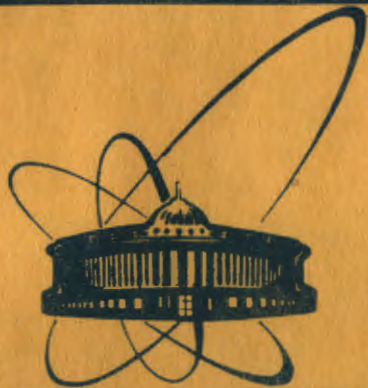


24/x-83



сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

5510/83

P17-83-549

В.Л.Аксенов, А.Ю.Дидык

МЯГКАЯ ФОНОННАЯ МОДА  
В КРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ

1983

Известно, что дефекты даже при малой их концентрации оказывают сильное влияние на термодинамические и динамические свойства кристаллов, когда в них происходит фазовый переход /см. обзоры<sup>/1,2/</sup> и цитированную там литературу/. В значительной степени меняется и поведение основной динамической характеристики структурных переходов - мягкой фононной моды. Однако представление об этих изменениях в настоящее время является лишь качественным и далеко не полным. Обычно эта задача изучается в простейших приближениях теории неупорядоченных систем - приближении виртуального кристалла и приближении средней  $t$ -матрицы.

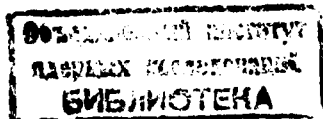
В настоящей работе мы рассмотрим влияние точечных дефектов малой концентрации на частоту мягкой моды и ее затухание в интерполяционном приближении метода когерентного потенциала<sup>/3,4/</sup>. Метод когерентного потенциала в другой формулировке использовался в работе<sup>/5/</sup> для описания динамики решетки твердых растворов сегнетоэлектриков.

В разделе 1 описан гамильтониан модели мягкой фононной моды кристалла с дефектами трех типов: жесткими, мягкими и замороженными/"поляризованными" или хаотическими/. В этом же разделе получены уравнения, описывающие структуру дефекта. В разделе 2 развито интерполяционное приближение метода когерентного потенциала в самосогласованном поле теории фононов. Получена самосогласованная система уравнений для динамической восприимчивости. В разделе 3 рассмотрено влияние введенных в разделе 1 типов дефектов на частоту и затухание мягкой фононной моды. В разделе 4 обсуждаются полученные результаты.

## 1. МОДЕЛЬ

В данной работе мы будем рассматривать структурные фазовые переходы типа смещения, для которых характерно наличие мягкой фононной моды. Для модельного описания воспользуемся предположением локальной нормальной координаты, которая описывает смещение атомов в отдельной элементарной ячейке, участвующих в критическом нормальном колебании<sup>/6/</sup>.

Предполагая, что примесная компонента не меняет симметрии критического колебания, модельный гамильтониан запишем в виде<sup>/5,7/</sup>:



$$H = \sum_{n\alpha} t_{n\alpha} \left[ \frac{p_{n\alpha}^2}{2m_\alpha} - \frac{A_\alpha}{2} x_{n\alpha}^2 + \frac{B_\alpha}{4} x_{n\alpha}^4 \right] + \frac{1}{4} \sum_{\substack{nn' \\ \alpha\beta}} t_{n\alpha} t_{n'\beta} \Phi_{nn'}^{\alpha\beta} (x_{n\alpha} - x_{n'\beta})^2, \quad /1/$$

где проекционный оператор  $t_{n1} = 1 - t_{n2} = 1$  /или 0/, если в узле решетки  $n$  находится элементарная ячейка сорта  $\alpha = 1$  /или  $\alpha = 2$ /.  $x_{n\alpha}$ ,  $p_{n\alpha}$  - локальные нормальные координаты и сопряженные импульсы, описывающие критические колебания в ячейке сорта  $\alpha$  в узле решетки  $n$ ,  $m_\alpha$  - приведенная масса ячейки. Взаимодействие  $\Phi_{nn'}^{\alpha\beta}$  описывает эффективное взаимодействие ячеек одной компоненты при  $\alpha = \beta$  и ячеек разных компонент при  $\alpha \neq \beta$ .

В классическом случае, который мы и будем далее рассматривать, модель /1/ характеризуется двумя параметрами: энергией связи частиц  $V_{CB} = \sum_n \Phi_{nn'}^{\alpha\alpha} A_\alpha / B_\alpha$  и глубиной одночастичного потенциала  $V_{0\alpha} = \frac{A_\alpha^2}{4B_\alpha}$ . Фазовому переходу типа смещения в основной решетке

соответствует значение параметра  $f_0 = V_{CB} / 4V_{01} = \Phi_{01} / A_1 \gg 1 (A_1 > 0)$ .

Дефектная ячейка в зависимости от вида одночастичного потенциала может быть в общем случае нескольких типов. Если  $A_2 < 0$ , то такой дефект является стабилизирующим, или жестким. При  $A_2 > 0$  и таком соотношении  $V_{01}$  и  $V_{02}$ , что в дефектной ячейке может происходить смещение частицы за счет ее взаимодействия с соседними частицами, дефект называется мягким. Если  $V_{02} \gg V_{01}$ , то такой дефект будем называть сильноангармоническим. В случае, если возможны статистические переориентации в одночастичном потенциале, то дефект является "переполаризующимся", или релаксирующим. Если же глубина потенциальных минимумов настолько велика, что в рассматриваемом интервале температур переориентации невозможны, то дефект называется замороженным. В свою очередь, замороженные дефекты могут быть хаотическими или поляризованными, что зависит от способа приготовления образца /8/.

Мы будем рассматривать три типа дефектов: жесткие, мягкие и замороженные.

Рассмотрим теперь условия равновесия в системе /1/. Представим смещения  $x_{n\alpha}$  относительно равновесных положений в высокотемпературной /высокотемпературной/ фазе в виде квазиравновесных положений /в низкотемпературной фазе/  $b_{n\alpha} = \langle x_{n\alpha} \rangle$  и динамических /колебательных/ смещений  $u_{n\alpha}(t)$ :

$$x_{n\alpha} = b_{n\alpha} + u_{n\alpha}(t).$$

Усредненные по колебаниям решетки уравнения движения для нормальной координаты сорта  $\alpha$  в узле решетки  $n$ :  $\frac{d}{dt} \langle p_{n\alpha}(t) \rangle = 0$  - позволяют найти квазиравновесные положения  $b_{n\alpha}$ . Используя /1/ при

$t_{n\alpha} = 1$ , получаем

$$b_{n\alpha} [-A_\alpha + B_\alpha (b_{n\alpha}^2 + 3 \langle u_{n\alpha}^2 \rangle)] + \sum_{n'\beta} t_{n'\beta} \Phi_{nn'}^{\alpha\beta} (b_{n\alpha} - b_{n'\beta}) = 0. \quad /2/$$

При получении /2/ мы пренебрегли ангармонической поправкой более высокого порядка  $\langle u_{n\alpha}^3 \rangle$ , то есть использовали псевдогармоническое приближение самосогласованной теории фононов /9/. Усредняя теперь в /2/ член с взаимодействием по конфигурациям примесей  $\langle \dots \rangle_c$  в узлах  $n' \neq n$  и пренебрегая корреляцией в расположении примесей, для  $b_{n\alpha} \approx b_\alpha$  находим систему уравнений:

$$\eta_1 [\eta_1^2 + 3y_1 - 1] + c_2 f_0^{12} (\eta_1 - \eta_2) = 0, \quad /3a/$$

$$\eta_2 [\kappa (\eta_2^2 + 3y_2) - \gamma] + c_1 f_0^{12} (\eta_2 - \eta_1) = 0, \quad /3b/$$

где введена концентрация компоненты сорта  $\alpha$ :  $c_\alpha = \langle t_{n\alpha} \rangle_c$ , и безразмерные переменные

$$\eta_\alpha = \sqrt{\frac{B_\alpha}{A_\alpha}} b_\alpha, \quad y_\alpha = \frac{B_\alpha}{A_\alpha} \langle u_{n\alpha}^2 \rangle, \quad \gamma = \frac{A_2}{A_1}, \quad \kappa = \frac{B_2}{B_1}, \quad f_0^{12} = \frac{1}{A_1 n'} \sum_n \Phi_{nn'}^{12}. \quad /4/$$

Как видно из уравнений /3/, для определения температурного поведения параметров порядка необходимо знать среднеквадратичные смещения, которые мы определим в следующем разделе.

## 2. САМОСОГЛАСОВАННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ОДНОФОНОННОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА

Рассмотрим двухвременные функции Грина /ФГ/ от операторов смещений  $u_{n\alpha} = x_{n\alpha} - \langle x_{n\alpha} \rangle$  для гамильтониана /1/:

$$D_{nn'}(t-t') = \langle \langle u_n(t); u_{n'}(t') \rangle \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega(t-t')} D_{nn'}(\omega), \quad /5/$$

где использованы общепринятые обозначения /9/.

Уравнения движения для них после Фурье-преобразования по времени имеют вид:

$$[m_\alpha \omega^2 - A_1 \Delta_\alpha] t_{n\alpha} D_{nn'}(\omega) = \delta_{nn'} + \sum_{k\beta} t_{n\alpha} t_{k\beta} \Phi_{nk}^{\alpha\beta} [D_{nn'}(\omega) - D_{kn'}(\omega)]. \quad /6/$$

Здесь было использовано приближение первого порядка самосогласованной теории фононов /9/  $\langle \langle u_n^3 | u_{n'} \rangle \rangle \approx 3 \langle u_n^2 \rangle \langle u_n | u_{n'} \rangle$  и введены

одночастичные потенциалы:

$$\Delta_\alpha = \begin{cases} 3(\eta_1^2 + y_1) - 1, & \alpha = 1, \\ 3\kappa(\eta_2^2 + y_2) - \gamma, & \alpha = 2. \end{cases} \quad /7/$$

Для упрощения будем считать, что  $\Phi_{nn}^{\alpha\beta} = \Phi_{nn}$ , для любых  $\alpha = 1, 2$  и  $\beta = 1, 2$ . Нулевую /базисную/ решетку выберем в виде, соответствующем приближению виртуального кристалла. ФГ для нее удовлетворяет уравнению

$$(\bar{m}\omega^2 - A_1 \bar{\Delta}) D_{nn}^\circ(\omega) = \delta_{nn} + \sum_k \Phi_{nk} [D_{nn}^\circ(\omega) - D_{kn}^\circ(\omega)], \quad /8/$$

где

$$\bar{m} = c_1 \Delta_1 + c_2 \Delta_2, \quad \bar{\Delta} = c_1 \Delta_1 + c_2 \Delta_2.$$

Переходя в /8/ к преобразованию Фурье по координатам, находим:

$$D_{\vec{q}}^\circ(\omega) = \frac{1}{\bar{m}\omega^2 - A_1 \bar{\Delta} - A_1 (f_0 - f_{\vec{q}})}, \quad /9/$$

где

$$f_{\vec{q}} = \frac{1}{A_1 N} \sum_{n \neq k} \Phi_{nk} \exp(i\vec{q}(\vec{R}_n - \vec{R}_k)).$$

Учитывая выражения /8/, уравнение /6/ запишем в виде

$$D_{nn}^\circ(\omega) = D_{nn}^\circ(\omega) + \sum_k D_{nk}^\circ(\omega) V_k(\omega) D_{kn}^\circ(\omega). \quad /10/$$

Здесь введен диагональный потенциал возмущения:

$$V_k(\omega) = A_1 \left\{ \frac{\bar{m}}{A_1} \omega^2 - \bar{\Delta} - \sum_\alpha t_{k\alpha} \left[ \frac{m_\alpha}{A_1} \omega^2 - \Delta_\alpha \right] \right\}. \quad /11/$$

Перепишем /10/ в виде разложения по потенциалу возмущения  $V_k(\omega)$ :

$$D_{nn}^\circ(\omega) = D_{nn}^\circ(\omega) + \sum_k D_{nk}^\circ V_k D_{kn}^\circ(\omega) + \sum_{k, \ell} D_{nk}^\circ V_k D_{k\ell}^\circ V_\ell D_{\ell n}^\circ(\omega) + \dots /12/$$

Производя в /12/ конфигурационное усреднение, для усредненной ФГ системы получаем разложение

$$\bar{D}_{nn}^\circ(\omega) = D_{nn}^\circ(\omega) + \sum_k D_{nk}^\circ D_{kk}^\circ D_{kn}^\circ \langle V_k^2 \rangle_c +$$

$$+ \sum_k D_{nk}^\circ D_{kk}^\circ D_{kk}^\circ D_{kn}^\circ \langle V_k^3 \rangle_c + \dots /13/$$

$$+ \sum_{k, \ell} D_{nk}^\circ D_{kk}^\circ D_{k\ell}^\circ D_{\ell\ell}^\circ D_{\ell n}^\circ \langle [V_k^4]_c + 3 \langle V_k^2 \rangle_c \langle V_\ell^2 \rangle_c \rangle + \dots$$

Так как  $\langle V_k(\omega) \rangle_c = 0$ ,  $\langle V_k(\omega) V_\ell(\omega) \rangle_c = 0$  для  $k \neq \ell$ , при учете /11/ конфигурационные средние, входящие в /13/, имеют вид:

$$\alpha_0 \equiv \langle V_k^2 \rangle_c = c_1 c_2 A_1^2 \left\{ \frac{m_1 - m_2}{A_1} \omega^2 - (\Delta_1 - \Delta_2) \right\}^2,$$

$$\alpha_1 \equiv \langle V_k^3 \rangle_c = c_1 c_2 (c_1 - c_2) A_2^3 \left\{ \frac{m_1 - m_2}{A_1} \omega^2 - (\Delta_1 - \Delta_2) \right\}^3, \quad /14/$$

$$\alpha_2 \equiv \langle V_k^4 \rangle_c = c_1 c_2 (1 - 3c_1 c_2) A_1^4 \left\{ \frac{m_1 - m_2}{A_1} \omega^2 - (\Delta_1 - \Delta_2) \right\}^4$$

и так далее. Выражение для усредненной по конфигурациям ФГ /13/ запишем в виде уравнения Дайсона:

$$\bar{D}_{nn}^\circ(\omega) = D_{nn}^\circ(\omega) + \sum_{k, \ell} D_{nk}^\circ(\omega) M_{k\ell}(\omega) \bar{D}_{\ell n}^\circ(\omega), \quad /15/$$

или в  $\vec{q}$ -представлении:

$$\bar{D}_{\vec{q}}^\circ(\omega) = [D_{\vec{q}}^\circ(\omega)]^{-1} - M_{\vec{q}}(\omega)]^{-1}, \quad /16/$$

где  $M_{\vec{q}}(\omega)$  - массовый оператор.

Изобразим схематически несколько первых членов в разложении для  $M_{\vec{q}}(\omega)$  с помощью диаграмм:

$$M = \text{---} \overset{\times}{\text{---}} \text{---} + \text{---} \overset{\times}{\text{---}} \text{---} + \text{---} \overset{\times}{\text{---}} \text{---} + \text{---} \overset{\times}{\text{---}} \text{---} + \text{---} \overset{\times}{\text{---}} \text{---} \quad /17/$$

Горизонтальная двойная линия в /17/ представляет собой ФГ  $\bar{D}_{\vec{q}}^\circ(\omega)$  /обычно такой линией обозначают свободный пропагатор  $D_{\vec{q}}^\circ(\omega)$ , здесь замена  $D_{\vec{q}}^\circ(\omega)$  на  $\bar{D}_{\vec{q}}^\circ(\omega)$  позволяет учесть больше членов в разложении для  $M_{\vec{q}}(\omega)$  и сделать рассмотрение самосогласованным /8/. Штриховая линия - линия взаимодействия - соответствует потенциалу возмущения  $V(\omega)$ . Запишем первые члены в разложении для массового оператора  $M_{\vec{q}}(\omega)$ :

$$M_{\vec{q}}(\omega) = \frac{\alpha_0}{N} \sum_{\vec{q}} \bar{D}_{\vec{q}}(\omega) + \alpha_1 \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \bar{D}_{\vec{q}}(\omega) \right\}^2 +$$

$$+ \alpha_2 \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \bar{D}_{\vec{q}}(\omega) \right\}^3 + \quad /18/$$

$$+ \alpha_1^2 \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} \bar{D}_{\vec{q}_1 - \vec{q}_2}(\omega) \bar{D}_{\vec{q}_2}(\omega) \bar{D}_{\vec{q}_1}(\omega) + \dots$$

Для того, чтобы вычислить  $M_{\vec{q}}(\omega)$  точно, необходимо просуммировать весь ряд в правой части /18/, что практически невозможно ввиду отсутствия малого параметра, поэтому приходится ограничиваться суммированием вкладов наиболее важных диаграмм. Видно, что четвертый член в разложении для  $M_{\vec{q}}(\omega)$  описывает процессы рассеяния на двух примесях. Для упрощения заменим его выражением  $\alpha_1^2 \left[ \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \bar{D}_{\vec{q}}(\omega) \right]^3$ , что означает пренебрежение эффектами интерференции при учете рассеяния на двух примесях /кластерах/.

Обозначая  $\bar{D}_{nn}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \bar{D}_{\vec{q}}(\omega)$ , перепишем /18/ в виде

$$M_{\vec{q}}(\omega) = \alpha_0 \bar{D}_{nn}(\omega) + \alpha_1 \bar{D}_{nn}^2(\omega) + (\alpha_2 + 2\alpha_1^2) \bar{D}_{nn}^3(\omega) + \dots \quad /19/$$

Видно, что в /19/  $M_{\vec{q}}(\omega)$  уже не зависит от  $\vec{q}$ . Вводя безразмерную переменную  $\nu^2 = \frac{\bar{m}}{A_1} \omega^2$ , выражение для  $\bar{D}_{nn}(\omega)$  запишем в виде

$$\bar{D}_{nn}(\nu) = \frac{1}{A_1 N} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{\nu^2 - \bar{\Delta} - (f_0 - f_{\vec{q}}) - \bar{M}(\nu)} = \frac{1}{A_1} f(\nu^2 - \bar{\Delta} - \bar{M}(\nu)), \quad /20/$$

где  $\bar{M}(\nu) = M(\nu) / A_1$ . Перепишем /20/:

$$\bar{D}_{nn}(\nu) = \frac{1}{A_1 N} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{z - (f_0 - f_{\vec{q}})} = \frac{1}{A_1} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\rho(\omega^2) d\omega^2}{z - \omega^2}, \quad /21/$$

здесь  $z = \nu^2 - \bar{\Delta} - \bar{M}(\nu)$  и введена функция плотности состояний  $\rho(\omega^2)$ . Рассмотрим модельную плотность состояний

$$\rho(\omega^2) = \begin{cases} \frac{2}{\pi f_0^2} \sqrt{\omega^2(2f_0 - \omega^2)}, & /22a/ \\ \frac{3\omega}{2(2f_0)^{3/2}} & /22b/ \end{cases}$$

для хаббардовского /22a/ и дебаевского /22b/ спектров, обычно применяемых при расчетах в теории неупорядоченных систем. Урав-

нение /19/ с учетом соотношений /20/-/22/ становится уравнением относительно  $M(\nu)$ . Просуммировать ряд /19/ в общем случае не удастся, поэтому обычно рассматривают только первый член ряда, что соответствует интерполяционному приближению в методе когерентного потенциала /3/, которое оказалось вполне успешным при произвольных концентрациях примесей /3,4/. Мы рассмотрим случай малых концентраций  $c_2 \ll 1$ , тогда разложение для  $M(\nu)$  принимает вид

$$M(\nu) = c_1 c_2 [g^2 \bar{D}_{nn}(\nu) + g^3 \bar{D}_{nn}^2(\nu) + g^4 \bar{D}_{nn}^3(\nu) + \dots] =$$

$$= c_1 c_2 g^2 \bar{D}_{nn}(\nu) [1 - g \bar{D}_{nn}(\nu)]^{-1}. \quad /23/$$

При условии, что ряд в правой части /23/ сходится, в выражении /23/

$$g = A_1 \left\{ \frac{m_1 - m_2 \omega^2}{A_1} - (\Delta_1 - \Delta_2) \right\}. \quad /24/$$

Для того, чтобы получить самосогласованную систему уравнений, необходимо вычислить условные функции Грина, с помощью которых вычисляются среднеквадратичные смещения  $y_\alpha$  в /3/, /7/.

Условные ФГ определяются следующим образом:  $\bar{D}_{n(a)n}(\omega) = \langle t_{na} \bar{D}_{nn}(\omega) \rangle_c$ , конфигурационное среднее вычисляется при условии, что в узле  $n$  находится ячейка сорта  $\alpha$ . В приближении малой концентрации /23/ получаем:

$$\bar{D}_{n(a)n}(\omega) = \frac{\bar{D}_{nn}(\omega)}{1 - V_n^{(a)}(\omega) \bar{D}_{nn}(\omega)}. \quad /25/$$

Здесь  $V_n^{(a)}(\omega) = V_n(\omega)$  при условии, что  $t_{na} = 1$  /см. /11//. Среднеквадратичные смещения  $y_\alpha$  находятся стандартным образом с помощью спектральных теорем и ФГ /25/. В классическом случае уравнение для них имеет вид

$$y_\alpha = \theta \int_0^\infty \frac{d\nu^2}{\nu^2} \left[ -\frac{A_1}{\pi} \text{Im} D_{n(a)n}(\nu + i\epsilon) \right] =$$

$$= -2\theta A_1 \text{Re} \bar{D}_{n(a)n}(0 + i\epsilon), \quad /26/$$

где введена безразмерная температура  $\theta = T/(A_1^2/B_1)$ . Самосогласованная система /3/, /20/, /21/, /22/, /23/, /25/ и /26/ определяет однофоновую ФГ. Эта ФГ описывает реакцию системы на действие внешнего зависящего от времени поля и определяет динамическую восприимчивость системы с гамильтонианом /1/. Полюса ФГ или

динамической восприимчивости дают информацию об элементарных возбуждениях, ее статический предел ( $\omega=0$ ) - о температуре перехода.

### 3. ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ НА МЯГКУЮ МОДУ

Спектральная плотность возбуждений /функция рассеяния/ определяется мнимой частью восприимчивости:

$$\chi''(\vec{q}, \omega) = -\text{Im} \bar{D}_{\vec{q}}(\omega + i\epsilon) = \frac{\omega \Gamma(\vec{q}, \omega)}{[\omega_{\vec{q}}^2 - \delta(\vec{q}, \omega) - \omega^2]^2 + \omega^2 \Gamma^2(\vec{q}, \omega)}, \quad /27/$$

где действительная и мнимая части массового оператора

$$\delta(\vec{q}, \omega) = -\text{Re} M_{\vec{q}}(\omega); \quad \omega \Gamma(\vec{q}, \omega) = -\text{Im} M_{\vec{q}}(\omega + i\epsilon) \quad /28/$$

характеризуют перенормировку энергии и затухание возбуждений соответственно. Частота  $\omega_{\vec{q}}^2$  определяется полюсом ФГ /9/ в приближении виртуального кристалла.

В модели /1/ в пределе смещения вне критической области имеется хорошо определенная мода колебаний - мягкая мода с малой величиной затухания. В этом случае восприимчивость /27/ может быть записана в виде

$$\chi''(\vec{q}, \omega) = \frac{\omega \Gamma(\vec{q})}{[\Omega_{\vec{q}}^2 - \omega^2]^2 + \omega^2 \Gamma^2(\vec{q})}, \quad /29/$$

где  $\Gamma(\vec{q}) = \Gamma(\vec{q}, \omega = \Omega_{\vec{q}})$ , а перенормированная частота определяется уравнением

$$\Omega_{\vec{q}}^2 = \omega_{\vec{q}}^2 - \delta(\vec{q}, \Omega_{\vec{q}}). \quad /30/$$

Выражение /23/ вместе с /20/-/22/ является уравнением для массового оператора.

Для качественного обсуждения упростим выражение для  $M(\nu)$ , подставляя в /23/ диагональные части нулевых ФГ /9/. Тогда, используя /9/, /23/, /30/, имеем:

$$\begin{aligned} \Omega_{\vec{q}}^2 &= \omega_{\vec{q}}^2 - \delta^0(\vec{q}, \Omega_{\vec{q}}) = \\ &= (A_1/m)\bar{\Delta} + A_1(f_0 - f_{\vec{q}}) - c_1 c_2 \delta^0, \end{aligned} \quad /31/$$

где

$$\delta^0 = -\text{Re} \frac{g^2 \bar{D}_{nn}(\nu + i\epsilon)}{1 - g \bar{D}_{nn}(\nu + i\epsilon)}. \quad /31a/$$

Для затухания получаем выражение

$$\Gamma = c_1 c_2 \Gamma_0, \quad \Gamma_0 = -\frac{1}{\omega} \text{Im} \frac{g^2 \bar{D}_{nn}(\omega + i\epsilon)}{1 - g \bar{D}_{nn}(\omega + i\epsilon)}. \quad /32/$$

Температура перехода определяется из условия обращения в нуль обратной статической восприимчивости  $\chi^{-1}(q = q_c, \omega = 0) = \Omega_{q_c}^2$ . Используя /31/, получаем уравнение для определения  $T_c$  при переходе в центре зоны Бриллюэна  $q_c = 0$ :

$$\Omega_{q=0}^2(T_c) = \frac{A_1}{m} \bar{\Delta} - c_1 c_2 \delta^0. \quad /33/$$

В области частот  $\Omega_{\vec{q}} \gg \Gamma$  динамическая восприимчивость /29/ имеет резонансный характер с максимумами при частотах  $\omega = \pm \Omega_{\vec{q}}$  и полушириной пиков  $\Gamma$ .  $\Omega_{\vec{q}} \approx \omega_{\vec{q}}$ , поскольку перенормировка частоты, связанная с  $\Gamma$  дисперсионными соотношениями, в этом случае также мала. По мере приближения к точке перехода частота  $\Omega_{\vec{q}}$  уменьшается, и в области  $\Omega_{\vec{q}} \ll \Gamma$  восприимчивость /29/ принимает релаксационный характер с максимумом при  $\omega \rightarrow 0$ :

$$\chi''(\vec{q}, \omega) \approx \frac{\omega \Gamma}{\Omega_{\vec{q}}^4 + \omega^2 \Gamma^2} = \frac{\omega}{\Omega_{\vec{q}}^2} \frac{1/\tau_{\vec{q}}}{(1/\tau_{\vec{q}})^2 + \omega^2}, \quad /34/$$

где время релаксации определяет ширину центрального пика

$$1/\tau_{\vec{q}} = \Omega_{\vec{q}}^2 / \Gamma. \quad /35/$$

Таким образом, при  $T \rightarrow T_c$  происходит переход из резонансного режима вдали от  $T_c$ , когда  $\omega_{\vec{q}} \gg \Gamma$ , в релаксационный режим вблизи от  $T_c$ , когда  $\Omega_{\vec{q}} \ll \Gamma$ . При этом в самой точке перехода согласно /33/ исходная /высокочастотная/ мягкая мода имеет конечное значение:

$$\omega_{\infty}^2(T_c) = \omega_{q=0}^2 = c_1 c_2 \delta^0. \quad /36/$$

В простейшем приближении в пределе малой концентрации дефектов  $c_2$  это значение частоты мягкой моды, как и ее затухание /32/, пропорционально  $c_2$ . Если же решать полное уравнение для массового оператора /23/, то зависимость  $\omega_{q=0}^2(T_c)$  и  $\Gamma$  от концентрации является более сложной.

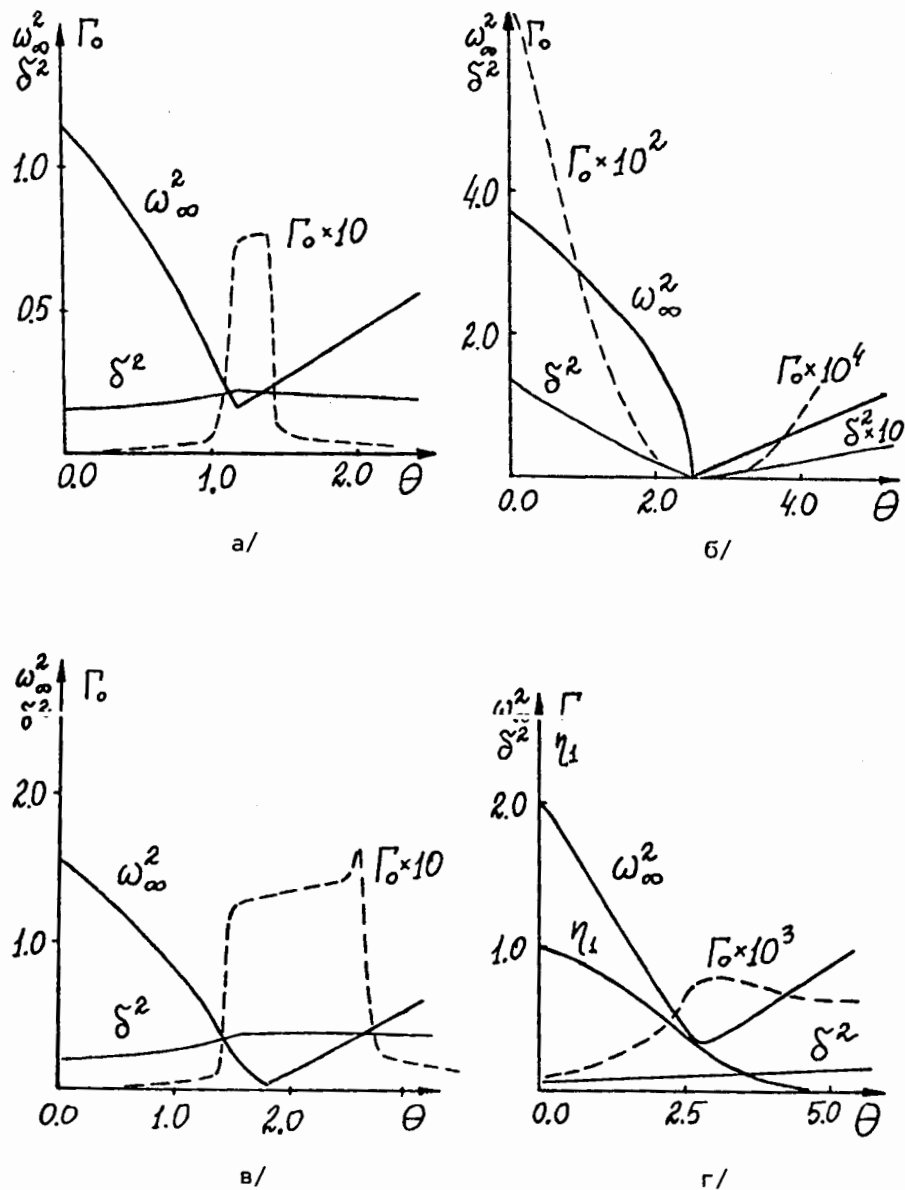


Рис.1. Температурная зависимость частоты мягкой фононной моды  $\omega_{\infty}^2$ , сдвига частоты  $\delta^2$  и затухания  $\Gamma$ : а/ - "жесткая" примесь, б/ - "мягкая" примесь, в/ - замороженная хаотическая примесь, г/ - замороженная поляризованная примесь,  $\eta_1$  - параметр порядка в системе.

Для более детального выяснения характера влияния дефектов на поведение мягкой моды было проведено численное решение системы уравнений /3/, /7/, /21/, /22б/, /23/-/26/, результаты которого приведены на рис.1. Обсудим отдельно влияние жестких, мягких и замороженных дефектов согласно классификации, данной в разделе 1.

Жесткая примесь приводит к уменьшению температуры фазового перехода, причем при некоторой критической концентрации перехода в системе не будет совсем /см. также /5, 7/ /. На рис.1а показано температурное поведение величин  $\omega_{\infty}^2$ ,  $\delta^2$  и  $\Gamma_0$  /в безразмерных переменных  $\omega_{\infty}^2 = \frac{\bar{m}}{A_1} \omega_{q=0}^2$ ,  $\delta^2 = \frac{1}{A_1} c_1 c_2 \delta^0$  и  $\Gamma = \frac{\bar{m}}{A_1} c_1 c_2 \Gamma_0$  / при концентрации примесей  $c_2 = 10^{-1}$  и параметрах модели /4/  $\gamma = -5$ ,  $\kappa = 1$ ,  $f_0 = 20$ . Сдвиг частоты мягкой моды  $\delta^2$  и  $\Gamma$  возрастает по мере приближения к температуре фазового перехода  $T_0$ , при которой обратная восприимчивость  $\chi_0^{-1} = \Omega_0^2 = \omega_{\infty}^2 - \delta^2$  обращается в нуль. В таблице 1 приведены значения величин  $\omega_{\infty}^2$ ,  $\delta^2$ ,  $\Gamma$  и  $T_0$  в зависимости от концентрации. Видно, что эта зависимость близка к линейной.

Мягкая примесь может как уменьшать, так и увеличивать температуру перехода в зависимости от соотношения глубин одночастичных потенциалов основной решетки  $V_{01}$  и примеси  $V_{02}$ . При  $V_{02} > V_{01}$  температура перехода увеличивается, при  $V_{02} < V_{01}$  - уменьшается /см. также /5, 7/ /. На рис.1б показано поведение величин  $\omega_{\infty}^2$ ,  $\delta^2$  и  $\Gamma$  при концентрации примеси  $c_2 = 10^{-1}$  и параметрах модели  $\gamma = 10$ ,  $\kappa = 10$ ,  $f_0 = 20$  ( $V_{02} > V_{01}$ ). В противоположность предыдущему случаю сдвиг частоты и затухание уменьшаются по мере приближения к  $T_0$ . В согласии с выполненным выше анализом при подходе к  $T_0$  система, как и в предыдущем случае, переходит из резонансного в релаксационный режим: два боковых пика функции рассеяния, соответствующие мягкому фонону, сдвигаются к центру, сливаясь в один пик, центрированный на нулевой частоте. Однако если в случае жесткой примеси ширина "центрального" пика увеличивается при  $T \rightarrow T_0$  /так как  $\Gamma$  увеличивается при  $T \rightarrow T_0$ /, то в случае мягкой примеси эта ширина уменьшается. Этот результат можно понять, если обратить внимание на выражение для  $M(\nu)$  в случае мягкой примеси: видно, что  $M(\nu)$  пропорционален  $g^2$  /24/, который уменьшается при  $T \rightarrow T_0$ . Зависимость величин  $\omega_{\infty}^2$ ,  $\delta^2$  и  $\Gamma$  от концентрации аналогична приведенной в табл.1.

Замороженные хаотические дефекты приводят к понижению  $T_0$  /см. также /7, 8/ /. На рис.1в показано температурное поведение величин  $\omega_{\infty}^2$ ,  $\delta^2$  и  $\Gamma$  при концентрации примесей  $c_2 = 10^{-2}$  и значениях параметров модели  $\gamma = 10$ ,  $\kappa = 10$ ,  $f_0 = 20$ . При рассмотрении замороженных хаотических примесей мы полагаем для упрощения, что их колебания незначительны и  $\eta_2 = \pm \sqrt{\gamma/\kappa}$  /см.36/. В уравнении /3а/ после структурного усреднения  $\eta_2$  выпадает.

Замороженные поляризованные дефекты ( $\eta_2 = +\sqrt{\gamma/\kappa}$ ) изменяют температуру перехода в зависимости от знака поляризации: если поля-

Таблица 1

Зависимость параметров мягкой моды и температуры фазового перехода от концентрации в случае жесткой примеси /  $\gamma = -5$ ,  $\kappa = 1$ ,  $f_0 = 20$ /

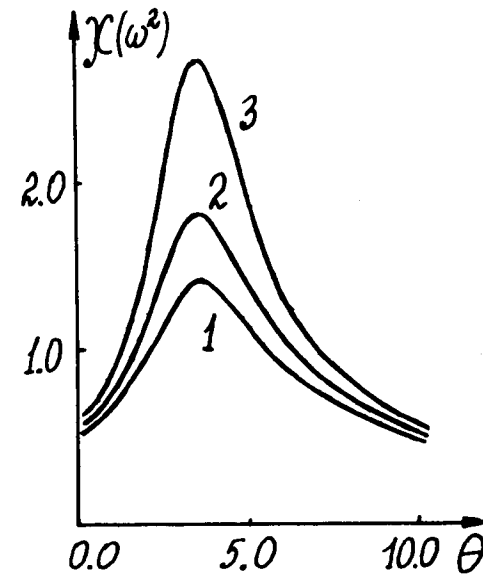
$c_2$	$\omega_\infty^2$	$\delta^2$	$\Gamma$	$T_0$
$2,5 \times 10^{-2}$	0,05	0,059	$2,06 \times 10^{-2}$	2,0
$5,0 \times 10^{-2}$	0,07	0,115	$4,03 \times 10^{-2}$	1,7
$1,0 \times 10^{-1}$	0,14	0,219	$7,43 \times 10^{-2}$	1,2
$2,0 \times 10^{-1}$	0,25	0,395	$1,31 \times 10^{-1}$	0,1
$3,0 \times 10^{-1}$	нет фазового перехода			

Таблица 2

Зависимость параметров мягкой моды, соответствующей максимуму восприимчивости при  $\omega = 0$  от концентрации в случае замороженной поляризованной примеси /  $\gamma = 10$ ,  $\kappa = 10$ ,  $f_0 = 20$ /

$c_2$	$\omega_\infty^2$	$\delta^2$	$\Gamma$	$T_0$
$1,0 \times 10^{-3}$	0,203	0,039	$1,75 \times 10^{-4}$	2,6
$2,5 \times 10^{-3}$	0,33	0,095	$7,8 \times 10^{-4}$	2,8
$5,0 \times 10^{-3}$	0,54	0,192	$2,7 \times 10^{-3}$	3,4
$1,0 \times 10^{-2}$	0,86	0,378	$9,6 \times 10^{-3}$	3,0
$2,0 \times 10^{-2}$	1,37	0,790	$3,5 \times 10^{-2}$	3,0

ризация дефекта совпадает по знаку с поляризацией параметра порядка в основной решетке, то температура повышается, в противном случае - понижается /см. также <sup>18/</sup>/. Более интересный эффект состоит в размытии фазового перехода. На рис.1г показано поведение параметров  $\omega_\infty^2$ ,  $\delta^2$ ,  $\Gamma$  и параметра порядка  $\eta_1$  при концентрации  $c_2 = 2,5 \cdot 10^{-3}$  и параметрах модели  $\gamma = 10$ ,  $\kappa = 10$ ,  $f_0 = 20$ . Как видно, статическая восприимчивость системы  $\chi_0 = \Omega_0^{-2}$  в точке перехода не обращается в бесконечность, как в предыдущих случаях, а имеет максимум, характерный для размытых фазовых переходов <sup>18/</sup>. Температурное положение максимума слабо зависит от частоты внешнего поля  $\omega$ , как показано на рис.2. В таблице 2



приведены значения параметров мягкой моды, соответствующие максимуму восприимчивости при  $\omega = 0$  в зависимости от концентрации примесей.

Рис.2. Температурная зависимость статической восприимчивости системы для внешнего поля, зависящего от частоты, в случае замороженной поляризованной примеси: 1 -  $\omega = 0,0$ ; 2 -  $\omega = 0,36$ ; 3 -  $\omega = 0,54$  /  $c_2 = 2 \times 10^{-2}$ ,  $\gamma = 10$ ,  $\kappa = 10$ ,  $f_0 = 20$ /.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ

Полученные в предыдущем разделе результаты показывают, что развитая теория позволяет на полумикроскопическом уровне описать большое разнообразие свойств структурных фазовых переходов в кристаллах с дефектами. Обсудим пределы применимости и возможности сравнения с экспериментом. Пределы применимости теории ограничены используемыми приближениями. Для описания фононов мы использовали псевдогармоническое приближение, которое справедливо вне критической области <sup>19/</sup>. Неупорядоченность решетки рассматривается в приближении хаотически расположенных дефектов, хотя в реальных кристаллах, а также в критической области возможны эффекты кластеризации дефектов. Наконец, в приближении когерентного потенциала, один из вариантов которого был нами использован, предполагается, что моды основной решетки и примесная мода делокализованы, что заведомо выполняется только в случае жестких и мягких примесей. Относительно же замороженных и, возможно, мягких примесей в критической области этого заранее сказать нельзя - нам неизвестны исследования проблемы локализации возбуждений в данном случае.

Детальное сравнение с экспериментом на данном этапе возможно только на качественном уровне. Это связано главным образом с тем, что в имеющихся экспериментах трудно идентифицировать тип дефекта. Для этого, в частности, можно использовать полученное здесь поведение характеристик мягкой моды. Например, эксперименты по



изучению влияния дефектов на структурный фазовый переход в титанате стронция<sup>10/</sup> показывают, что с большой вероятностью в данном случае имелись жесткие дефекты. Заметим также, что при сравнении с экспериментом расчета поведения затухания мягкой моды необходимо учитывать и другие механизмы. В первую очередь, это относится к рассматриваемому в данной работе фонон-фонному взаимодействию, которое приводит к увеличению затухания при  $T \rightarrow T_0$ . В работе<sup>12/</sup>, например, было показано, что замороженные дефекты вызывают линейную связь критической моды с другими модами, что приводит к добавке к затуханию, которая ведет себя, как  $\Delta\Gamma \sim [(T - T_c)/T_c]^{-1/2}$ .

Авторы выражают признательность А.П.Леванюку и Н.М.Плакиде за обсуждения результатов работы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Гинзбург В.Л. и др. УФН, 1980, 130, с.615.
2. Bruce A.D., Cowley R.A. Adv.Phys., 1980, 29, p.219.
3. Onodera Y., Toyozawa Y. J.Phys.Soc.Jap., 1968, 24, p.341.
4. Yonezawa F., Morigaki K. Progr.Theor.Phys., 1973, 53, p.1.
5. Аксенов В.Л. и др. ФТТ, 1978, 20, с.1469.
6. Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. "Мир", М., 1981.
7. Аксенов В.Л., Дидык А.В. Улики, p1/-8z-16b, Дубна, 1982; Ferroelectrics, 1983 /в печати/.
8. Леванюк А.П. и др. ЖЭТФ, 1979, 76, с.345.
9. Аксенов В.Л., Плакида Н.М. ТМФ, 1978, 34, с.364.
10. Hasting J.V. et al. Phys.Rev.Lett., 1978, 40, p.237.
11. Wagner D. et al. Z.Phys., 1980, B37, p.317.
12. Levanyuk A.P., Sigov A.S. J.Phys.Soc.Jap., Suppl.B, 1980, 49, p.13.

Рукопись поступила в издательский отдел  
27 июля 1983 года.

#### НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
Д1,2-12036	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
Д1,2-12450	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
Д1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
Д4-80-271	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д4-80-385	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д2-81-543	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
Д10,11-81-622	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д1,2-81-728	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
Д17-81-758	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
Д1,2-82-27	Труды II Международного симпозиума по проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
Р18-82-117	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
Д2-82-568	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
Д9-82-664	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д3,4-82-704	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
Д3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:  
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79  
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ  
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Аксенов В.Л., Дидык А.Ю.  
Мягкая фононная мода в кристаллах с дефектами

P17-83-549

Рассмотрена динамика решетки модели структурного фазового перехода с дефектами. Развита микроскопический подход на основе метода самосогласованных фононов и приближения когерентного потенциала. Получена температурная и концентрационная зависимость частоты мягкой фононной моды и ее затухания для дефектов различных типов.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Aksenov V.L., Didyk A.Yu.  
Soft Phonon Mode in Crystals with Defects

P17-83-549

Lattice dynamics of structural phase transition model with defects is considered. The microscopical approach which is based on the self-consistent phonon field approximation and coherent potential approximation is developed. The temperature and concentrational dependence of soft phonon mode frequency and its damping is obtained for defects of different types.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983