтому не зависит от числа заполнения. Однако здесь возможно следующее простое обобщение. Так как отклонение протонов в доменной стенке от равновесного положения ограничено только в области фронта волны, то можно предположить, что в отделенных друг от друга точках цепочки возможно возбуждение различных волн доменной стенки с одинаковыми скоростями и энергиями, которые не будут взаимодействовать между собой /19/. Тогда уже можно формально ввести $u_q^2 = u_0^2 + u_0^2 + u_0^2 + \dots = n_q u_0^2$. Именно тогда можно ввести зависимость числа n_q доменных стенок от температуры, как это делается для обычных фононов, и тем самым описать движение протонов в цепочке, составленной из двухминимумных потенциальных ям при определенной температуре.

Итак, проведенное верхнее исследование показывает, как можно построить статистику волн доменных стенок, используя статистику устойчивого, "солитонобразного" волнового пакета из плоских волн. Модель упругой струны, колеблющейся в эластичной среде, помогла нам разобраться в поведении протонов, движущихся в цепочке двухминимумных потенциалов. В описанной модели решетка вполне устойчива и нет причины для ее классификации как неустойчивой.

Действительно, наличие упругих сил взаимодействия между ближайшими соседями кроме двухминимумного локального потенциала мешает протону колебаться одновременно возле точки равновесия одного минимума и перескакивать между минимумами одного узла. Наличие упругих сил обеспечивает зависимость обоих решений /20/ и /42/ от координат разложения /12/, что определяет смысл этих решений.

Но необходимо сразу предупредить, что нельзя принимать аналогию между двумя моделями как полное их совпадение. Необходимо всегда иметь в виду различия между ними. Так, например, при определении среднеквадратичного отклонения колеблющихся частиц от равновесного положения оно может иметь одинаковую математическую форму в обеих моделях. Но нельзя забывать, что если в модели упругой струны в эластичной среде $\langle x^2 \rangle$ определяет среднеквадратичное отклонение от центра ячейки, т.е. от узла решетки, то в цепочке двухминимумных потенциалов $\langle x^2 \rangle$ означает отклонение от точки соответствующего минимума в сторону другого минимума той же потенциальной ямы. Поэтому, когда мы вычисляем поляризуемость водородной связи, всегда вместо $a_y = e^2 \langle x^2 \rangle / k_0 T$ должны писать

$\tilde{a}_y = e^2 (u - \sqrt{\langle x^2 \rangle})^2 / k_0 T$. Так как $\langle x^2 \rangle$ обратно пропорционально массе колеблющейся частицы M , то отсюда понятно, почему замена водорода дейтерием должна повышать поляризуемость водородной связи, и тем самым T_0 сегнетоэлектрического СФП.

Автор благодарит своих коллег из теоретической группы профессора В.К.Федянина за полезное обсуждение работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kobayashi K. *J. Phys. Soc. Jap.*, 1968, 24, p.497.
2. Близиц Р., Жекш Б. "Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики". "Мир", М., 1975.
3. Krumhansl J.A., Schrieffer J.R. *Phys.Rev.*, 1975, B11, p.3535.
4. Bishop A.R., Krumhansl J.A. *Phys.Rev.*, 1975, B12, p.2824.
5. Wada Y., Schrieffer J.R. *Phys.Rev.*, 1978, 818, p.3897.
6. Курбатов А.М., Плечко В.И. ОИЯИ, Р4-8403, Дубна, 1974.
7. Аксенов В.Л. и др. ОИЯИ, Р17-9705, Дубна, 1976; ФТТ, 1976, 18, с.2920.
8. Аксенов В.Л., Плакида Н.М. ОИЯИ, Р17-10496, Дубна, 1977; ТМФ, 1978, 34, с.353; 35, с.104.
9. Аксенов В.Л., Стаменкович С. ОИЯИ, Р17-10476, Дубна, 1977; ФТТ, 1977, 19, с.1366.
10. Аксенов В.Л., Шрейбер Ю. ОИЯИ, Р17-11753, Дубна, 1978.
11. Стаменкович С. и др. ОИЯИ, Р17-11856, Дубна, 1978; *Fizika*, 10, *Suppl.*, 1978, 1 (No.2), p.122.
12. Френкель Я.И. Введение в теорию металлов. "Наука", Л., 1972.
13. Kristoffel N.N., Konsin P.I. *phys. stat. sol.*, 1968, 28, p.731. *Ferroelectrics*, 1973, 6, p.3.
14. Кристофель Н.Н., Консин П.И. ОИЯИ, Р17-9268, Дубна, 1975; *Изв. АН СССР, сер. физ.-мат.*, 1969, 18, с.439; 1973, 22, с.173; 1975, 25, с.20.
15. Морс Ф.М., Фешбах Г. *Методы теоретической физики*, т.2. ИЛ, М., 1960.
16. Бом Д. *Квантовая теория*. ИЛ, М., 1969.
17. Мессия А. *Квантовая механика*, т.1. "Наука", М., 1978.
18. Toda M. *Suppl.Prog.Theor.Phys.*, 1970, 45, p.174.
19. Mazenko G.F., Sahní P.S. *Phys.Rev.*, 1978, 818, p.6139.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 июня 1979 года.