объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-80-602

Н.М.Плакида

МОДЕЛЬ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА С БОЛЬШИМ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫМ АНГАРМОНИЗМОМ

Направлено в журнал "Физика низких температур"

1980

1. ВВЕДЕНИЕ

Сегнетоэлектрики /СЭ/ типа порядок-беспорядок и типа смещения с точки зрения динамики решетки различаются величиной ангармонического взаимодействия критической моды: в первом случае характерен сильный ангармонизм, во втором - слабый [1,2]. Экспериментально это различие проявляется в малой величине константы Кюри-Вейса C и узкой температурной области смягчения критической моды в первом случае и в большой величине C и широкой области применимости закона Кюри-Вейса во втором случае /см. [1] §32/. Поскольку применение обычной теории возмущения, эффективно работающей для СЭ типа смещения, становится невозможным в случае сильного ангармонизма, то при описании СЭ типа порядок-беспорядок обычно используются псевдоспиновые модели, учитывающие лишь низшие энергетические состояния [2,1]. В некоторых случаях, однако, может реализоваться промежуточная ситуация: критические колебания могут быть сильно ангармоническими, но учет только низших состояний недостаточен. В определенном смысле можно говорить о переходе от СЭ типа порядок-беспорядок к СЭ типа смещения. Такой переход, например, реализуется для внецентровых примесей в ионных кристаллах /типа Li^+ в KCl /, где небольшое изменение постоянной решетки /~ 0,5%/ при действии внешнего давления переводит туннелирующую внецентровую примесь в узельное положение с низкочастотной резонансной модой [3].

В настоящей работе предложена модель СЭ с сильным ангармонизмом, фазовый переход в которой и динамика решетки исследованы на основе метода самосогласованного фононного поля /СФП/ [4]. В отличие от подобных моделей, где для описания ангармонического взаимодействия используется одночастичный потенциал типа x^4 /см., например, [5] /:

$$U_1(x) = -\frac{A}{2}x^2 + \frac{B}{4}x^4\,, \qquad /1/$$

в настоящей работе рассмотрен потенциал гауссовского типа /см., например, [6] /:

$$U_2(x) = \frac{A_0}{2}x^2 + \frac{A_0\alpha}{2b}e^{-bx^2} = \frac{A_0}{2}x^2 + \phi(x)\,. \qquad /2/$$

При $\alpha > 1$ потенциал /2/ имеет два минимума глубиной $E_0 = (A_0/2b)[\alpha - 1 - \ln\alpha]$ с расстоянием между ними $2x_0$, где $x_0^2 = (1/b)\ln\alpha$. В случае сильного ангармонизма, $\alpha \gg 1$, этот потенциал не может быть аппроксимирован первыми членами разложения $\phi(x)$ в виде /1/. Характерной особенностью потенциала /2/ по сравнению с /1/ является несущественная роль ангармонического взаимодействия $\phi(x)$ в области высоких температур /когда среднеквадратичные смещения $\langle u^2 \rangle \gg (1/b)$ /, и поэтому его можно назвать потенциалом с низкотемпературным ангармонизмом. /В случае большой энергии нулевых колебаний, $\hbar\omega_0 \gtrsim E_0$, потенциал $\phi(x)$ является слабоангармоническим и в области низких температур/. В результате этой особенности потенциала в случае сильного ангармонизма, $\alpha \gg 1$, область температурного смягчения критической моды оказывается узкой и, как показано в работе, фазовый переход в модели при описании его в методе СФП качественно согласуется с переходом в псевдоспиновой модели в квантовом пределе низких температур. Аналогичное рассмотрение для примесей внецентрового типа с потенциалом /2/ было проведено в работе [7].

2. ГАМИЛЬТОНИАН МОДЕЛИ И УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

Пользуясь представлением локальной нормальной координаты [2], гамильтониан модели СЭ запишем в виде

$$H = \sum_i \{ \frac{p_i^2}{2m} + U(s_i) \} + \frac{1}{4} \sum_{ij} \varphi_{ij} (s_i - s_j)^2 , \qquad /3/$$

где p_i, s_i - локальные нормальные импульс и координата критической моды [2], m - приведенная масса, φ_{ij} - взаимодействие смещений в разных элементарных ячейках, $i \neq j$. Одночастичный потенциал $U(s_i)$ выбран в виде /2/. Для определения равновесных положений $x_i = \langle s_i \rangle$ вычислим свободную энергию:

$$F = -T \ln Sp(e^{-H/T}) ,$$

и составим уравнение:

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = Sp\{e^{-H/T} \frac{\partial H}{\partial x_i}\} / Sp\{e^{-H/T}\} = \langle \frac{\partial H}{\partial x_i} \rangle = 0 . \qquad /4/$$

При вычислении средних $\langle \ldots \rangle$ по колебаниям $u_i = s_i - x_i$ от ангармонической части потенциала $\phi(s)$ в /2/ воспользуемся псевдогармоническим приближением метода СФП [4], когда в кумулянтном разложении учитываются лишь среднеквадратичные флуктуации $y_i = 2b\langle u_i^2 \rangle$:

$$\tilde{\phi}(x) = \langle \phi(x+u) \rangle = \exp\{ \frac{1}{2} \langle u^2 \rangle \nabla_x^2 \} \phi(x) = \qquad /5/$$

$$= \frac{A_0}{2b} \frac{\alpha}{\sqrt{1-y}} \exp\{-x^2 \frac{b}{1+y}\} .$$

В этом приближении уравнение /4/ принимает вид

$$x_i \{1 - \frac{\alpha}{(1+y_i)^{3/2}} e^{-x_i^2 \frac{b}{1+y_i}} \} + \sum_j f_{ij}(x_i - x_j) = 0, \qquad /6/$$

где введено безразмерное взаимодействие $f_{ij} = \varphi_{ij}/A_0$. Появление ненулевых решений ($x_i \neq 0$) возможно при достаточно низкой температуре $T < T_c$, определяемой из уравнения

$$y(T_c) = \alpha^{2/3} - 1 . \qquad /7/$$

При этом температурная зависимость однородного параметра порядка $x_i = x$ находится из уравнения /6/ в виде

$$\eta = \frac{x}{x_0} = [\frac{1+y}{\ln\alpha} \ln \frac{\alpha}{(1+y)^{3/2}}]^{1/2} . \qquad /8/$$

Для самосогласованного решения уравнений /7/, /8/ необходимо найти температурную зависимость среднеквадратичных флуктуаций $y(T) = 2b\langle u^2 \rangle$, пользуясь, например, методом функций Грина.

3. МЯГКАЯ МОДА И ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

Для определения фононного спектра в модели /3/ введем функцию Грина /ФГ/ для смещений

$$G_{ik}(t-t') = \langle\langle u_i(t) ; u_k(t') \rangle\rangle , \qquad /9/$$

где приняты обычные обозначения для двухвременных функций Грина[8]. Составляя уравнения движения для ФГ /9/ на основе метода СФП[4], для фурье-компоненты ФГ получим:

$$[m\omega^2 - A_0 \Delta] G_{ik}(\omega) = \delta_{ik} + \sum_j \varphi_{ij} [G_{ik}(\omega) - G_{jk}(\omega)] + \qquad /10/$$

$$+ \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \Phi^{(n+1)} \langle\langle u_i^n | u_k \rangle\rangle^{(ir)} ,$$

где введена псевдогармоническая силовая постоянная

$$A_0\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle U(x+u)\rangle = A_0 + \tilde{\phi}''(x) . \qquad /11/$$

Ангармоническое взаимодействие высших порядков ($n \geq 3$), приводящее к затуханию фононов, представлено последним членом в /10/, где

$$\Phi^{(n)} = \frac{\partial^n}{\partial x^n}\tilde{\phi}(x) = \frac{A_0}{2b}\,\frac{a}{\sqrt{1+y}}\,\frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2\frac{b}{1+y}} - \qquad /12/$$

перенормированное в среднем фононном поле взаимодействие и $\langle\langle u_i^n | u_k\rangle\rangle^{(ir)}$ - неприводимая (ir) ФГ, не содержащая вкладов среднего фононного поля /см. [4] /. Уравнение для ФГ $\langle\langle u_i^n(t) ; u_k(t')\rangle\rangle$ получается аналогично /10/ при дифференцировании по второму времени t'. В результате /10/ может быть записано в виде уравнения Дайсона

$$G_{ik}^{-1}(\omega) = [G_{ik}^{\circ}(\omega)]^{-1} - M_{ik}(\omega) , \qquad /13/$$

где нулевая ФГ G° определена в псевдогармоническом приближении:

$$G_{ik}^{\circ}(\omega) = \frac{1}{NA_0}\sum_{\vec{q}} \frac{1}{\nu^2 - (\Delta + f_0 - f_{\vec{q}})} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{\ell}_i - \vec{\ell}_k)} . \qquad /14/$$

Здесь $\nu^2 = \omega^2/\omega_0^2$; $\omega_0^2 = A_0/m$; $f_{\vec{q}} = \varphi(\vec{q})/A_0$ - фурье-компонента потенциала взаимодействия. Массовый оператор в /13/ определяется собственной (pr.) частью /не содержащей одиночных ФГ G° / многофононной ФГ:

$$M_{ik}(\omega) = \sum_{n,m=2}^{\infty} \frac{1}{n!\,m!}\Phi^{(n+1)}\Phi^{(m+1)} \langle\langle (u_i)^n | (u_k)^m \rangle\rangle_{\omega}^{(ir.\,pr)} . \qquad /15/$$

В приближении 2-го порядка метода СФП, в котором при вычислении многочастичной ФГ используется расцепление

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

получаем следующее выражение для массового оператора [4]:

$$M_{ik}(\omega) = \sum_{n=2}^{\infty}\frac{1}{n!}(\Phi^{(n+1)})^2 \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 \ldots d\omega_n}{\omega_1 + \ldots + \omega_n - \omega} \times \qquad /16/$$

$$\times\left[1 - e^{\frac{1}{T}(\omega_1 + \ldots + \omega_n)}\right] \prod_{j=1}^{n} \frac{1}{e^{\frac{1}{T}\omega_j} - 1}\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\, G_{ik}(\omega_j + i\delta)\right] .$$

Для оценки сходимости самосогласованной теории возмущений в методе СФП рассмотрим вклад массового оператора /16/ в статическом пределе ($\omega=0$) в области высоких температур, $T \gg h\omega_0$. Учитывая оценку для ангармонических вершин /12/ при $\eta=0$ в виде $\Phi^{(2n)} \sim (a A_0/2b\sqrt{1+y})(2b/1+y)^n$, получаем:

$$\frac{1}{A_0} M_{ii}(0) \approx -\frac{a^2}{t} \frac{1}{(1+y)^2} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} \delta_{n,2m-1} \left(\frac{y}{1+y}\right)^n , \qquad /17/$$

где $t = T/(A_0/b)$. Построение теории возмущений по перенормированным в среднем фононном поле вершинам /12/ приводит к хорошей сходимости ряда /17/ не только в области малого ангармонизма, $y \sim t \ll 1$, но и в области больших флуктуаций, $y \gg 1$. Подобная же оценка в квантовом пределе, $T \to 0$, приводит к выражению /17/ с заменой $t \to \lambda_0 = h\omega_0/(A_0/b)$ и оценкой для $y \sim \lambda_0$. Полученные оценки позволяют в первом приближении пренебречь вкладом массового оператора в /13/ и рассмотреть самосогласованную систему уравнений в псевдогармоническом приближении для ФГ /14/.

В этом приближении для определения среднеквадратичных флуктуаций $y(T)$ получаем уравнение

$$y = 2b\langle u^2\rangle = \frac{\lambda_0}{N} \sum_q \frac{1}{\Omega_q} \mathrm{cth} \frac{\lambda_0 \Omega_q}{2t} , \qquad /18/$$

где частота мягкой моды согласно /14/ имеет вид:

$$\Omega_q^2 = \Delta + f_0 - f_q \equiv \Delta + \omega_q^2 . \qquad /19/$$

Щель в спектре, $\Omega_0^2 = \Delta(T)$, при $T > T_c$ ($\eta=0$) определяется /5/, /11/ в виде

$$\Delta^+(T) = 1 - \frac{a}{(1+y)^{3/2}} \qquad /20а/$$

и при $T < T_c$ ($\eta \neq 0$) с учетом /8/ - в виде

$$\Delta^-(T) = 2\eta^2 \frac{\ln a}{1+y} = 2\ln \frac{a}{(1+y)^{3/2}} . \qquad /20б/$$

Вблизи T_c, где $\Delta(T_c)=0$, разложение по $\tau = (T-T_c)/T_c \ll 1$ дает обычные соотношения для частоты в приближении среднего /в данном методе - фононного/ поля:

$$\Delta^+(\tau) \approx \frac{3}{2} \frac{y(T) - y(T_c)}{1 + y(T_c)} = a\tau , \qquad /21/$$

$$\Delta^-(\tau) \approx 3 \frac{y(T_c) - y(T)}{1 + y(T_c)} = -2a\tau ,$$

где, полагая $y(T) \sim T$, получим $a = [3(\alpha^{2/3} - 1)/2\alpha^{2/3}]$. Максимальное значение щели при $T=0$ $\Delta^-_{max} \approx 2\ln[\alpha/(1+\lambda_0)^{3/2}]$, и при $T \gg T_c$ $\Delta^+_{max} = 1$ /в единицах ω_0 /. Следовательно, область существенного изменения частоты мягкой моды вблизи T_c определяется условием $a\tau \sim 1$ или:

$$|\tau| = \left|\frac{T - T_c}{T}\right| \sim \frac{2}{3}\,\frac{\alpha^{2/3}}{\alpha^{2/3} - 1}. \qquad /22/$$

Эта область оказывается достаточно узкой, $\tau \sim 1$ при $\alpha \gg 1$, то есть в случае сильного ангармонизма.

Для определения температуры фазового перехода T_c через параметры модели согласно /7/, /18/ получаем уравнение

$$(\alpha^{2/3} - 1) = \frac{\lambda_0}{N} \sum_q \frac{1}{\omega_q} \operatorname{cth} \frac{\lambda_0 \omega_q}{2t_c}. \qquad /23/$$

В классическом пределе, $T_c \gg \omega_D$, $\omega_D^2 = \varphi(0)/m$, получим

$$T_c = \varphi(0)\,\frac{1}{2b\gamma_2}(\alpha^{2/3} - 1), \qquad /23а/$$

где постоянная $\gamma_2 = (1/N)\sum_q (f_0/\omega_q^2) \lesssim 1{,}5$ определяется типом решетки. Температура перехода T_c определяется характерной энергией связи между ячейками $\varphi(0)\,x_0^2 \sim (\varphi(0)/b)$ и пропорциональна величине ангармонизма α.

В классическом пределе согласно /21/ можем получить также выражение для параэлектрической константы Кюри-Вейса C:

$$\frac{C}{\Lambda^2 T_c} = \frac{\tau}{\Lambda^+(\tau)} \approx \frac{1}{a} = \frac{2}{3}\,\frac{\alpha^{2/3}}{\alpha^{2/3} - 1}, \qquad /24/$$

где $\Lambda^2 = (4\pi z^2/vA_0)$, z - эффективный заряд на элементарную ячейку СЭ, имеющую объем v. Величина C оказывается большой для СЭ со слабым ангармонизмом, $\alpha - 1 \ll 1$, соответствующих СЭ типа смещения, что согласуется с экспериментом.

Рассмотрим свободную энергию для модели /3/, пользуясь псевдогармоническим приближением /см. /4/ /:

$$\frac{1}{N}F = \frac{T}{N}\sum_{\vec q} \ln\left(2\operatorname{sh}\frac{\omega_0\Omega_{\vec q}}{2T}\right) + \tilde\phi(x) + \qquad /25/$$

$$+ \frac{A_0}{2b}\{\eta^2 \ln\alpha + \frac{1}{2}y[1 - \Delta]\} \equiv f(\eta),$$

и построим разложение Ландау:

$$f(\eta) = f(0) + \Delta(T)\,\eta^2 + \frac{1}{2}\beta(T)\,\eta^4 + \frac{1}{6}\gamma\eta^6\,, \qquad /26/$$

где согласно [9] имеем при $T \gtrsim T_c$ для первого коэффициента $\Delta(T) = \Delta^+(\eta=0) \doteq a\tau$ и для второго –

$$\beta(T) = \beta_0\Bigl(1 - 3\frac{\xi(T)}{1+\xi(T)}\Bigr),\quad \beta_0 \doteq \frac{a}{(1+y)^{5/2}}\,. \qquad /27/$$

Флуктуационный параметр $\xi(T)$ в классическом пределе при $T \gtrsim T_c$ имеет вид

$$\xi(T) = 3\beta_0\frac{t}{N}\sum_q \frac{1}{\Omega_q^4} \approx 0{,}1\Bigl(\frac{\alpha^{2/3}-1}{f_0\alpha^{2/3}}\Bigr)^{1/2}\frac{1}{R_0^3\sqrt{\tau}}\,. \qquad /28/$$

В случае сильного ангармонизма, $\alpha \gg 1$, область температур с развитыми флуктуациями, $\xi > 1$, имеет обычную зависимость от безразмерного радиуса взаимодействия R_0: $\tau \lesssim R_0^{-6}$ /см. [1] /. В случае слабого ангармонизма, $\alpha - 1 \ll 1$, эта область может оказаться значительно уже при физическом разумном соотношении параметров $A_0 \sim \varphi(0)$ /то есть $f_0 \sim 1$ /.

Фазовый переход 1-го рода, описываемый разложением /26/, в котором $\beta(\tau\to 0) = -2\beta_0 < 0$, $\gamma(\tau \to 0) > 0$, обусловлен принятым при вычислении /25/ приближением: как показано в [9], псевдогармоническое приближение эквивалентно суммированию всех расходящихся петлевых диаграмм в четверной вершине /27/.

4. СРАВНЕНИЕ С ДРУГИМИ МОДЕЛЯМИ И ОБСУЖДЕНИЕ

В случае слабого ангармонизма, $\alpha - 1 \ll 1$, потенциал /2/ может быть разложен в области $x \lesssim x_0$ по малой величине $bx_0^2 = \ln\alpha \ll 1$ и аппроксимирован потенциалом типа /1/ с коэффициентами

$$A = A_0\,(\alpha - 1)\,,\quad B = bA_0\,. \qquad /29/$$

В случае слабого ангармонизма мала также корреляционная функция $y = 2b\langle u^2\rangle = (\langle u^2\rangle/x_0^2)2\ln\alpha \ll \langle u^2\rangle/x_0^2 \sim 1$. Поэтому в полученных выше уравнениях можно провести разложение по $y \sim (\alpha-1) \ll 1$. В результате получаем самосогласованную систему уравнений для модели с потенциалом /1/ с параметрами /29/, фазовый переход в которой рассматривался во многих работах /см., напр., [5,10] /. При этом переходу типа смещения в этой модели соответствует выбор параметров $A \ll \varphi(0)$, что согласно /29/ достигается при физически разумном соотношении $A_0 \sim \varphi(0)$.

В случае сильного ангармонизма, $\alpha \gg 1$, разложение потенциала /2/ по $bx^2 \sim bx_0^2 \sim 1$ невозможно, а корреляционная функция $y(T_c) \sim \alpha^{2/3} - 1 \gg 1$, что также не позволяет проводить разложение по y в уравнениях, полученных выше. Тем не менее и в этом случае возможно разумное описание фазового перехода, поскольку согласно /28/ флуктуационная область температур может быть малой /при $f_0 = \varphi(0)/A_0 \sim 1$/. В модели с потенциалом /1/ случаю сильного ангармонизма соответствует выбор параметров $A \gg \varphi(0)$, который приводит к большой величине флуктуаций, $\xi \sim A/\varphi(0)$, что не позволяет получить физически разумное описание фазового перехода в методе СФП /9,10/. Поэтому в случае сильного ангармонизма переходят к псевдоспиновому описанию, которое позволяет учесть два низших энергетических уровня в рамках модели Изинга с поперечным полем /см. /1,2/ /. Спектр коллективных возбуждений в этой модели при $T > T_c$ в приближении случайных фаз имеет вид

$$E_{\vec{q}}^2 = \Gamma^2 - \Gamma J(\vec{q}) \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{\Gamma}{2T}, \qquad /30/$$

где Γ определяется разностью энергий двух низших уровней в эффективном одночастичном потенциале, который в модели /3/ удобно представить в виде

$$U(x) = \frac{1}{2}[A_0 + \varphi(0)]x^2 + \phi(x). \qquad /31/$$

$J(\vec{q})$ определяет взаимодействие возбуждений в разных ячейках и для модели /3/ имеет вид: $J(\vec{q}) = 4x_{sa}^2 \varphi(\vec{q})$, x_{sa} - матричный элемент по волновым функциям низших состояний в /31/, для оценки которого воспользуемся приближением:

$$x_{sa}^2 = h\omega/2m\omega^2, \quad h\omega = \Gamma.$$

Для сопоставления спектра /30/ с частотой мягкой фононной моды /19/ при оценке Γ используем аналогичное /11/ приближение среднего фононного поля для потенциала /31/*:

$$\Gamma^2 = \frac{\varphi(0)}{m} + \frac{A_0}{m}\left[1 - \frac{\alpha}{(1+y_0)^{3/2}}\right], \qquad /32/$$

где $y_0 \approx hb/m\Gamma \approx \lambda_0$ - флуктуации, определяемые нулевыми колебаниями. Учитывая эти оценки, для спектра /30/ получаем:

$$E_{\vec{q}}^2 = \Gamma^2 - \frac{\varphi(q)}{m} \operatorname{th}\frac{\Gamma}{2T} \approx \omega_0^2\left[1 - \frac{\alpha}{(1+y_0)^{3/2}}\right] + \qquad /33/$$
$$+ \frac{\varphi(0)}{m}\left(1 - \operatorname{th}\frac{\Gamma}{2T}\right) + \frac{\varphi(0) - \varphi(\vec{q})}{m} \operatorname{th}\frac{\Gamma}{2T}.$$

---

* Сравнение /32/ с точным решением уравнения Шредингера для потенциала /2/ показывает, что /32/ дает хорошую оценку в области $\alpha/\lambda_0^{3/2} \lesssim 5$.

Покажем, что в случае низких температур, $T \ll \Gamma$, когда достаточно учесть лишь первый возбужденный уровень, этот спектр согласуется с /19/. Для этого оценим величину $y(T)$ в /20а/ в приближении, аналогичном среднему полю в /30/:

$$y(T) \approx \frac{\lambda_0}{N} \sum_q \frac{1}{2\Omega_q} [1 + 2n(T)] \equiv y_0 [1 + 2n(T)], \qquad /34/$$

где $n(T) = (e^{\omega_D/T} - 1)^{-1}$, $\omega_D^2 = \varphi(0)/m$. Подставляя /34/ в /20а/ в случае низких температур, $n(T) \ll 1$, для /19/ получаем:

$$\Omega_q^2 = [1 - \frac{\alpha}{(1+y_0)^{3/2}}] + \frac{3}{2} \frac{\alpha}{(1+y_0)^{3/2}} \frac{y_0}{1+y_0} 2n(T) + \omega_q^2 . \qquad /35/$$

В рассматриваемом нами случае сильного ангармонизма, $\alpha \gg 1$, при $T \gtrsim T_c$ имеем: $y_0 \sim \alpha^{2/3} \gg 1$, и поэтому $\omega_D^2 - \Gamma^2 \ll 1$ и $1 - \mathrm{th}\frac{\Gamma}{2T} \approx 2n(T) \ll 1$. Следовательно, спектры /33/ и /35/ качественно согласуются при выборе параметров $A_0 \sim \varphi(0)$ $(\omega_0 \sim \omega_D)$. В этом случае температура фазового перехода в обеих моделях оценивается выражением

$$T_c \approx \omega_D (\ln \frac{1+q}{1-q})^{-1} , \qquad /36/$$

где

$$1 - q \approx \frac{\alpha}{(1+y_0)^{3/2}} - 1 \ll 1 . \qquad /37/$$

Таким образом, предложенная модель с потенциалом /2/ в отличие от /1/ позволяет дать разумное описание фазового перехода и в случае сильного ангармонизма, $\alpha \gg 1$, которое согласуется с двухуровневым приближением в квантовом пределе низких температур, $T_c \ll \omega_D$. В классическом пределе высоких температур, $T_c \gg \Gamma$, фазовый переход в псевдоспиновой модели соответствует переходу в обычной модели Изинга $(J(0) \gg \Gamma)$, сопоставление которой с моделью мягкой фононной моды /19/ не имеет физического смысла.

Более точное описание фазового перехода и динамики решетки в модели /3/ можно получить, вычисляя полную ФГ /13/с учетом затухания, определяемого $\mathrm{Im} M_{ik}(\omega + i\delta)$ в приближении /16/. В этом случае можно провести сравнение расчетов с экспериментами для реальных сегнетоэлектриков. В частности, в KH_2PO_4 при действии внешнего давления наблюдается появление резонансной моды, обработка которой в двухмодовом приближении показывает значительную нелинейную зависимость частоты мягкой моды от температуры $(T - T_c)$ /11/.

В заключение автор благодарит В.Г.Вакса и В.Л.Аксенова за обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. "Наука", М., 1973.
2. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. "Мир", М., 1975.
3. Kahan A.M. et al. Phys.Rev., 1976, B14, p.5422; Holland V., Lüty F. Ferroelectrics, 1977, 17, p.377.
4. 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.
5. Gillis N.S. In: Dynamical Properties of Solids, ed. G.K.Horton and A.A.Maradudin. North-Holland, Amsterdam, 1975, vol.2, pp.107-150.
6. Coon J.B. et al. Journ.Molec.Spectr., 1966, 20, p.107.
7. Плакида Н.М., Иванов В.В. ОИЯИ, Р17-80-194, Дубна, 1980; phys.stat.sol. (b), 1980, 101, No.2.
8. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. ДАН СССР, 1959, 126, с.53; Зубарев Д.Н. УФН, 1960, 71, с.71.
9. Аксенов В.Л., Плакида Н.М. ТМФ, 1978, 34, с.364.
10. Соколов А.И. ФТТ, 1974, 16, с.733; ЖЭТФ, 1975, 68, с.1137; Аксенов В.Л., Плакида Н.М. ТМФ, 1978, 35, с.104.
11. Peercy P.S. Phys.Rev., 1975, B12, p.2725.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 сентября 1980 года.