объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-80-204

В.Л.Аксенов, Ю.Шрайбер

ИЗОЛИРОВАННАЯ И ИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТИ В ПСЕВДОСПИН-ФОНОННОЙ СИСТЕМЕ

Направлено в ТМФ

1980

1. Введение

Среди твердых тел имеется широкий класс соединений, в которых можно выделить подсистему с дискретными состояниями, локализованными на узлах решетки. Это могут быть электронные, молекулярные, вибронные, экситонные и другие состояния. В простейших случаях их можно описать с помощью двухуровневой системы в формализме псевдоспиновых переменных. Типичными примерами таких соединений (см.обзор[1]) являются сегнетоэлектрики с водородными связями типа KH_2PO_4, редкоземельные соединения на основе Dy и Pr, соединения с неустойчивостью решетки относительно перераспределения электронной плотности типа Fe_3O_4, а также некоторые сверхпроводники с высокой температурой перехода[2]. В таких соединениях при определенной температуре обычно наблюдается фазовый переход, в возникновении которого важную роль играет связь двухуровневой системы с решеткой, или, другими словами, псевдоспин-фононная связь.

В настоящей работе рассмотрена модель фононной системы, связанной с двухуровневой подсистемой, с примесями замещения в последней. Эта модель является простейшим обобщением рассматриваемых ранее моделей такого типа[1,3-7] и позволяет учесть нулевые колебания и флуктуации параметра порядка в фононной подсистеме уже в приближении типа хаотических фаз. Показано, что для данной модели статическая изолированная восприимчивость, вычисленная методом двухвременных функций Грина[8], может не совпадать со статической изотермической восприимчивостью. Обычно это свойство модели, обусловленное неэргодичностью двухуровневой системы[9] (вопрос о связи с термостатом требует отдельного рассмотрения[10,11]), не учитывают, используя для описания системы изолированную восприимчивость, в то время как в эксперименте измеряется именно изотермическая.

Различие восприимчивостей необходимо учитывать и при вычислении корреляционных функций на основе спектральных представлений, поскольку с ним связана особенность спектральной интенсивности при нулевой частоте (обсуждение этого вопроса см. в /12/). Вычисление фононной корреляционной функции с учетом этой особенности позволяет самосогласованным образом описать модель и приводит к новым физическим результатам: появлению дополнительной концентрационной зависимости связанных псевдоспин-фононных возбуждений и центрального пика в сечении рассеяния нейтронов или света. При структурном усреднении использовано приближение среднего локатора. Это приближение в данной постановке задачи приводит в приближении типа хаотических фаз для функций Грина к тем же результатам, что и более сложные расцепления /6,7/. Полученные результаты обсуждаются в связи с сегнетоэлектриком дигидрофосфатом калия KH_2PO_4, где изотопическое замещение протона на дейтерий значительно меняет картину фазового перехода.

2. Изолированная восприимчивость модели

Рассмотрим связанную псевдоспин-фононную модель, в которой каждая из подсистем, псевдоспиновая и фононная, по отдельности может быть неустойчивой /13/:

$$H = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m} - \frac{A}{2} x_i^2 + \frac{B}{4} x_i^4 \right] + \frac{1}{4} \sum_{ij} \Phi_{ij} (x_i - x_j)^2 -$$

$$- \sum_i \Gamma_i S_i^x - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_{ij} T_{ij} x_i S_j^z,$$

где A,B и Φ_{ij} -параметры модели, определяющие характер неустойчивости данной фононной моды с эффективной массой m.

Операторы псевдоспинов S_i^x, S_i^z обладают свойствами оператора спина $S = 1/2$. В отличие от /13/ двухуровневую подсистему будем рассматривать как смесь распределенных хаотически по узлам решетки двух состояний: $\Gamma_i = \{\Gamma_1, \Gamma_2\}$, где $\Gamma_1 \neq 0, \Gamma_2 = 0$. Для определенности будем рассматривать дипольные системы, хотя общее рассмотрение не зависит от характера взаимодействия. Представим взаимодействие в виде[14]: $J_{ij} = \mu_i j_{ij} \mu_j$ и $T_{ij} = \mu_i t_{ij}$, где μ_i –дипольные моменты, а j_{ij}, t_{ij} – не зависящие от распределения примесей геометрические параметры.

Для описания модели (1) рассмотрим запаздывающую коммутаторную функцию Грина (ФГ) смещений $u_i(t)=x_i(t)-\langle x_i\rangle$, используя обычные обозначения[8]. В приближении самосогласованного фононного поля[15] для фононной подсистемы: $\langle\langle u_i^3 ; u_j \rangle\rangle \approx 3\langle u_i^2\rangle \langle\langle u_i ; u_j \rangle\rangle$, и в приближении Тябликова[8,12] для спиновой подсистемы: $\langle\langle S_n^\alpha S_m^\beta ; S_\ell^\gamma \rangle\rangle = \langle S_n^\alpha \rangle \langle\langle S_m^\beta ; S_\ell^\gamma \rangle\rangle + \langle S_m^\beta \rangle \langle\langle S_n^\alpha ; S_\ell^\gamma \rangle\rangle$,

получаем уравнение движения для ФГ

$$D_{ij}(\omega) = \langle\langle u_i ; u_j \rangle\rangle_\omega :$$

$$D_{ij}(\omega) = D^\circ_{ij}(\omega) + \sum_{\ell\ell'} D^\circ_{i\ell}(\omega) [\sum_{nm} t_{n\ell} G^{zz}_{nm}(\omega) t_{m\ell'}] D^\circ_{\ell' j}(\omega), \tag{2}$$

где D°_{ij} –фононный пропагатор при $T_{ij} = 0$,

$$[D^\circ_{ij}(\omega)]^{-1} = (m\omega^2 - \Lambda_i - \Phi_0)\delta_{ij} + \Phi_{ij} , \tag{3}$$

Λ_i –эффективный одночастичный потенциал, определяющий щель в фононном спектре,

$$\Lambda_i = 3B(\langle u_i^2 \rangle + \langle x_i \rangle^2) - A . \tag{4}$$

ФГ спиновых отклонений $G^{zz}_{nm}(\omega) = \mu_n \langle\langle \delta S_n^z ; \delta S_m^z \rangle\rangle \mu_m$ в приближении Тябликова удовлетворяет уравнению

$$G^{zz}_{nm}(\omega) = g_n(\omega)\delta_{nm} - g_n(\omega) \sum_{\ell \neq n} \tilde{j}_{n\ell}(\omega) G^{zz}_{\ell m}(\omega) , \tag{5}$$

где $g_n(\omega)$ – одночастичная восприимчивость,

$$g_n(\omega) = \frac{\mu_n^2 \Gamma_n \langle S_n^x \rangle}{\omega^2 - \Gamma_n^2 - h_{zn}^2 + \mu_n^2 \Gamma_n^2 \langle S_n^x \rangle \tilde{j}_{nn}(\omega)} . \tag{6}$$

$\tilde{j}_{\ell n}$ – эффективное спин-спиновое взаимодействие:

$$\tilde{j}_{nm}(\omega) = j_{nm} - \sum_{\ell\ell'} t_{n\ell} D^\circ_{\ell\ell'}(\omega) t_{\ell' m} ; \quad j_{nn} = 0, \tag{7}$$

и h_{zn} – эффективное среднее продольное поле в спиновой подсистеме :

$$h_{zn} = \mu_n \sum_\ell (j_{n\ell} \mu_\ell \langle S_\ell^z \rangle + t_{n\ell} \langle x_\ell \rangle). \tag{8}$$

В отличие от обычного подхода в ПХФ [5] мы в (5) выделили все одночастичные члены в функцию $g_n(\omega)$.

Чтобы решить уравнение (2), необходимо сделать структурное усреднение в (5). При выполнении последнего мы используем приближение среднего локатора (ПСЛ). Хорошо известно, что ПСЛ является удобным в качестве исходного приближения в случае двух различных в динамическом смысле возбуждений [16] при наличии разделенных непересекающихся зон. Именно эта ситуация реализуется в нашем случае, где при $\Gamma_i \neq 0$ имеется зона возбуждений, отделенная щелью от локализованного при $\omega = 0$ диффузионного возбуждения ($\Gamma_i = 0$). В ПСЛ уравнение (5) принимает вид

$$\langle G^{zz}_{nm}(\omega)\rangle_c = \langle g_n(\omega)\rangle_c\,\delta_{nm} - \langle g_n(\omega)\rangle_c \sum_{\ell \neq n} \tilde{j}_{n\ell}(\omega)\langle G^{zz}_{\ell m}(\omega)\rangle_c \,, \qquad (9)$$

где $\langle\ \rangle_c$ означает конфигурационное среднее по всем возможным распределениям N_1 состояний среди N узлов решетки при заданной концентрации c_1 и $c_2 = 1 - c_1$.

Введем фурье-преобразование

$$\langle G_{nm}(\omega)\rangle_c = \frac{1}{N}\sum_q e^{iq(R_n - R_m)}\langle G_q(\omega)\rangle_c \,, \qquad (10)$$

где q лежит в первой зоне Бриллюэна. Параметр взаимодействия $j_{nm}(\omega)$ (7) при $n \neq m$ принимает вид

$$\tilde{j}_q(\omega) = j_q + \frac{t_q^2}{\omega_q^2 - \omega^2} - \frac{1}{N}\sum_q \frac{t_q^2}{\omega_q^2 - \omega^2} \,, \qquad (11)$$

где ω_q – энергия возбуждений в фононной подсистеме, определяемая полюсами (3):

$$\omega_q^2 = \Delta + \Phi_0 - \Phi_q \,. \qquad (12)$$

Функция отклика g_n (6) может быть представлена в виде $g_n = x_1 g_1 + x_2 g_2$, где $x_{1,2}$ – операторы проектирования на состояния 1 и 2. Так как $\Gamma_2 = 0$, то $\langle g_n\rangle_c = c_1 g_1$. Используя этот факт, а также (10), получаем решение уравнения (9) в виде

$$\langle G^{zz}_q\rangle_c = c_1\{[g_1(\omega)]^{-1} - c_1\tilde{j}_q(\omega)\}^{-1}. \qquad (13)$$

Это уравнение с учетом (6), (11) удобно переписать:

$$\langle G_q^{zz}(\omega)\rangle_c^{-1} = \mathcal{G}_q^{-1}(\omega) + t_q^2 D_q^\circ(\omega), \tag{14}$$

где

$$\mathcal{G}_q^{-1}(\omega) = \frac{1}{c_1}\left[\frac{\omega^2 - \Gamma_1^2 - h_{z1}^2}{\mu_1^2 \Gamma_1 \langle S_1^x \rangle} - c_2 \sum_q \frac{t_q^2}{N(\omega_q^2 - \omega^2)} - c_1 j_q\right]. \tag{15}$$

Используя (13), получаем окончательное выражение для фононной ФГ(2):

$$\langle D_q(\omega)\rangle_c^{-1} = [D_q^\circ(\omega)]^{-1} + t_q^2 \mathcal{G}_q(\omega). \tag{16}$$

Заметим, что функциональное соотношение (13) между локальной, $g_1(\omega)$, и коллективной, $\langle G_q^{zz}\rangle_c$, функциями отклика имеет тот же вид, что и в ПХФ. Отличие состоит в учете члена самодействия спинов за счет связи с решеткой в (6) и (11) (см. также[6,7]). Кроме этого, наш подход позволяет учесть флуктуации параметра порядка уже в первом порядке теории, поскольку в данном случае, в отличие от предыдущих рассмотрений моделей типа (1), фононные частоты (12), (4) зависят от корреляционной функции смещений $\langle u_i^2 \rangle$.

ФГ (16) определяет изолированную восприимчивость системы (1), ее полюса позволяют найти возбуждения в модели. Вводя энергию возбуждений в псевдоспиновой подсистеме

$$\epsilon_q^2 = \Gamma_1^2 + h_{1z}^2 - c_1 \mu_1 \Gamma_1 \langle S_1^x \rangle j_q, \tag{17}$$

из (16) получаем условие для определения энергии возбуждений в модели (1):

$$(\omega^2 - \epsilon_q^2 - c_2 \mu_1 \Gamma_1 \langle S_1^x \rangle \sum_{q'} \frac{t_{q'}^2}{\omega_{q'}^2 - \omega^2}(\omega^2 - \omega_q^2) + \tag{18}$$

$$+ c_1 \mu_1 \Gamma_1 \langle S_1^x \rangle t_q^2 = 0.$$

Температурное поведение возбуждений описывается системой уравнений (12), (17), (18), (4), (8) и определяется термодинамическими средними $\langle S_i^\alpha \rangle$, $\langle x_i \rangle$ и $\langle u_i^2 \rangle$. При вычислении термодинамических средних в методе двухвременных ФГ основываются на спектральных теоремах[8]. В общем случае спектральная интенсивность должна быть представлена в виде[12] $J_{BA}(\omega) = J_{BA}^{(-)}(\omega) + C\delta(\omega)$, где часть $J_{BA}^{(-)}(\omega)$ $(J_{BA}^{(-)}(\omega=0) = 0)$ вычисляется с помощью коммутаторной ФГ, а константа C может быть представлена как[17,18] $C = T(\chi^T - \chi^{is})$, $\chi^{is} = -G_{BA}^{(-)}(\omega=0)$ – статическая изолированная, а χ^T – изотермическая восприимчивость. Таким образом, мы приходим к известной проблеме вычисления восприимчивостей (см.[9] и цитированную там литературу). Как было отмечено Кубо[19], восприимчивости совпадают, если система эргодична. Обычно этот вопрос обходят, полагая явно или неявно, что система является эргодичной.

3. Изотермическая восприимчивость

Статическая изотермическая восприимчивость может быть вычислена из соотношения $(\chi^T)^{-1} = (\partial^2 F/\partial P^2)_{P_0}$, где F – свободная энергия, P – параметр порядка (например, спонтанная поляризация) системы. В нашем случае $P \sim b_i = \langle x_i \rangle$. Рассмотрим свободную энергию для гамильтониана (1). В соответствии с приближением для ФГ (2) F найдем на основе вариационного принципа Боголюбова: $F \le F_1 = F_0 + \langle H - H_0 \rangle_{H_0}$, где F_0 – свободная энергия, вычисленная по гамильтониану H_0, который возьмем в виде $H_0 = H_ф + H_c$; $H_ф$ – эффективный гамильтониан фононной подсистемы[15], вычисление фононной ФГ с которым приводит к уравнению (3); H_c – эффективный гамильтониан спиновой подсистемы, для которого спиновая ФГ определяется уравнением (5). Свободная энергия имеет вид

$$F_1 = F_ф + F_c = \frac{T}{N}\sum_q \ln 2\,\mathrm{sh}\,\frac{\omega_q}{T} - B\langle u_i^2\rangle^2 - \sum_i\left(\frac{A}{2}b_i^2 + \frac{B}{4}b_i^4\right)$$

$$+\frac{1}{4}\sum_{ij}\Phi_{ij}(b_i - b_j)^2 - T\sum_i \ln 2\,\mathrm{ch}\,\frac{h_i}{2T} + \frac{1}{2}\sum_{ij} j_{ij}\langle S_i^z\mu_i\rangle\langle S_j^z\mu_j\rangle, \tag{19}$$

где ω_q имеет вид (12), а h_i – среднее поле в спиновой системе

$$h_i^2 = \Gamma_i^2 + h_{iz}^2 + \mu_i^2 \Gamma_i \langle S_i^x \rangle \tilde{j}_{ii}(0). \qquad (20)$$

Из условия стационарности свободной энергии относительно параметров $\langle S_i^z \rangle$ и $b_i = \langle x_i \rangle$ получаем уравнения для средней "намагниченности":

$$\langle S_i^z \rangle = \frac{h_{iz}}{2h_i} \operatorname{th} \frac{h_i}{2T}, \qquad (21)$$

и среднего смещения в решетке:

$$(-A + B b_k^2 + 3B \langle u_k^2 \rangle) b_k + \sum_i \Phi_{ki}(b_k - b_i) = \sum_i \langle S_i^z \rangle t_{ik}. \qquad (22)$$

Вторая вариация F_1 по b_k дает обратную изотермическую восприимчивость в виде

$$(\chi_{ij}^T)^{-1} = -[D_{ij}^{\circ}(\omega=0)]^{-1} - \sum_{nm} t_{in} \chi_{nm}^{T(c)} t_{mj}, \qquad (23)$$

где спиновая изотермическая восприимчивость удовлетворяет уравнению

$$\chi_{nm}^{T(c)} = a_n \delta_{nm} + a_n \sum_{\ell} j_{n\ell} \chi_{\ell m}^{T(c)}, \qquad (24)$$

$$a_n = \frac{\mu_n^2 \Gamma_n \langle S_n^x \rangle + \mu_n h_{zn}^2 d_n / T}{h_n^2}; \quad d_n = \frac{1}{4}[1 - (\operatorname{th}\frac{h_n}{2T})^2]. \qquad (25)$$

Выполняя в (24) структурное усреднение, соответствующее ПСЛ для (9), и переходя к фурье-преобразованию (10), получаем окончательное выражение изотермической восприимчивости:

$$\langle \chi_q^T \rangle_c^{-1} = -\langle D_q(\omega=0) \rangle_c^{-1} - t_q^2 \langle \chi_q^{T(c)} \rangle_c, \qquad (26)$$

где

$$\langle \chi_q^{T(c)} \rangle_c^{-1} = h_1^2 [c_1 \mu_1^2 (\Gamma_1 \langle S_1^x \rangle + h_{z1}^2 \beta d_1) + c_2 \mu_2^2 \beta d_2 h_{z2}^2]^{-1} - (j_q - \frac{1}{N} \sum_q \frac{t_q^2}{\omega_q^2 - \omega^2}). \qquad (27)$$

Если мы теперь сравним выражения (26), (27) с изолированной восприимчивостью $\chi_q^{is} = -D_q(\omega = 0)$, то увидим, что в общем случае восприимчивости χ_q^T и χ_q^{is} отличаются и, следовательно, корреляционная функция $<u_i^2>$, как было отмечено в конце раздела 2, должна вычисляться по формуле

$$<u_i^2> = \frac{1}{mN} \Sigma \int_0^\infty d\omega \, \mathrm{cth} \frac{\omega}{2T} [-\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} <D_q(\omega + i\epsilon)>_c] + K_{ii}, \quad (28)$$

где $K_{ii} = (T/N) \sum_q (<\chi_q^T>_c - <\chi_q^{is}>_c)$.

Как видно, различие восприимчивостей обусловлено особенностями двухуровневой подсистемы и зависит от концентрации примесей. В случае беспримесной системы, используя выражения (26), (27) и (15), (16), получаем

$$K_q = \frac{h_z^2 \cdot d \cdot h^2}{\epsilon_q^2(\epsilon_q^2 - h_z^2 (d/T) j_q)}. \quad (29)$$

При $\Gamma_i = \Gamma \neq 0$, используя (8), (17), (20) и d из (25), можно видеть, что в парафазе $K_q = 0$, так как $h_z = 0$. Ниже температуры фазового перехода T_c $K_q \neq 0$ и при $T \to 0$ $K_q \to 0$. При $\Gamma_i = \Gamma = 0$ K_q(29) ведет себя в зависимости от температуры уже по-иному. А именно, при $T \to 0$ $K_q \to 0$, а при $T \to T_c$ K_q возрастает и при $T > T_c$ остается конечной величиной.

Можно сделать вывод, что в беспримесной системе $\Gamma_i = \Gamma \neq 0$ изотермическая и изолированная восприимчивости совпадают в парафазе и отличаются в феррофазе, при наличии же примесей с $\Gamma_i = 0$ они отличаются как в ферро-, так и в парафазе. Фазовый переход в системе характеризуется обращением в ноль обратной статической восприимчивости. Таким образом, в чистой системе температуры обращения в ноль $(\chi^T)^{-1}$ $(\chi^{is})^{-1}$ совпадают, однако при наличии примесей это равенство уже не выполняется. Этот факт необходимо учитывать при сопоставлении результатов вычислений с экспериментальными данными, поскольку последние получаются путем измерений изотермической восприимчивости.

4. Влияние примесей на динамические характеристики модели

Чтобы связать наше рассмотрение с конкретной физической системой, рассмотрим коллективные возбуждения в сегнетоэлектрике KH_2PO_4, где изотопический эффект значителен: в результате дейтерирования температура фазового перехода меняется от 123°K до 222°K. Псевдоспиновая часть гамильтониана (1) здесь описывает подсистему водородных связей, при этом $\Gamma_i \neq 0$ соответствуют туннелирующему в потенциале с двумя минимумами протону, а $\Gamma_i = 0$ – не туннелирующему дейтрону. В обычном подходе, основанном на модели Кобаяши[3] и ПХФ, фононподобная мода ω_+ уменьшается с ростом концентрации дейтерия[5] в противоречии с экспериментом. Рассмотрим уравнение (16). Полагая для упрощения задачи $\omega_q = \omega_0$ для всех q, получаем два решения:

$$2\omega^2_{q\pm} = (\omega_0^2 + \epsilon_q^2) \pm [(\omega_0^2 - \epsilon_q^2)^2 + 8\mu_H\Gamma_H \langle S_H^x\rangle (c_H t_q^2 + c_D \frac{1}{N}\sum_q t_q^2)]^{1/2}. \tag{30}$$

При условии $\omega_0 > \epsilon_q$ частота ω_{q+} соответствует фононподобной моде, а ω_{q-} – моде туннелирования. Из уравнения (30) следует, что обе частоты, $\omega_+(q=0)$ и $\omega_-(q=0)$, могут увеличиваться с ростом концентрации дейтерия, если $(1/N)\sum_q t_q^2 > t_q^2$. Этот результат был получен также в работе[6], где с помощью расцепления второго порядка, кроме поправки к динамической связи между псевдоспинами (11), учтены главные поправки в одночастичной восприимчивости за счет фононных флуктуаций. В обычном ПХФ член $(1/N)\sum_q t_q^2$ не появляется и ω_+ уменьшается с увеличением числа примесей.

В нашем подходе имеется еще один механизм увеличения частоты с концентрацией примесей. Этот механизм обусловлен статическими флуктуациями в фононной системе, вызванными связью с разупорядоченной псевдоспиновой подсистемой. Для упрощения анализа рассмотрим взаимодействие вида $\Phi_{ij} = \Phi_0/N$, $j_{ij} = j_0/N$, и $t_{ij} = t_0\delta_{ij}$. В парафазе (12), (4) и (17) принимают тогда вид

$$\omega^2_{q=0} = (3B\langle u^2\rangle_c - A)/m \equiv \Delta/m\ ; \quad \omega^2_{q\neq 0} = (\Phi_0 + \Delta)/m \equiv \omega_0^2\ ,$$

$$\epsilon^2_{q=0} = \Gamma_H(\Gamma_H - c_H\mu_H^2 \langle S_H^x\rangle j_0) = \delta\ ;\ \epsilon_0^2 = \Gamma_H^2,\ \langle S_H^x\rangle = \frac{1}{2}\,\mathrm{th}\,\frac{\Gamma_H}{2T}\ . \quad (31)$$

Для корреляционной функции смещений (28) с учетом (30), (31) вблизи фазового перехода ($T \gg \omega_\pm$ и $\mathrm{cth}\,x \sim 1/x$) получаем выражение

$$\langle u^2\rangle_c = \frac{T}{m}\,\frac{\epsilon_0^2}{\omega_+^2\omega_-^2} + c_D\,\frac{\mu_D t_0^2}{4m^2\omega_0^4}\ . \quad (32)$$

В случае слабой связи t_0 из (30), (32) получаем, что $\omega_+\ (q=0)$ будет возрастающей функцией примесей дейтерия при выполнении следующего условия:

$$\lambda > \lambda_c\ ;\qquad \lambda_c \sim \left(\frac{\mu_H}{\mu_D}\right)^2 \frac{\Gamma_H}{\Omega_0}\,\frac{\omega_0^2}{\omega^2_{q=0}}\ , \quad (33)$$

где $\lambda = \sqrt{A/m}/u_0$; $u_0 = A^2/4B$ – высота потенциального барьера в одночастичном потенциале (1); $\Omega_0 = \sqrt{A/m}$.

Как видно, λ_c увеличивается, когда $T \to T_c$. Для KH_2PO_4 это означает, что возрастание ω_+ с ростом концентрации примесей будет иметь место при условии, что эффективный одночастичный потенциал в фононной системе является слабогармоническим с одним минимумом.

Другим интересным следствием статических флуктуаций является появление центрального пика (ЦП) в сечении рассеяния нейтронов или света. Действительно, последнее (см., например, [20]) пропорционально спектральной интенсивности корреляционной функции смещений. Поэтому в общем случае оно будет содержать слагаемое $K\delta(\omega)$. Интенсивность ЦП определяется константой K (см. раздел 3). Используя (16), (26), находим, что в парафазе

$$K_q = \frac{t_q^2}{4(m\omega_q^2)^2}\cdot\frac{c_D\cdot\mu_D^2}{(1-\bar a\, j_q)(1-\bar g\, j_q)}\ , \quad (34)$$

где

$$\bar g = c_H\mu_H^2 \langle S_H^x\rangle \Gamma_H\ ,\qquad \bar a = \bar g + c_D\mu_D^2/4T.$$

Таким образом, интенсивность рассеяния пропорциональна концентрации и возрастает при приближении к T_c. В рассматриваемом приближении нет возможности обсуждать ширину ЦП (см., например,[21]). Заметим, однако, что примеси изинговского типа в любом приближении будут давать статический ЦП (упругое рассеяние), поскольку для этой модели всегда есть интеграл движения - оператор S_i^z, а следовательно, и особенность в спектральной интенсивности.

Авторы признательны Н.М.Плакиде за критические замечания.

Литература

1. Yamada Y. Ferroelectrics, 1977, 16, p.49.
2. Ngai K.L., Reinicke T.L. Phys.Rev.B., 1977, 16, p.1077; Vujičič G. et al. Phys.Lett., 1979, 73A, p.439.
3. Villain J.,Stamenkovič S. Phys.stat.sol., 1966, 15, p.585; Kobayashi K.K. J.Phys.Soc.Jap., 1968, 24, p.497; Стасюк И.В., Левицкий Р.Р. УФЖ, 1970, 15, с.460.
4. Консин П.И., Кристофель Н.Н. ФТТ, 1972, 14, 2873; Изв. АН СССР, сер. физ., 1975, 39, с. 650.
5. Lage E.J.S., Stinchcombe R.B. J.Phys.C., 1976, 9, p.3681.
6. Pirc R., Prelovšek P. Phys.Rev.B., 1977, 15, p.4303.
7. Левицкий Р.Р., Сороков С.И. Препринт ИТФ-78-152Р, Киев, 1979.
8. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. ДАН СССР, 1959, 126, с. 53; Зубарев Д.Н. УФН, 1960, 71, с.71.
9. Pirc R., Dick B.G. Phys.Rev.B., 1974, 9, p.2701.
10. Калашников В.П. ОИЯИ, Р4-7803, Дубна, 1974.
11. Thomas H. In: Anharmonic Lattices, Structural Transitions and Melting. Ed. T.Riste, Noordhoff, Leiden, 1974, p.231.
12. Рудой Ю.Г. В сб.: Статистическая физика и квантовая теория поля, ред. Н.Н.Боголюбов, "Наука" М., 1973, с.97.

13. Аксенов В.Л., Шрайбер Ю., Изв. АН СССР, сер.физ. (1979), 43, 1593.
14. Вакс В.Г., Зейн Н.Е., ФТТ (1975), 17, 1617.
15. Аксенов В.Л., Плакида Н.М., ТМФ,(1978), 35,104.
16. Velicky B., Kirkpatrick S., Ehrenreih H. Phys.Rev., 1968, 175, p.747.
17. Kwok P.C. and Schultz T.D. J.Phys.C., 1969, 2, p.1196.
18. Suzuki M. Physika, 1971, 651, p.271.
19. Kubo R. J.Phys.Soc.Jap., 1957, 12, p.570.
20. Аксенов В.Л., Стаменкович С. ФТТ, 1977, 19, с.1366.
21. Кащеев В.Н. Препринт ИФ АН Латв. ССР, ЛАФИ-009, Саласпилс, 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел
13 марта 1980 года.