

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

3430/2-80

28/7-80

P17-80-194

Н.М.Плакида, В.В.Иванов

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ КРИСТАЛЛОВ
С ПРИМЕСЯМИ НЕЦЕНТРАЛЬНОГО ТИПА

Направлено в "physica status solidi"

1980

1. ВВЕДЕНИЕ

Динамика решетки некоторых щелочно-галогидных кристаллов с примесями замещения имеет ряд интересных физических особенностей, как, например, низкочастотные резонансные моды /примесь Li^+ в KBr / или туннельные возбуждения /примесь Li^+ в KCl / - см.^{1-4/}. Как показывают численные расчеты на основе модельных потенциалов /1,5/, в этих случаях потенциальная энергия примеси имеет минимальное значение не в узле решетки-матрицы, а в некоторых положениях, смещенных в симметричных направлениях относительно узла. Такой характер потенциала приводит либо к нецентральному равновесному положению примеси при большой глубине смещенного минимума потенциала / Li^+ в KCl /, либо к сильно ангармоническим колебаниям примеси с низкой частотой / Li^+ в KBr /. Незначительно меняя постоянную решетки, нецентральную примесь можно перевести в положение в центре ячейки^{6/}. Описание динамики решетки с такими примесями нецентрального типа в рамках единой модели представляет значительные трудности ввиду сильноангармонического характера их колебаний.

В настоящей работе рассмотрена модель решетки с примесями, потенциальная энергия которых описывается функцией

$$U(x) = -\frac{A_0}{2} x^2 + A e^{-bx^2} = \frac{A_0}{2} x^2 + \phi(x), \quad /1/$$

предложенной в работе^{7/} для объяснения ряда экспериментальных данных. Эффективный учет большой амплитуды ангармонических колебаний примеси проведен с помощью метода самосогласованного фонового поля /СФП/^{8/}. Показано, что значительная перенормировка ангармонического потенциала $\phi(x)$ при большой амплитуде среднеквадратичных флуктуаций примеси приводит к положению примеси в центре ячейки даже при сильном ангармонизме ($a = (2Ab/A_0) \gg 1$). Смещение примесей в нецентральное положение /сегнетоэлектрический фазовый переход в примесной системе/ возможно только при конечной концентрации примесей за счет их взаимодействия. Этот вывод находится в качественном согласии с работой^{9/}, где была рассмотрена проблема локализации нецентральной примеси при туннельных переходах.

2. ГАМИЛЬТОНИАН МОДЕЛИ. РАВНОВЕСНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ

При модельном описании динамики решетки с примесями нецент-
рального типа рассмотрим только примесные колебания, обуслов-
ленные в основном смещением самой примеси с симметрией $T_{1u}^{1,2}$.
Пренебрегая для простоты их вырождением в кубическом кристалле
и взаимодействием с колебаниями другой симметрии, гамильтониан
модели запишем в виде

$$H = \frac{1}{2} \sum_q (P_q^+ P_q + \omega_q^2 Q_q^+ Q_q) + \sum_{q_i} v_i(q) Q_q s_i + \sum_i \left(\frac{P_i^2}{2m} + U(s_i) \right) - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij} s_i s_j - \sum_i f_i s_i, \quad /2/$$

где P_q и Q_q - нормальные координаты решетки-матрицы, ω_q - частота ее колебаний, $q = (\vec{q}, \lambda)$, \vec{q} - волновое число и λ - поляризация. Колебания примеси описываются приведенной координатой s_i в узле i с массой m . Статическая часть потенциальной энергии примеси описывается $U(s_i)$ в виде /1/, а динамическое взаимодействие с решеткой - функцией $v_i(q)$, где $v_i(q) \sim q$ при $q \rightarrow 0$. Прямое взаимодействие примесей /диполь-дипольного типа/ определяется ϕ_{ij} .

Чтобы определить равновесные положения примесей $x_i = \langle s_i \rangle$ при действии внешних сил f_i , вычислим свободную энергию F системы при фиксированном распределении примесей $\{i\}$ по узлам решетки и составим уравнение:

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = -T \frac{\partial}{\partial x_i} \ln \text{Sp} \left(e^{-\frac{H}{T}} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \langle H \rangle = 0. \quad /3/$$

Подставляя в /2/ разложение $s_i = x_i + u_i$, получим:

$$A_0 x_i + \tilde{\Phi}'(x_i) + \sum_{j \neq i} \phi_{ij} x_j - \sum_{qj} x_j \frac{v_i(\vec{q}) v_j(-\vec{q})}{\omega_q^2} = f_i, \quad /4/$$

где усредненная по колебаниям примеси ангармоническая часть потенциала /1/ согласно /8/ представлена в виде

$$\tilde{\Phi}(x_i) = \langle \Phi(x_i + u_i) \rangle \approx \exp \left\{ \frac{1}{2} \langle u_i^2 \rangle \nabla_i^2 \right\} \Phi(x_i) = \frac{A}{\sqrt{1+y_i}} \exp \left\{ -\frac{b x_i^2}{1+y_i} \right\}. \quad /5/$$

Здесь $y_i = 2b \langle u_i^2 \rangle$ - безразмерная среднеквадратичная флуктуация смещений примеси. Вводя восприимчивость матрицы

$$\chi_0(\omega) = \frac{1}{A_0} \sum_q \frac{|v_i(\vec{q})|^2}{\omega_q^2 - \omega^2}, \quad \chi_0 = \chi_0(0), \quad /6/$$

и эффективное взаимодействие примесей ($i \neq j$)

$$f_{ij}(\omega) = \frac{1}{A_0} \phi_{ij} + \frac{1}{A_0} \sum_q \frac{v_i(\vec{q}) v_j(-\vec{q})}{\omega_q^2 - \omega^2}, \quad f_{ij} = f_{ij}(0), \quad /7/$$

уравнение /4/ запишем в виде

$$x_i \left\{ 1 - \chi_0 - \frac{a}{(1+y_i)^{3/2}} e^{-\frac{\eta_i^2}{1+y_i}} \right\} = f_i' + \sum_{j \neq i} f_{ij} x_j, \quad /8/$$

где $a = 2Ab/A_0$, $\eta_i = \sqrt{b} x_i$, $f_i' = f_i/A_0$. Из условия устойчивости решетки с примесями в гармоническом приближении ($A=0$) получаем соотношение $\chi_0 = \chi(0) < 1$. Появление ангармонического потенциала $\Phi(s_i)$ в /1/ при $a > 1$ создает в потенциальной энергии примеси два минимума глубины $E = (A_0/2b) [a - (1 + \ln a)]$, смещенных на расстояние $x_0 = \sqrt{\ln a/b}$ относительно узла решетки. Смещение равновесного положения одиночной примеси в один из этих минимумов согласно /8/ возможно при условии

$$\mu_i(x_i)^{-1} = \left\{ 1 - \chi_0 - \frac{a}{(1+y_i)^{3/2}} \exp \left[-\frac{\eta_i^2}{1+y_i} \right] \right\} \rightarrow 0. \quad /9/$$

Как будет показано далее, это условие обращения в нуль обратной статической восприимчивости одиночной примеси не может реализоваться ввиду неограниченного роста флуктуаций, $y_i \rightarrow \infty$ /см. /29//. При учете взаимодействия примесей статическая восприимчивость всей примесной системы χ_{ij} определяется уравнением

$$x_i = \mu_i f_i' + \mu_i \sum_{j \neq i} f_{ij} x_j = \sum_j \chi_{ij} f_j', \quad /10/$$

Усредняя в /10/ по конфигурации примесей в узлах $j \neq i$, в линейном приближении по концентрации $c = (N_i/N) \ll 1$ получим:

$$\langle \chi_{ij} \rangle_c = \frac{1}{N} \sum_q e^{iq(\vec{\ell}_i - \vec{\ell}_j)} \frac{\mu}{1 - \mu c f(\vec{q})}, \quad /11/$$

где $f(\vec{q})$ - фурье-компонента взаимодействия $f_{ij}(0)$ в /7/; $\mu = \langle \mu_i \rangle_c$ не зависит от координаты узла $\vec{\ell}_i$ и определяется /9/ с усредненными параметрами $y = \langle y_i \rangle_c$ и $\eta = \langle \eta_i \rangle_c$. Фазовый переход в примесной системе в состояние $\eta \neq 0$ возможен при

$$\chi^{-1}(\vec{q}) = \{ \mu^{-1} - c f(\vec{q}) \} \rightarrow 0, \quad /12/$$

который соответствует однородной поляризации, если $f(\vec{q})$ имеет максимум при $\vec{q} = 0$. Температура перехода T_c определяется уравнением

$$y(T_c) = \left(\frac{\alpha}{1 - \chi_0 - cf(0)} \right)^{2/3} - 1, \quad /13/$$

и равновесные положения примесей

$$\eta^2(T) = (1+y) \ln \left[\frac{\alpha}{(1+y)^{3/2}} \frac{1}{1 - \chi_0 - cf(0)} \right]. \quad /14/$$

Для самосогласованного решения уравнений /13/, /14/ необходимо найти $y(T) = 2b \langle u_i^2 \rangle$, пользуясь функциями Грина.

3. ФУНКЦИИ ГРИНА

Рассмотрим функцию Грина /ФГ/ для примесей

$$G_{ii'}(t-t') = \langle\langle u_i(t); u_{i'}(t') \rangle\rangle, \quad /15/$$

где приняты обычные обозначения для двухвременных функций Грина /8,10/. Уравнение для фурье-компоненты /15/ после исключения смешанной ФГ $\langle\langle Q_q | u_i \rangle\rangle$ может быть записано в виде

$$\begin{aligned} [m\omega^2 - A_0 \Lambda_i(\omega)] G_{ii'}(\omega) = \delta_{ii'} - A_0 \sum_{j \neq i} f_{ij}(\omega) G_{ji'}(\omega) + \\ + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \tilde{\Phi}_i^{(n+1)} \langle\langle u_i^n | u_{i'} \rangle\rangle_{\omega}^{ir}, \end{aligned} \quad /16/$$

где введена эффективная гармоническая силовая постоянная:

$$\Lambda_i(\omega) = 1 - \chi_0(\omega) - \frac{1}{A_0} \Phi''(x_i). \quad /17/$$

Анггармоническое взаимодействие высших порядков, приводящее к затуханию примесной моды, представлено в виде произведения неприводимой (ir) ФГ $\langle\langle u_i^n | u_{i'} \rangle\rangle^{ir}$ на перенормированное в среднем фононном поле взаимодействие, $n \geq 3$ /см./8/ /:

$$\tilde{\Phi}_i^{(n)} = \frac{\partial^n}{\partial x_i^n} \langle \Phi(x_i + u_i) \rangle - \frac{\partial^n}{\partial x_i^n} \tilde{\Phi}(x_i). \quad /18/$$

Дифференцируя ФГ $\langle\langle u_i^n(t); u_{i'}(t') \rangle\rangle$ по второму времени t' , получим для нее уравнение, аналогичное /16/, но без неоднородного члена: $\langle [u_i^n, p_{i'}] \rangle^{ir} = 0$. В результате уравнение /16/ может быть записано в виде уравнения Дайсона /8/:

$$G_{ii'} = G_{ii}^{(0)} + \sum_{jj'} G_{ij}^{(0)} M_{jj'} G_{j'i'}. \quad /19/$$

где нулевая ФГ $G_{ii}^{(0)}(\omega)$ определяется в псевдогармоническом /или s(1) / приближении, соответствующем уравнению /16/ без последнего, анггармонического члена. Массовый оператор в /19/ определяется собственной (р.) частью /не содержащей одиночных линий G^0 / неприводимой ФГ:

$$M_{ij}(\omega) = \sum_{n,m=2}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \tilde{\Phi}_i^{-(n+1)} \tilde{\Phi}_j^{(m+1)} \langle\langle u_i^n | u_j^m \rangle\rangle_{\omega}^{(ir,p)}. \quad /20/$$

Для одиночной примеси в узле i ФГ /19/ имеет вид:

$$G_{ii}^{(1)}(\omega) = [m\omega^2 - A_0 \Lambda_i(\omega) - M_{ii}(\omega)]^{-1}. \quad /21/$$

С учетом взаимодействия примесей ФГ примеси в узле i определяются усредненной по конфигурации примесей в узлах $j \neq i$ функцией /19/. В линейной по концентрации с $\ll 1$ приближении она имеет вид

$$\langle G_{ii}(\omega) \rangle_c = \frac{1}{N} \sum [m\omega^2 - A_0 [\Lambda(\omega) - cf(q, \omega)] - M_q(\omega)]^{-1}, \quad /22/$$

где $M_q(\omega)$ - фурье-образ массового оператора /20/. ФГ /21/ или /22/ определяет среднеквадратичные флуктуации смещений в виде

$$y_j = 2b \int_0^{\infty} d\omega \operatorname{cth} \frac{\omega}{2T} \left[-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{ii}(\omega + i\delta) \right]. \quad /23/$$

Для оценки массового оператора /20/ рассмотрим второй порядок по ренормированному анггармоническому взаимодействию /18/. Пользуясь приближением

$$\langle u_i^n(t) u_j^m \rangle = \delta_{n,m} n! (\langle u_i(t) u_j \rangle)^n,$$

получим

$$\begin{aligned} M_{ij}(\omega) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \tilde{\Phi}_i^{(n+1)} \tilde{\Phi}_j^{-(n+1)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 \dots d\omega_n}{\omega - (\omega_1 + \dots + \omega_n)} \times \\ \times (e^{(\omega_1 + \dots + \omega_n)/T} - 1)^n \prod_{k=1}^n \frac{1}{e^{\omega_k/T} - 1} \left[-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{ij}(\omega_k + i\delta) \right]. \end{aligned} \quad /24/$$

Статическое значение ($\omega=0$) массового оператора в классическом пределе ($T \gg \omega$) имеет оценку:

$$\operatorname{Re} \frac{1}{A_0} M_{ii}(0) = -\frac{\alpha A}{T(1+y)^2} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} \delta_{n+1,2k} \left(\frac{y}{1+y} \right)^{2k}. \quad /24a/$$

В области больших флуктуаций, $y \gg 1$, ангармонические поправки высших порядков малы и можно пользоваться псевдогармоническим приближением /см. /17//.

4. РЕЗОНАНСНЫЕ ЧАСТОТЫ И ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

4.1. Одиночная примесь

Для одиночной примеси ($c \rightarrow 0$) частота резонансных колебаний Ω_0 определяется полюсом ФГ /21/:

$$\nu_0^2 = 1 - \frac{a}{(1+y)^{3/2}} - \text{Re } \chi_0(\nu_0) + \text{Re } \frac{1}{A_0} M_{ii}(\nu_0), \quad /25/$$

где $\nu_0^2 = \Omega_0^2 / \omega_0^2$, $\omega_0^2 = A_0 / m$. В области частот $\Omega_0 \ll \omega_D$, ω_D - характерная частота фононов матрицы, можно воспользоваться статическим приближением для восприимчивости $\text{Re } \chi_0(\nu_0) = \chi_0$ и учесть вклад в поляризацию матрицы χ_0 при выборе параметра A_0 в /1/. Затухание резонансных колебаний, обусловленное их взаимодействием с фононами, в этом случае также мало: $\Gamma(\nu_0) = \text{Im } \chi_0(\nu_0 + i\delta) = (\Omega_0 / \omega_D)^3 \ll 1$. Поэтому в области низких температур, когда ангармоническое затухание также мало, для вычисления $y(T)$ в /23/ можно воспользоваться приближением

$$y(\theta) \approx \frac{\alpha \lambda}{2\nu_0} \text{cth } \frac{\lambda \nu_0}{2\theta}, \quad /26/$$

где $\lambda = \hbar \omega_0 / A$ - квантовый параметр и $\theta = T / A$ - приведенная температура. В области низких температур ($T \rightarrow 0$) для члена $n=3$ в /24/ имеем оценку

$$\text{Re } \frac{1}{A_0} M_{ii}(\nu_0) = - \frac{9}{64} \frac{\alpha^4 \lambda^2}{(1+y)^5 \nu_0^4}. \quad /27/$$

Подставляя в /25/-/27/ параметры $A = 1,46$ мэВ, $A_0 = m \omega_0^2 = 11$ мэВ/Å² и $b = 11,9$ Å⁻², предложенные в /7/ для описания системы Li⁺: KBr, для частоты резонансных колебаний ⁶Li⁺ при T=4,2 К получим:

$$\Omega_0^2 = \omega_0^2 (1 - 0,30 - 0,04) \approx (0,81 \omega_0)^2. \quad /28/$$

При этом $y \approx \alpha \lambda / 2\nu_0 \approx 3,7$ и /27/ дает поправку /-0,04/ в /28/. Полученный результат /28/ несущественно отличается от экспериментального значения $\Omega_0^{\text{exp}} \approx 0,80 \omega_0$. Помимо этого набора параметров, при котором энергия нулевых колебаний значительно превышает высоту центрального горба $E \approx 0,48$ мэВ ($\hbar \Omega_0 / 2E \approx 2,8$) и ангармонизм мал ($\alpha = 3,15$), формулы /25/-/27/ позволяют описать и случай сильного ангармонизма ($\alpha \gg 1$).

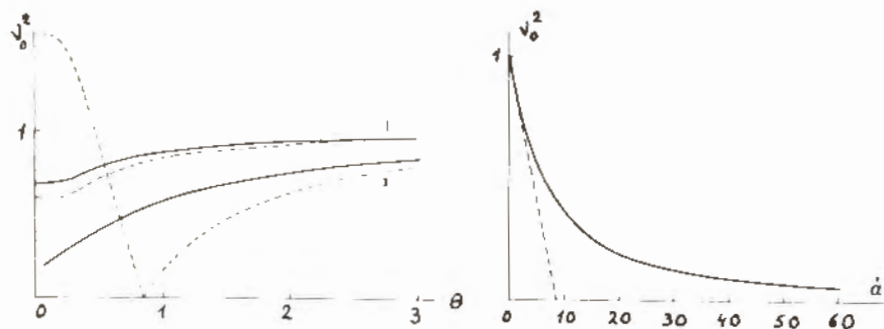


Рис.1. Температурная зависимость частоты резонансной моды $\nu_0(\theta)$ в псевдогармоническом /сплошная линия/ и приближении среднего поля /пунктирная линия/ для двух наборов параметров: I. $\alpha = 3,15$; $\lambda = 1,9$; II. $\alpha = 18,8$, $\lambda = 0,35$.

Рис.2. $\nu_0(a)$ при $T = 0$ в псевдогармоническом /сплошная/ и приближении среднего поля /пунктир/.

Например, выбирая $A = 14,6$ мэВ, $A_0 = 82,5$ мэВ/Å² и $b = 24$ Å⁻², получаем прежнее значение резонансной частоты $\Omega_0 \approx 2,2$ мэВ при отношении $\hbar \Omega_0 / 2E \approx 0,15$ / $E \approx 9,2$ мэВ/ и $\alpha = 8,4$. На рис.1 приведены результаты численного решения уравнений /25/, /26/ в псевдогармоническом приближении, когда вклад $M_{ii}(\nu_0)$ в /25/ не учитывается. Зависимость частоты $\nu_0(\theta)$ приведена для двух наборов параметров: I. $\alpha = 3,15$, $\lambda = 1,9$ и II. $\alpha = 18,8$, $\lambda = 0,35$, которые дают в этом приближении одну и ту же частоту $\Omega_0 = 2,2$ мэВ при $T = 0$. Для сравнения пунктирной линией показана зависимость $\nu_0(\theta)$ при вычислении $y(\theta)$ в /26/ в приближении среднего поля с фиксированной частотой $\nu_0 = 1$. На рис.2 приведена зависимость $\nu_0(a)$ при $T = 0$; пунктирная линия соответствует $\nu_0(a)$ при $y \approx \alpha \lambda / 2 / (\nu_0 = 1$ в /26//.

Полученные результаты позволяют качественно объяснить частото наблюдаемое несоответствие численных расчетов, показывающих достаточно глубокие нецентральные минимумы в потенциале примеси, с наблюдаемым на эксперименте центральным положением примеси /1/. Учет значительных флуктуаций одиночной примеси /26/ при $\nu_0 \rightarrow 0$, $y \sim \nu_0^{-2}$ приводит к перенормировке ангармонической части потенциала в уравнениях /9/, /25/, и решение с мягкой модой, $\nu_0 \rightarrow 0$, не реализуется. В более общем виде вывод о значительной роли флуктуаций примеси следует из общего соотно-

шения /23/. Пользуясь дисперсионными соотношениями для ФГ в классическом пределе $\text{cth}(\omega/2T) \approx 2T/\omega$, получаем:

$$y_i = 2bT \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ii}^{(1)}(\omega + i\delta) \right] = -2bT \text{Re} G_{ii}^{(1)}(0). \quad /29/$$

Обращение в ноль обратной статической восприимчивости, $\mu_i^{-1} = -[\text{Re} G_{ii}^{(1)}(0)]^{-1} \rightarrow 0$, определяющей локальную "мягкую моду" в /9/, приводит согласно /29/ к неограниченному росту флуктуаций примеси и сохраняет ее центральное положение. Поэтому вычисление частоты примесной локальной /или резонансной/ мягкой моды в приближении среднего поля /см., например, /11-13/, которому соответствуют пунктирные кривые на рис.1,2, без самосогласованного учета флуктуаций примеси представляется непоследовательным. Этот вывод согласуется с результатами работы /9/, где было показано отсутствие локализации нецентральной примеси при туннельных переходах с учетом ее взаимодействия с фононами матрицы.

4.2. Фазовый переход в примесной решетке

Условие /12/ соответствует появлению в примесной системе резонансной мягкой моды, определяемой ФГ /22/:

$$\Omega_q^2 = \omega_0^2 \text{Re} [\Lambda(\Omega_q) + M_q(\Omega_q) - cf(q, \Omega_q)] \quad /30/$$

при $q=0$. Температура фазового перехода определяется уравнением /13/, где для $y(T_c)$ можно воспользоваться оценкой

$$y(\theta_c) = \frac{\alpha\lambda}{N} \sum_q \frac{1}{2\nu(q)} \text{cth} \frac{\lambda\nu(q)}{2\theta_c}$$

с частотой мягкой моды $\nu^2(q) = c [f(0) - f(q)] = cf(0) [1 - \gamma(q)]$. В классическом ($T_c \gg \omega_0 \sqrt{cf(0)}$) и квантовом ($T \rightarrow 0$) пределах для /31/ соответственно получаем:

$$y(\theta_c) \approx \frac{\alpha\theta_c}{cf(0)} \gamma_2, \quad \gamma_2 = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{1-\gamma(q)}. \quad /31a/$$

$$y(0) = \frac{\alpha\lambda}{2\sqrt{cf(0)}} \gamma_1, \quad \gamma_1 = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{\sqrt{1-\gamma(q)}}. \quad /31b/$$

В первом случае уравнение /13/ дает температуру фазового перехода

$$T_c = \Lambda\theta_c = c \frac{\phi(0)}{2b\gamma_2} \left[\left(\frac{\alpha}{1-\chi_0} \right)^{2/3} - 1 \right], \quad /32/$$

а во втором случае /13/ определяет критическое значение энергии нулевых колебаний

$$\lambda_c = \frac{2\sqrt{cf(0)}}{\alpha\gamma_1} \left[\left(\frac{\alpha}{1-\chi_0} \right)^{2/3} - 1 \right]. \quad /33/$$

выше которого, $\lambda = (\hbar\omega_0/\Lambda) > \lambda_c$, фазовый переход в системе не происходит даже при $T=0$. В отличие от локального характера мягкой моды для одиночной примеси /ширина резонансного уровня /25/ стремится к нулю при $\nu_0 \rightarrow 0$ / дисперсия мягкой моды при $T = T_c$ в /30/ приводит к конечной величине флуктуаций и возможности фазового перехода.

Более точное вычисление примесной функции Грина при конечной концентрации примесей может быть проведено на основе метода когерентного потенциала, как это было предложено в /14/ для модели сегнетоэлектрика с примесями. Представляет также интерес рассмотрение фазового перехода в этой модели при учете флуктуаций среднего поля, как это было предложено в /15/.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

Предложенная в настоящей работе динамическая модель /2/ решетки с примесями нецентрального типа /1/ описывает резонансные колебания примеси в области сильного ангармонизма при самосогласованном решении системы уравнений /19/-/24/ в методе СФП /8/. Для количественного сопоставления выводов теории с экспериментом /1/, например анализа температурной зависимости частоты и ширины резонансной моды, в модели /2/ необходимо дополнительно учесть вырождение и взаимодействие резонансной моды T_{1u} с модами другой симметрии.

Анализ условий возникновения локальных смещений примеси /9/, /12/ показывает необходимость учета флуктуаций примеси: для одиночной примеси флуктуации неограниченно возрастают за счет локального характера мягкой моды /см. /29//. Этот вывод качественно объясняет экспериментально наблюдаемое центральное положение таких примесей /1/.

При значительной глубине нецентральных минимумов в потенциале примеси, когда в динамике примеси основную роль начинают играть только низколежащие туннельные переходы, развитая теория носит лишь качественный характер, так как использованное в работе приближение СФП не учитывает туннельных переходов, а развитая теория возмущений плохо сходится. Более точное описание в этом предельном случае дает квазиспиновая модель туннелирующей примеси /9/ или обобщенная модель, предложенная в работах /16/.

В заключение авторы благодарят профессоров В.Гетце и Х.Бека за полезные обсуждения и В.Л.Аксенова за критические замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Barker A.S., Jr., Sievers A.J. Rev.Mod.Phys., 1975, Suppl. 2, 47.
2. Кристофель Н.Н. Теория примесных центров малых радиусов в ионных кристаллах. "Наука", 1974.
3. Дейген М.Ф., Глинчук М.Д. УФН, 1974, 114, с.185.
4. Марадудин А.А. Дефекты и колебательный спектр кристаллов. "Мир", М., 1968.
5. Catlow C.R. et al. Phys.Rev., 1978, B18, p.2739.
6. Kahan A.M. et al. Phys.Rev., 1976, B14, p.5422; Holland U., Lüty F. Ferroelectrics, 1977, 17, p.377.
7. Clayman B.P. et al. Phys.Rev., 1971, B3, p.1351.
8. Плакида Н.М. В кн.: Статистическая физика и квантовая теория поля. Под ред. Н.Н.Боголюбова. "Наука", М., 1973; Плакида Н.М., Шиклош Т. Acta Phys.Hung., 1978, 45, p.37.
9. Beck R., Götze W., Prelovsek P. A Theory for the Transition to Self-Trapping in Spin-Phonon Systems. Preprint TU München, 1979.
10. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. ДАН СССР, 1959, 126, с.53; Зубарев Д.Н. УФН, 1960, 71, с.71.
11. Höck K.H., Thomas H. Z.Phys., 1977, B27, p.267.
12. Кристофель Н.Н. ФТТ, 1979, 21, с.895.
13. Schäfer R., Beck H., Thomas H. Z.Phys., 1978, B30, p.223.
14. Аксенов В.Л., Бретер Х., Плакида Н.М. ФТТ, 1978, 20, с.1469.
15. Stamenkovic S. et al. Phys.Rev., 1976, B14, p.5080; ОИЯИ, P17-11856, Дубна, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 марта 1980 года.