

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

P17-84-825

Х.Насрулов, Н.М.Плакида

ВЛИЯНИЕ ВАКАНСИЙ  
НА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ МОДУ  
В  $\text{SrTiO}_3$

Направлено в журнал  
"Известия АН ТаджССР"

1984



В экспериментах /1-3/ было показано, что вакансии ионов кислорода (O) сильно влияют на структурные фазовые переходы /ФП/ в  $\text{SrTiO}_3$ , как на сегнетоэлектрический /СЭ/ переход в центре зоны Бриллюэна, так и на антидисторсионный /АД/ фазовый переход на границе зоны Бриллюэна. Это объясняется особой ролью кислорода в возникновении неустойчивости решетки ввиду его большой анизотропной поляризуемости. В /4/ СЭ ФП был рассмотрен на основе модели поляризуемых ионов, в которой учитывалось только локальное ангармоническое взаимодействие группы  $T1 - O_B$ . Нами /5/ было исследовано влияние вакансий на АД ФП в  $\text{SrTiO}_3$  на основе теории самосогласованных фононов в модели локальных нормальных координат /ЛНК/ /6/. При учете ангармонического взаимодействия только мягких мод было получено достаточно хорошее согласие с экспериментом.

В настоящей работе рассмотрено влияние вакансий ионов O на СЭ ФП на основе теории самосогласованных фононов в представлении ЛНК. В отличие от /4/ помимо ангармонического взаимодействия самой мягкой моды дополнительно учитывается ангармоническое взаимодействие ее с акустическими фононами. Как показано в работе, при СЭ ФП последнее взаимодействие играет важную роль в стабилизации неустойчивой в гармоническом приближении решетки.

## 1. ГАМИЛЬТониАН МОДЕЛИ

Наличие вакансии O приводит к образованию дефектных ячеек. Вводя оператор проектирования  $t_{a\ell}$  со свойством:  $t_{1\ell} = 1 - t_{2\ell} = 1(0)$ , если ячейка  $\ell$  бездефектная /дефектная/, запишем гамильтониан в виде

$$H = H_{ph} + H_D + H_{вз}. \quad /1/$$

Фононный гамильтониан  $H_{ph}$  в представлении ЛНК  $Q_\lambda(\ell)$  для моды  $\Gamma_{15}$  /7/ имеет вид

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \sum_{a\lambda\ell} M^{(a)} \dot{Q}_\lambda^2(\ell) t_{a\ell} + \frac{1}{2} \sum_{a\lambda\ell} \Omega^{(a)} Q_\lambda^2(\ell) t_{a\ell} + \frac{1}{4} \sum_{a\lambda\mu\ell} \Gamma_{\lambda\mu}^{(a)} Q_\lambda^2(\ell) Q_\mu^2(\ell) t_{a\ell} - \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\ell\ell'} V_{\lambda\mu}^{(\alpha\beta)}(\ell, \ell') Q_\lambda(\ell) Q_\mu(\ell') t_{a\ell} t_{\beta\ell'}. \quad /2/$$

где первые три члена обусловлены короткодействующими силами, и последний член определяет взаимодействие между ячейками, обусловленное далекодействующими дипольными силами. Ангармонические коэффициенты взаимодействия  $\Gamma_{\lambda\mu}^{(a)}$  вводятся с учетом кубической симметрии решетки

$$\Gamma_{\lambda\mu}^{(a)} = \Gamma_1^{(a)} \delta_{\lambda\mu} + 2\Gamma_2^{(a)} (1 - \delta_{\lambda\mu}). \quad /3/$$

Фурье-компонента матрицы взаимодействия  $V_{\lambda\mu}^{(\alpha\beta)}(\vec{q})$  подчиняется условию  $V_{\lambda\mu}^{(\alpha\beta)}(\vec{\ell} = \vec{\ell}') = N^{-1} \sum_{\vec{q}} V_{\lambda\mu}^{(\alpha\beta)}(\vec{q}) = 0$  и при  $\vec{q} = 0$  имеет вид

$$V_{\lambda\mu}^{(\alpha\beta)}(\vec{q}) = S_1^{(\alpha\beta)} \delta_{\lambda\mu} - S_2^{(\alpha\beta)} (q_\lambda q_\mu / q^2).$$

Взаимодействие мягкой моды  $Q_\lambda(\ell)$  с упругой деформацией и с длинноволновыми акустическими фононами выразим через компоненты тензора деформации  $\epsilon_i(\ell)$ :

$$H_{вз} = \sum_{a\lambda\mu\ell i} G_{i\lambda\mu}^{(a)} \epsilon_i(\ell) Q_\lambda(\ell) Q_\mu(\ell) t_{a\ell} + \frac{1}{2} \sum_{a\lambda\ell ij} G_{ij\lambda}^{(a)} \epsilon_i(\ell) \epsilon_j(\ell) Q_\lambda^2(\ell) t_{a\ell}, \quad /4/$$

где проводится суммирование по всем  $i = 1, 2, 3, \dots, 6$ . Ангармонические константы взаимодействия третьего и четвертого порядка  $G_{i\lambda\mu}^{(a)}$  и  $G_{ij\lambda}^{(a)}$  имеют соответственно три и шесть независимых компонент /7/. Отметим, что константы  $M$ ,  $\Omega_0$ ,  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_2$ ,  $V_{\lambda\mu}$ ,  $G_{i\lambda\mu}$ ,  $G_{ij\lambda}$  с  $a = 1/2$  относятся к бездефектным /дефектным/ ячейкам.

Гамильтониан длинноволновых акустических фононов запишем в обычном виде, считая, что влиянием дефектов на них можно пренебречь:

$$H_D = \frac{1}{2} M \sum_{i\ell} \dot{\epsilon}_i^2(\ell) + \frac{1}{2} \sum_{ij\ell\ell'} C_{ij} \epsilon_i(\ell) \epsilon_j(\ell'), \quad /5/$$

где  $M$  - масса элементарной ячейки,  $C_{ij}$  - коэффициенты жесткости кубического кристалла.

СЭ фазовый переход обусловлен конденсацией мягкой моды  $\Gamma_{15}$  и характеризуется трехкомпонентным параметром порядка  $A_\lambda = \langle Q_\lambda(\ell) \rangle$ . Вводя также тензор однородной деформации  $\eta_i = \langle \epsilon_i(\ell) \rangle$ , представим ЛНК  $Q_\lambda(\ell)$  и локальный тензор деформации  $\epsilon_i(\ell)$  в виде

$$Q_\lambda(\ell) = A_\lambda + r_\lambda(\ell), \quad \epsilon_i(\ell) = \eta_i + u_i(\ell), \quad /6/$$

где флуктуационные части  $r_\lambda(\ell)$  и  $u_i(\ell)$  имеют Фурье-представление

$$r_\lambda(\ell) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{\ell}} r_\lambda(\vec{q}), \quad u_i(\ell) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{\ell}} a_i(\nu/\vec{q}) Q(\nu/\vec{q}). \quad /7/$$

Здесь введено обозначение

$$a_i(\nu/\vec{q}) \equiv a_{i\mu}(\nu/\vec{q}) = q_\lambda e_{\mu\lambda}(\nu/\vec{q}) + q_\mu e_{\lambda\mu}(\nu/\vec{q}). \quad /8/$$



где  $e_{\mu}(\nu/\vec{q})$  - вектор поляризации длинноволновых акустических фононов с поляризацией  $\nu$ .

## 2. СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ

Свободную энергию системы вычислим с помощью вариационного метода Боголюбова. Вводим пробный гамильтониан

$$H_0 = \frac{1}{2} M \sum_{\lambda\ell} \dot{r}_{\lambda}^2(\ell) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} \sum_{\ell\ell'} \Phi_{\lambda\mu}(\ell\ell') r_{\lambda}(\ell) r_{\mu}(\ell') + \frac{1}{2} M \sum_{i\ell} \dot{u}_i^2(\ell) + \frac{1}{2} \sum_{ij\ell\ell'} C_{ij} u_i(\ell) u_j(\ell'), \quad /9/$$

где вариационный параметр  $\Phi_{\lambda\mu}(\ell\ell')$  определяется из условий стационарности пробной свободной энергии  $F_1$ :

$$F_1 = F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0, \quad /10/$$

$F_0 = -T \ln \exp(-H_0/T)$  и  $\langle \dots \rangle_0$  - статистическое усреднение с гамильтонианом /9/. Среднее значение для гамильтониана модели в приближении среднего поля для дефектов легко вычисляется и приводит к выражению:

$$\langle H - H_0 \rangle_0 = E + V_4 (\Delta_{\lambda\mu}, D_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} \sum_q [\Omega_0^2(n) \delta_{\lambda\mu} - v_{\lambda\mu}(n, \vec{q}) - \Phi_{\lambda\mu}(\vec{q})] \Delta_{\lambda\mu}(\vec{q}). \quad /11/$$

Здесь статическая энергия и флуктуационные члены имеют вид

$$\frac{2}{N} E = \sum_{\lambda} [\Omega_0^2(n) - v_{\lambda\lambda}(n, 0)] A_{\lambda}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu} \Gamma_{\lambda\mu}(n) A_{\lambda}^2 A_{\mu}^2 + \sum_{ij} C_{ij} \eta_i \eta_j + 2 \sum_{i\lambda\mu} G_{i\lambda\mu}(n) \eta_i A_{\lambda} A_{\mu} + \sum_{ij\lambda} g_{ij\lambda}(n) \eta_i \eta_j A_{\lambda}^2, \quad /12/$$

$$\frac{1}{N} V_4 (\Delta_{\lambda\mu}, D_{ij}) = \frac{1}{4} \sum_{\lambda\mu} \Gamma_{\lambda\mu}(n) [2A_{\mu}^2 \Delta_{\lambda\lambda} + 4A_{\lambda} A_{\mu} \Delta_{\lambda\mu} + \Delta_{\lambda\lambda} \Delta_{\mu\mu} + 2\Delta_{\lambda\mu} \Delta_{\lambda\mu}] + \sum_{i\lambda\mu} G_{i\lambda\mu}(n) \eta_i \Delta_{\lambda\mu} + \frac{1}{2} \sum_{ij\lambda} g_{ij\lambda}(n) (\eta_i \eta_j \Delta_{\lambda\lambda} + A_{\lambda}^2 D_{ij} + \Delta_{\lambda\lambda} D_{ij}),$$

где  $\Delta_{\lambda\mu}$  и  $D_{ij}$  - корреляционные функции для оптических и акустических фононов:

$$\Delta_{\lambda\mu} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \Delta_{\lambda\mu}(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \langle r_{\lambda}(\vec{q}) r_{\mu}(\vec{q}) \rangle, \quad /13/$$

$$D_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} D_{ij}(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \langle u_i(\vec{q}) u_j(-\vec{q}) \rangle.$$

Зависимость параметров  $\Omega_0^2$ ,  $v_{\lambda\mu}$ ,  $G_{i\lambda\mu}$  и  $g_{ij\lambda}$  от концентрации вакансий  $n = \langle t_{2\ell} \rangle$  определяется следующим образом:

$$\Omega_0^2(n) = \Omega_0^{(1)2} (1-n) + \Omega_0^{(2)2} \cdot n,$$

$$v_{\lambda\mu}(n, \vec{q}) = v_{\lambda\mu}^{(11)}(\vec{q}) (1-n)^2 + 2v_{\lambda\mu}^{(12)}(\vec{q}) n(1-n) + v_{\lambda\mu}^{(22)}(\vec{q}) \cdot n^2,$$

$$\Gamma_{\lambda\mu}(n) = \Gamma_{\lambda\mu}^{(1)} (1-n) + \Gamma_{\lambda\mu}^{(2)} \cdot n, \quad G_{i\lambda\mu}(n) = G_{i\lambda\mu}^{(1)} (1-n) + G_{i\lambda\mu}^{(2)} \cdot n, \quad /14/$$

$$g_{ij\lambda}(n) = g_{ij\lambda}^{(1)} (1-n) + g_{ij\lambda}^{(2)} \cdot n.$$

Пользуясь условием стационарности  $\partial F_1 / \partial \Delta_{\lambda\mu}(\vec{q}) = 0$ , находим уравнение для динамической матрицы  $\Phi_{\lambda\mu}(\vec{q})$ :

$$\Phi_{\lambda\mu}(\vec{q}) = \Omega_0^2(n) \delta_{\lambda\mu} - v_{\lambda\mu}(n, \vec{q}) + \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda\lambda'}(n) (A_{\lambda}^2 + \Delta_{\lambda\lambda'}) \delta_{\lambda\mu} + 2\Gamma_{\lambda\mu}(n) (A_{\lambda} A_{\mu} + \Delta_{\lambda\mu}) + 2 \sum_i G_{i\lambda\mu}(n) \eta_i + \sum_{ij} g_{ij\lambda}(n) (\eta_i \eta_j + D_{ij}) \delta_{\lambda\mu}, \quad /15/$$

диагонализация которой дает частоту самосогласованных фононов

$$\Omega_{\lambda}(n, \vec{q}) = \sum_{\mu\mu'} w_{\lambda}(\vec{q}) \Phi_{\mu\mu'}(\vec{q}) w_{\lambda}'(\vec{q}), \quad /16/$$

$w_{\lambda}'(\vec{q})$  - вектор поляризации оптических фононов. Далее, из условия минимума свободной энергии получим уравнения для параметра порядка  $A_{\lambda}$  и для компонент тензора однородной деформации  $\eta_i$ :

$$A_{\lambda} [\Omega_0^2(n) - v_{\lambda\lambda}(0, n) + \sum_{\mu} \Gamma_{\lambda\mu}(n) (A_{\mu} + \Delta_{\mu\mu}) + \sum_{ij} g_{ij\lambda}(n) (\eta_i \eta_j + D_{ij})] + 2 \sum_{\mu} [\Gamma_{\lambda\mu}(n) \Delta_{\lambda\mu} + \sum_i G_{i\lambda\mu}(n) \eta_i] A_{\mu} = 0,$$

$$\sum_j \tilde{C}_{ij} \eta_j + \sum_{\lambda\mu} G_{i\lambda\mu}(n) (A_{\lambda} A_{\mu} + \Delta_{\lambda\mu}) = 0, \quad /17/$$

где перенормированные упругие константы  $\tilde{C}_{ij}$  имеют вид  $\tilde{C}_{ij} = C_{ij} + \sum_{\lambda} g_{ij\lambda}(n) (A_{\lambda}^2 + \Delta_{\lambda\lambda})$ .

## 3. МЯГКАЯ МОДА

Хотя в кристалле  $\text{SrTiO}_3$  СЭ фазового перехода не происходит из-за квантовых флуктуаций /виртуальный СЭ/, полезно получить



выражения для частоты мягкой моды в двух случаях, когда  $\Delta\lambda \neq 0$ , например,  $\Delta\lambda = \Delta\delta_{\lambda 3}$  - тетрагональная фаза, и  $\Delta\lambda = 0$  - кубическая фаза. В первом случае для корреляционных функций и однородной деформации имеем следующие условия:  $\Delta_{\lambda\mu} = 0$ , если  $\lambda \neq \mu$ ,  $\Delta_{11} = \Delta_{22} = \Delta_1$ ,  $\Delta_{33} = \Delta_3$ ,  $\eta_1 = 0$ , если  $i > 3$ ,  $\eta_1 = \eta_2 \neq \eta_3$ . Из /16/ получим уравнения для частоты мягкой моды при  $\vec{q} = \vec{q}_c = 0$ :

$$\Omega_{1,2}^2(0, n, T) = \omega_T^2(0, n) + 3\Gamma_1(n) \Delta_1 + 2\Gamma_2(n) (\Delta + \Delta_1 + \Delta_3) + 2[G_{11}(n) + G_{12}(n)] \eta_1 + 2G_{12}(n) \eta_3 + \sum_{ij} g_{ij1}(n) (\eta_1 \eta_j + D_{ij}), \quad /18/$$

$$\Omega_3^2(0, n, T) = \omega_T^2(0, n) + 3\Gamma_1(n) (\Delta^2 + \Delta_3) + 4\Gamma_2(n) \Delta_1 + 4G_{12}(n) \eta_1 + 2G_{11}(n) \eta_3 + \sum_{ij} g_{ij3} (\eta_1 \eta_j + D_{ij}).$$

Для параметра порядка и однородных деформаций получим соответствующие уравнения:

$$A[\omega_T^2(n, 0) + \Gamma_1(n) (\Delta^2 + 3\Delta_3) + 4\Gamma_2(n) \Delta_1 + 2G_{11}(n) \eta_3 + 4G_{12}(n) \eta_1 + \sum_{ij} g_{ij3}(n) (\eta_1 \eta_j + D_{ij})] = 0, \quad /19/$$

$$[\tilde{C}_{11}(n) + \tilde{C}_{12}(n)] \eta_1 + \tilde{C}_{13}(n) \eta_3 + G_{11}(n) \Delta_1 + G_{12}(n) (\Delta^2 + \Delta_1 + \Delta_3) = 0,$$

$$2\tilde{C}_{13}(n) \eta_1 + \tilde{C}_{33}(n) \eta_3 + G_{11}(n) (\Delta^2 + \Delta_3) + 2G_{12}(n) \Delta_1 = 0,$$

где  $G_{11} = G_{111} = G_{222} = G_{333}$ ,  $G_{12} = G_{122} = G_{133} = G_{211} = G_{311} = G_{233} = G_{322}$  и введена поперечная гармоническая частота  $\omega_T^2(n, 0) = \Omega_0^2(n) - \nu_T(n, 0)$ .

В высокотемпературной кубической фазе, когда  $\Delta = 0$ ,  $\eta_1 = \eta_3 = \eta$  и  $\Delta_1 = \Delta_3$ , частота мягкой моды трижды вырождена и определяется из уравнения

$$\Omega^2(0, n, T) = \omega_T^2(n, 0) + [3\Gamma_1(n) + 4\Gamma_2(n)] \Delta + 2[G_{11}(n) + 2G_{12}(n)] \eta + \sum_{ij} g_{ij\lambda} (\eta^2 + D_{ij}), \quad /20/$$

где

$$\eta = - \frac{G_{11}(n) + 2G_{12}(n)}{\tilde{C}_{11}(n) + 2\tilde{C}_{12}(n)} \Delta. \quad /21/$$

Система уравнений /18/, /19/ и /20/, /21/ с учетом выражений для корреляционных функций

$$\Delta_{\lambda\mu} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}\nu} w_{\lambda}^{\nu}(\vec{q}) w_{\mu}^{\nu}(\vec{q}) \frac{1}{2\Omega(\vec{q}, n, T)} \text{cth} \frac{\Omega_{\nu}(\vec{q}, n, T)}{2T}, \quad /22/$$

$$D_{ij} = \frac{1}{4N} \sum_{\vec{q}\nu} \alpha_i(\nu/\vec{q}) \alpha_j(\nu/\vec{q}) \frac{1}{2\omega_{\nu}(\vec{q})} \text{cth} \frac{\omega_{\nu}(\vec{q})}{2T},$$

где  $\omega_{\nu}(\vec{q})$  - частота акустических фононов, самосогласованно определяет частоту мягкой моды в тетрагональной и кубической фазе соответственно.

#### 4. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ. ОБСУЖДЕНИЕ

Для сравнения с экспериментом численно решим систему уравнений /20/, /21/ и /22/ в кубической фазе. При вычислении корреляционных функций /22/ примем приближение

$$w_{\lambda}^{\mu}(\vec{q}) = w_{\lambda}^{\mu}(\vec{q}_c = 0) = \delta_{\lambda\mu}, \quad e_{\lambda}^{\mu}(\vec{q}) = e_{\lambda}^{\mu}(\vec{q}_c = 0) = \delta_{\lambda\mu}, \quad /23/$$

$$\alpha_i(\mu/\vec{q}) \alpha_j(\mu/\vec{q}) = K_{ij} \omega_{\mu}^2(\vec{q}).$$

Пренебрегая членом  $g_{ij\lambda} \cdot \eta^2$  в /20/, для частоты мягкой моды получим:

$$\Omega^2(0, n, T) = \omega_T^2(n, 0) + \Gamma(n) \Delta(T) + L(n) D(T), \quad /24/$$

$$\text{где } \Delta(T) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{2\Omega^2(\vec{q}, n, T)} \text{cth} \frac{\Omega(\vec{q}, n, T)}{2T}, \quad D(T) = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}\nu} \omega_{\nu} \text{cth} \frac{\omega_{\nu}}{2T}$$

и

$$\Gamma(n) = 3\Gamma_1(n) + 4\Gamma_2(n) - 2[G_{11}(n) + 2G_{12}(n)]^2 [\tilde{C}_{11}(n) + 2\tilde{C}_{12}(n)]^{-1},$$

$$L(n) = \frac{1}{4} \sum_{ij} g_{ij\lambda} K_{ij}. \quad /26/$$

Согласно оценкам /2,8/ в высокотемпературном приближении квадрат затравочной гармонической частоты  $\omega_0^2 = -1150 \text{ см}^{-2}$ . Вводя безразмерные параметры

$$\alpha_n = \frac{\omega_T^2(n, 0)}{|\omega_0^2|}, \quad \gamma_n = \frac{\Gamma(n)}{|\omega_0^2|^{3/2}}, \quad \ell_n = \frac{L(n)}{|\omega_0^2|^{1/2}}, \quad /27/$$

для безразмерной частоты мягкой моды  $\nu_m^2(t) = \Omega^2(0, n, T) / |\omega_0^2|$  получим уравнение



$$\nu_m^2(n, T) = a_n + \gamma_n \cdot \Delta(t) + \ell_n D(t), \quad /28/$$

где  $t = T/|\omega_0^2|^{1/2}$  - безразмерная температура. Корреляционные функции  $\Delta(t)$  и  $D(t)$  вычисляются в дебаевском приближении для функции распределения квадратов частот  $\rho(\nu^2)$ :

$$\Delta(t) = \frac{1}{2} \int_0^{f_0} \frac{\rho(\nu^2) d\nu^2}{\sqrt{\nu_m^2(n, t) + \nu^2}} \operatorname{cth} \frac{\sqrt{\nu_m^2(n, t) + \nu^2}}{2t}, \quad D(t) = \frac{1}{2} \int_0^{f_a} \nu \rho(\nu^2) d\nu^2 \operatorname{cth} \frac{\nu}{2t}.$$

Здесь  $f_0$  и  $f_a$  - квадраты максимальной частоты для оптических и акустических фононов в единицах  $|\omega_0^2|$ , которые являются подгоночными параметрами модели. Для простоты будем считать, что их зависимость от  $n$  можно пренебречь, и для сокращения числа независимых параметров примем  $f_a = 1,5f_0$ , что соответствует экспериментальным результатам<sup>9/</sup>.

Для идеального кристалла ( $n=0$ ), полагая, что  $\omega_T^2(0)$  не слишком отличается от  $\omega_0^2$  /т.е.  $a_0 \approx -1/$ , определим  $\gamma_0$ ,  $\ell_0$  и  $f_a$  по двум экспериментальным точкам для  $\nu_m^2(t)$  при  $T \rightarrow 0$  К и  $T = 300$  К. При выборе параметров имеется некий произвол, так как их число больше числа уравнений. Например, возможны следующие наборы параметров:

$$\begin{aligned} \text{I} \quad a_0 &\approx -1,04, & f_a &= 4, & \ell_0 &= 1,39, & \gamma_0 &= 0, \\ \text{II} \quad a_0 &\approx -1,5, & f_a &= 4, & \ell_0 &\approx 1,32, & \gamma_0 &\approx 1,12. \end{aligned}$$

На рис.1 и 2 представлены результаты расчета частоты /28/ при  $n = 0$  /кривая 1/. Как видно, зависимость  $\nu_m^2(t)$  /28/ для набора параметров I и II описывает достаточно хорошо экспериментальные данные. Отметим, что хотя в наборе параметров II  $\gamma_0$  и  $\ell_0$  одного порядка, взаимодействие мягкой моды с акустическими фононами дает относительно больший вклад, чем взаимодействие с оптическими фононами, в силу принятых в уравнении /24/ обозначений для параметров  $\Gamma(n)$  и  $L(n)$  /26/.

Другой предельный случай выбора параметров  $\ell_0 < \gamma_0$  или  $\gamma_0 \neq 0$ ,  $\ell_0 = 0$  удается согласовать с экспериментальными данными только при больших значениях  $a_0$  или предполагая, что частота мягкой моды  $\nu_m^2(t)$  линейно зависит от температуры при всех температурах<sup>9/</sup>. Поскольку оба эти предположения физически трудно обосновать, приходим к выводу, что при СЭ ФП в  $\text{SrTiO}_3$  важным является взаимодействие мягкой моды с акустическими фононами.

Принимая набор параметров I и II за основу, найдем параметры  $a_n$ ,  $\gamma_n$  и  $\ell_n$  для  $n \neq 0$ , считая, что  $\gamma_n$  и  $\ell_n$  одинаковым образом зависят от концентрации вакансий  $n$ . Определяя эти параметры так же, как и при  $n = 0$  - по двум экспериментальным точкам при  $T \rightarrow 0$  и  $T = 300$ , получим зависимость  $\nu_m^2(n, t)$  /28/, которая приведена на рис.1 и 2 для  $n = 0,2\%$  /кривая 2/,  $1,06\%$  /кривая 3/ и  $2,24\%$  /кривая 4/. Получающаяся при этом зависи-

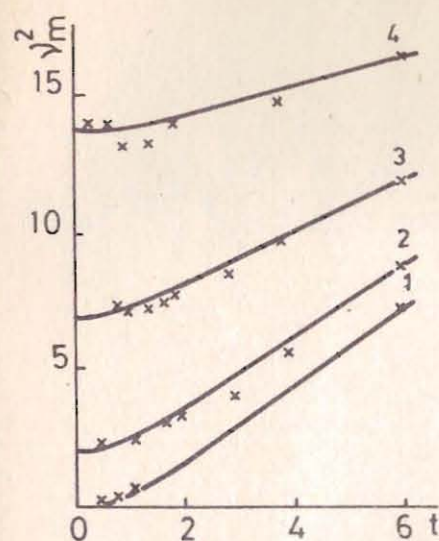


Рис.1. Температурная зависимость частоты мягкой моды при наборе параметров I.

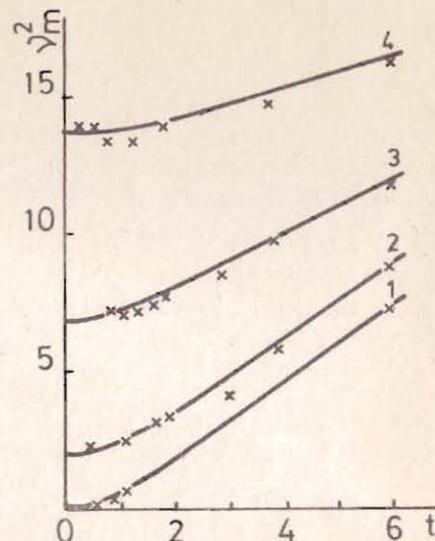


Рис.2. Температурная зависимость частоты мягкой моды при наборе параметров II.

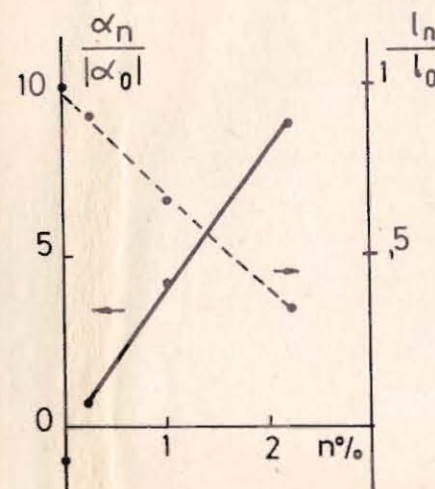


Рис.3. Зависимость параметров модели  $a_n/|a_0|$  и  $\ell_n/l_0 = \gamma_n/\gamma_0$  от  $n$ .

мость параметров  $a_n/|a_0|$  и  $\ell_n/l_0 = \gamma_n/\gamma_0$  показана на рис.3 сплошной и пунктирной линиями соответственно.

Таким образом, на основе модели ЛНК<sup>7/</sup> в рамках теории самосогласованных фононов удается достаточно полно описать экспериментальную зависимость частоты мягкой моды от температуры при различных значениях концентрации вакансий  $n$ . При этом зависимость от  $n$  подго-

ночных параметров модели затравочной гармонической частоты решеточной мягкой моды  $\omega_T^2(n) = a_n |\omega_0^2|$  и решеточных ангармонических взаимодействий  $\ell_n$ ,  $\gamma_n$  качественно согласуется с полученной в /4/ зависимостью для аналогичных локальных параметров  $g_2$  и  $g_4$ , что указывает на эквивалентность обоих подходов при модельном описании СЭ ФП в  $\text{SrTiO}_3$ .



## ЛИТЕРАТУРА

1. Bäuerly D., Rehwald W. Sol.St.Comm., 1978, 27, p.1343.
2. Bäuerly D. et al. Z.Phys., 1980, B38, p.335.
3. Wagner D. et al. Z.Phys., 1980, B37, p.317.
4. Busmann-Holder A. et al. Z.Phys., 1981, B41, p.353.
5. Плакида Н.М., Насрулов Х. ОИЯИ, P17-84-378, Дубна, 1984.
6. Pytte E., Feder J. Phys.Rev., 1969, 187, p.1077.
7. Feder J., Pytte E. Phys.Rev., 1970, B1, p.4803.
8. Аксенов В.Л., Плакида Н.М., Стаменкович С. Рассеяние нейтронов сегнетоэлектриками. Энергоатомиздат, М., 1984.
9. Stirling W.G. J.Phys.C, 1972, 5, p.2711.

Насрулов Х., Плакида Н.М.

P17-84-825

Влияние вакансий на сегнетоэлектрическую моду в  $\text{SrTiO}_3$

Рассмотрена динамическая модель сегнетоэлектрического фазового перехода с мягкой модой  $\Gamma_{15}$  с учетом вакансий ионов кислорода в титанате стронция. На основе модели локальной нормальной моды в приближении самосогласованных фононов проведен расчет температурной зависимости частоты мягкой моды при различных значениях концентрации вакансий и дано сравнение с экспериментом.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Nasruloev H., Plakida N.

P17-84-825

The Influence of Vacancies of Ferroelectric Mode in  $\text{SrTiO}_3$

A dynamical model of ferroelectric phase transition with soft mode  $\Gamma_{15}$  in strontium titanate with oxygen vacancies is considered. The local normal model representation in the self-consistent phonon approximation is employed. Temperature dependence of the soft mode at different vacancies concentrations is calculated and compared with experiments.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984

Рукопись поступила в издательский отдел  
19 декабря 1984 года.