объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-86-299

В.Л.Аксенов, М.Бобет, Н.М.Плакида, Ю.Шрайбер

К ТЕОРИИ ЦЕНТРАЛЬНОГО ПИКА ПРИ СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ

Направлено в журнал
"Solid State Communications"

1986

Проблеме появления аномального узкого центрального пика (ЦП) при структурных фазовых переходах посвящено большое количество теоретических работ (см., например, обзоры /1,2/). Основными причинами, вызывающими появление ЦП, в настоящее время принято считать дефекты и кластеры ближнего порядка. Однако в теориях с примесным механизмом обычно не рассматривают нелинейные свойства системы в области фазового перехода, так что ЦП появляется только в случае медленно релаксирующих и замороженных дефектов. С другой стороны, детальное исследование кластеров ближнего порядка возможно только для низкоразмерных моделей, и в настоящее время не установлен критерий их появления. Что касается создания общей теории, учитывающей оба эти механизма, то эта проблема представляется довольно сложной.

В настоящей работе мы рассматриваем появление ЦП как результат перехода от эргодической динамики флуктуаций параметра порядка к неэргодической. Этот механизм является универсальным как для идеальных систем, так и для систем произвольной размерности с дефектами. В приближении взаимодействующих мод с помощью изотермической функции релаксации развито самосогласованное динамическое описание трехмерной решеточной скалярной модели φ^4. Показано, что при определенных условиях, как при наличии дефектов, так и без них, имеется такое решение замкнутых нелинейных уравнений, что выше температуры фазового перехода T_c, но ниже некоторой температуры замерзания T_g корреляции флуктуаций параметра порядка не затухают со временем. Это, в свою очередь, приводит к возникновению ЦП в функции рассеяния.

1. Модель и константы неэргодичности

Рассмотрим простейшую модель структурного фазового перехода в кристалле с дефектами, гамильтониан которой запишем в виде

$$H = \sum_i \left[\frac{\pi_i^2}{2} - \frac{A_i}{2} Q_i^2 + \frac{B_i}{4} Q_i^4 + \frac{1}{4} \sum_k C_{ik} (Q_i - Q_k)^2 \right], \qquad (1)$$

где π_i и Q_i – канонически сопряженные локальные нормальные импульс и координата, удовлетворяющие коммутационным соотношениям $[Q_i, \pi_i] = i\hbar\,\delta_{ik}$. A_i и B_i – случайные величины: если узел занят дефектом, то $A_i = A_D\ (\gtrless 0)$, $B_i = B_D\ (>0)$, в противном случае $A_i = A\ (>0)$, $B_i = B\ (>0)$. Вводя концентрацию дефектов ρ, функцию распределение величин A_i можем записать в виде: $P(A_i) = \rho\,\delta(A_i - A_D) + (1-\rho)\,\delta(A_i - A_D)$, аналогично для величин B_i. Для упрощения задачи будем полагать, что частицы на d-мерной решетке (i = I, ... N) связаны одинаковыми гармоническими силовыми постоянными C_{ik} .

При исследовании модели (I) воспользуемся самосогласованной теорией динамических переходов из эргодического в неэргодическое состояние /3/. Для модели структурного фазового перехода (I) в случае идеальной (бездефектной) системы эта теория была развита в работе /4/.

Введем усредненную изотермическую релаксационную функцию для зависящих от времени операторов смещений

$$\phi_{ik}(t) = \int_0^\beta d\tau \ \overline{\langle u_i(t-i\tau)\, u_k \rangle} \quad , \quad \beta = 1/k_B T \, , \qquad (2)$$

где $\langle \ldots \rangle$ означает термодинамическое среднее, черта – конфигурационное среднее относительно случайных величин A_i, B_i. Начальное значение функции (2) определяет усредненную статическую изотермическую восприимчивость $\chi^T_{ik} = \phi_{ik}(t=0)$.

Построим разложение Мори в виде непрерывной дроби для преобразования Лапласа функции (2):

$$\phi_{ik}(z) = i\int_0^\infty dt\, e^{izt}\, \phi_{ik}(t) \equiv \big(\!\big(u_i / u_k \big)\!\big), \quad Im\, z > 0 \, . \qquad (3)$$

Во втором порядке в q - представлении получаем

$$\phi_q(z) = -\chi_q^T \left[z - \frac{1/\chi_q^T}{z + M_q(z)} \right]^{-1}, \qquad (4)$$

где

$$\phi_{ik}(z) = (1/N) \sum_q \phi_q(z) \exp\left[iq(R_i - R_k) \right]$$

и $M_q(z)$ - образ Фурье релаксационного ядра:

$$M_{ik}(z) = \big(\!\big(\ddot{Q}_i \mid \ddot{Q}_k \big)\!\big)_2 \, . \qquad (5)$$

Нижний индекс (5) означает, что релаксационное ядро является неприводимой частью второго порядка /5/. В отличие от /4/ в определение (2) помимо термодинамического включено также конфигурационное усреднение (см. /6/).

Используя расцепление высших корреляционных функций в приближении взаимодействующих мод (например, $\langle u_i^3(t)\, u_k^3 \rangle \approx 6\langle u_i(t)\, u_k\rangle^3 + 9\langle u_k^2\rangle\langle u_i^2\rangle\langle u_i(t)\, u_k\rangle$) и проводя конфигурационное усреднение в приближении виртуального кристалла (например, $\overline{B_i B_k \langle u_i(t)\, u_k\rangle^3} \approx \overline{B_i B_k}\ \overline{\langle u_i(t) u_k\rangle^3}$),

получаем для $T > T_c$ следующее выражение для $M(z)$:

$$M_{ik}(z) = \lambda_1 \delta_{ik} \big(\!\big(u_i \mid u_i \big)\!\big) + (1/6)\left[\lambda_{3a}\delta_{ik} + \lambda_{3b}(1-\delta_{ik}) \right] \times \big(\!\big(u_i^3 \mid u_k^3 \big)\!\big)^{ir}, \qquad (6)$$

где

$$\lambda_1 = \overline{\left(3B_i \langle u_i^2\rangle - A_i\right)^2} - \left(3\overline{B}_i \overline{\langle u_i^2 \rangle} - \overline{A}_i\right)^2, \qquad \lambda_{3a} = 6\overline{B_i^2} \; , \quad \lambda_{3b} = 6\overline{B}_i^{\,2} \, , \qquad (7)$$

$$\big(\!\big(u_i^3 \mid u_k \big)\!\big)^{ir} = i\int_0^\infty dt\, e^{izt} \int_0^\beta d\tau\ 6\ \overline{\langle u_i(t-i\tau)\, u_k\rangle}^{\,3} . \qquad (8)$$

Корреляционные функции могут быть вычислены с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы:

$$\overline{\langle u_i(t)\, u_k\rangle} = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi}\, e^{-i\omega t}\, \omega\, n(\omega)\, Im\, \phi_{ik}(\omega + i\varepsilon) \, , \qquad (9)$$

где $n(\omega) = (e^{-\beta\omega} - 1)^{-1}$. В результате получаем замкнутую систему уравнений (4),(6)-(9) для определения релаксационной функции $\phi(z)$.

Если система неэргодична, то некоторые корреляции в ней не затухают со временем, а соответствующие корреляционные функции имеют ненулевые значения при $t \to \infty$. Возникающая при этом константа неэргодичности в модели (I) определяется следующим образом :

$$L_{ik} = \lim_{t\to\infty} \overline{\langle u_i(t)\, u_k\rangle} \, . \qquad (10)$$

Согласно (9), она связана с сингулярной частью функции релаксации: $Im\, \phi_{ik}(\omega + i\delta) = -\pi\beta L_{ik}\delta(\omega)$ + регулярная часть, и с помощью (4),(6) может быть записана в q - представлении в виде

$$\beta L_q = \lim_{z\to i\varepsilon} \left[-z\, \phi_q(z) \right] = \chi_q^T - \left[1/\chi_q^T + s_q \right]^{-1}, \qquad (11)$$

где

$$s_q = \lim_{z\to i\varepsilon} \left[-z\, M_q(z) \right] . \qquad (12)$$

Для упрощения дальнейших вычислений, пренебрегая дисперсией релаксационной матрицы, воспользуемся приближением

$$S_q \approx S = \beta\,(\lambda_1 L + \lambda_{3a} L^3), \tag{13}$$

где $L = L_{ii}$ -локальная константа неэргодичности.

Полная (включающая эргодическую и неэргодическую части) корреляционная функция $\overline{\langle u_i^2 \rangle}$, входящая в (7), может быть вычислена с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы, которая в классическом пределе дает $\overline{\langle u_i^2\rangle} = (T/N)\sum_q \chi_q^T$. Используя (II), (I3), получаем уравнение для константы неэргодичности

$$L = (T/N)\sum_q \left\{ \chi_q^T - \left[(\chi_q^T)^{-1} + \beta\,(\lambda_1 L + \lambda_{3a} L^3)\right]^{-1} \right\}. \tag{14}$$

В это уравнение входит статическая изотермическая восприимчивость χ_q^T, которая, вообще говоря, должна быть вычислена самосогласованным образом.

2. Неэргодическое поведение модели

Для проведения численных расчетов воспользуемся феноменологической формой для восприимчивости:

$$\chi_q^T = (\bar{A}_i \tau + C_o - C_q)^{-1}, \qquad T > T_c, \tag{15}$$

где

$$\tau = T/T_c - 1, \quad C_q = \sum_i C_{oi}\, exp(iqR_i), \quad C_o = C_{q=0}.$$

Спектр флуктуаций выберем в следующем модельном виде:

$$C_o - C_q = c\,(q_\perp^2 + \nu^2 q_\parallel^2), \tag{16}$$

где параметр ν учитывает анизотропию спектра.

Аппроксимируя зону Бриллюэна цилиндром с диаметром $2q_o$ и высотой $2q_o$, заменим суммы по q интегралами:

$$(1/N)\sum_q F[C_o - C_q] = 2\int_0^1 d\rho\,\rho \int_0^1 dz\; F[cq_o(\rho^2 + \nu^2 z^2)], \tag{17}$$

где $F[x]$ - произвольная функция. После такого преобразования интегрирование в (I4) может быть выполнено аналитически, в ре-

зультате чего получается трансцендентное уравнение для L. При решении этого уравнения воспользуемся оценками для T_c в приближении самосогласованных фононов /7/, согласно которому при ферродисторсионном фазовом переходе $(C_{ik} > 0)$ $(T_c/N)\sum_q \chi_q^T(\tau = 0) = \bar{A}_i/\beta\bar{B}_i$.

2.I. Решетка без дефектов

Численное решение уравнения (I4) показывает, что для достаточно малых значений параметра связи $\varphi_o = cq_o^2/A$, кроме тривиального решения $L = 0$, вблизи от T_c имеется два ненулевых решения L_1 и L_2. При $T = T_g > T_c$ они появляются скачком: $L_1(T_g) = L_2(T_g) = L_g$, и при $T < T_g$ $L_1 < L_g < L_2$. Как было показано в работе /8/, решение $L_1(T)$ динамически неустойчиво и поэтому не имеет физического смысла. Решение $L_2(T)$ представлено на рис. I.

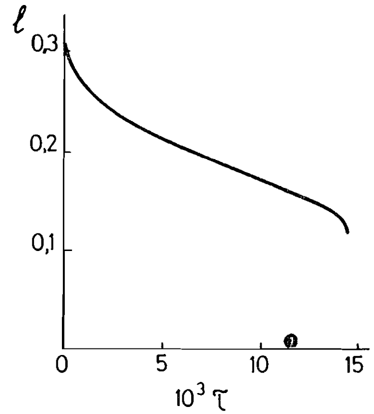

Рис. I.

Зависимость локальной константы неэргодичности $\ell = BL/A$ от приведенной температуры $\tau = T/T_c - 1$ в случае идеальной решетки $(p = 0)$ при параметрах модели φ_o = I, ν = 0,I.

Подчеркнем, что ненулевые решения существуют только для значений $\varphi_o < \varphi_g$, где φ_g зависит от параметра анизотропии ν. Значение φ_g возрастает при увеличении анизотропии системы (уменьшении параметра ν): φ_g = 0,9 при ν = I, φ_g =I,4 при ν = 0,5, φ_g = 4 при ν = 0,I.

2.2. Влияние дефектов

Рассмотрим теперь влияние дефектов на переход в неэргодическое состояние. Введем безразмерные параметры $\alpha = A_D/A$, $\beta = B_D/B$, с помощью которых средние выражаются в виде: $\bar{A}_i = A(1 - p + p\alpha)$,

$$\overline{B}_i = B\,(1-\rho+\rho\beta)$$, а константы

$$\lambda_1 = A^2 \rho\,(1-\rho)\,[3\,(B/A)\,\overline{\langle u_i^2\rangle}\,(1-\beta) - (1-\alpha)]^2,$$
$$\lambda_{3a} = B^2\,(1-\rho+\rho\beta^2). \qquad (I8)$$

Как легко видеть , с помощью графического анализа уравнения (I4) увеличение λ_1 приводит к увеличению T_g и уменьшению $L_2(T_g)$. Таким образом, переход в неэргодическое состояние становится более плавным. Вблизи от T_c получаем: $\lambda_1 \approx \rho\,(\beta-\alpha+(\beta-1)\,\tau)^2$, т.е. наибольшее увеличение λ_1 дают стабилизирующие дефекты, для которых $\alpha < 0$. На рис. 3 показана температурная зависимость $L_2(T)$ при некоторых значениях концентрации дефектов разного типа.

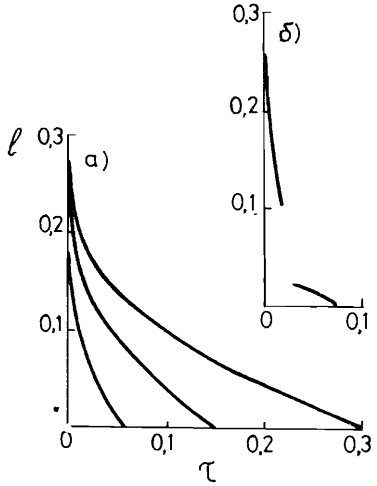

Рис. 2.

Зависимость локальной константы неэргодичности $\ell = BL/A$ от $\tau = T/T_c - 1$ для модели с дефектами при $\varphi_0 = 8$, $\nu = 0{,}I$ $\beta = I00$.
а) $\alpha = -I0$, $\rho = 2;\ 5;\ I0\cdot I0^{-5}$ (слева направо)
б) $\alpha = I00$, $\rho = I0^{-3}$.

Заметим, что при параметрах модели $\varphi_0 = 8$, $\nu = 0{,}I$ при $\rho = 0$ переход в неэргодическое состояние не происходит. Следовательно, дефекты приводят к эффективному увеличению параметра φ_g . Расчеты показывают, например, для $\nu = I$, $\alpha = -I00$, $\beta = I00$ величина $\varphi_g = I{,}3;\ 8;\ 43$ для $\rho = I0^{-6},\ I0^{-5},\ 10^{-4}$ соответственно.

3. Центральный пик

Рассмотрим связь между переходом системы в неэргодическое состояние и появлением ЦП. Согласно (4) функция рассеяния с учетом (II) и (I2) может быть записана в виде

$$S(\vec q,\omega) = [1+n(\omega)]\,(\omega/\pi)\,\mathrm{Im}\,\phi_{\vec q}\,(\omega+i\delta) =$$
$$= T\chi^T_{\vec q}\;\frac{s_{\vec q}}{(\chi^T_{\vec q})^{-1}+s_{\vec q}}\;\delta(\omega) + \frac{1+n(\omega)}{\pi}\;\frac{\omega\Gamma_{\vec q}}{(\omega^2-\Omega^2_{\vec q})^2+\omega^2\Gamma^2_{\vec q}}, \qquad (I9)$$

где частота мягкой моды $\Omega^2_{\vec q} = (\chi^T_{\vec q})^{-1} + s_{\vec q} - [\omega\,\mathrm{Re}\,M_{\vec q}(\omega)]_{\omega=\Omega_{\vec q}}$ и ее затухание $\Gamma_{\vec q} = \mathrm{Im}\,M_{\vec q}\,(\omega=\Omega_q)$ определяются регулярной частью матрицы релаксации $M_{\vec q}(\omega)$ в (5).

Сопоставим (I9) с обычно используемой в экспериментах по рассеянию формулой описания ЦП:

$$S_{cp}(\vec q,\omega) = \frac{T}{\pi}\;\frac{\delta^2(T)}{\omega_0^2(\vec q,T)\,\omega_\infty^2(\vec q,T)}\;\frac{\gamma}{\omega^2+\gamma^2}, \qquad (20)$$

где $\omega_\infty^2(\vec q,T) = \omega_0^2(\vec q,T)+\delta^2(T)$, а частоту в статическом пределе $\omega_0^2\,(q,T)$ обычно связывают со статической восприимчивостью: $\omega_0^2(T) = (\chi^T_q)^{-1}$. Формула (20) имеет тот же вид, что и полученное нами выражение для ЦП в (I9), где параметр связи определяется сингулярной частью матрицы релаксации (I2):

$$\delta^2(T) = s_q(T) \approx s = \frac{1}{T}\,(\lambda_1 L + \lambda_{3a} L^3). \qquad (2I)$$

Экспериментально наблюдаемая ширина ЦП в (20) обычно на несколько порядков меньше характерных фононных ширин, и для её объяснения обычно привлекаются дополнительные "внешние" механизмы взаимодействия (см. /I,2/). В нашей модели одной критической моды ЦП оказывается упругим - учет соответствующих дополнительных взаимодействий, "слабо" нарушающих неэргодичность, также приведет к малой конечной ширине ЦП в (I9).

Проведем количественную оценку величины $\ell = L/(A/B)$ в модели, пользуясь экспериментальными данными по рассеянию нейтронов в перовскитах ABX_3 с мягкой модой R_{25} и M_3 . Оценим безразмерную константу $\Delta_c^2 = \delta^2(T_c)/aT_c = s(T_c)/A \approx 6\,\ell_c^3/\theta_c$, где параметр модели $A = aT_c$ определяется из зависимости $\omega_0^2(T) = a\,(T-T_c)$ в области $T \gg T_c$. Безразмерная температура перехода $\theta_c = T_c/(A^2/B)$ может быть оценена, если известна высота потенциального барьера $u_0 = A^2/4B$ или расстояние между минимумами двойной ямы $2\sqrt{A/B}$. Возможна также теоретическая оценка $\theta_c \approx (\varphi_0/3)/[2+\ln(\nu^{-2})]$ (см. (I7)), где $\varphi_0 = \Omega^2_{max}/A$ определяется по максимальной частоте критической моды в зоне Бриллюэна Ω_{max}, $\nu \ll 1$ -параметр анизотропии в спектре (I6). Согласно /9,I0/ для $SrTiO_3$ имеем $\delta^2(T_c) = 0{,}3$ мэВ^2, $aT_c = $ I8 мэВ^2, $\nu^2 = 0{,}$I, $\Omega_{max} \approx$ 20 мэВ, что дает $\Delta_c^2 \approx$ I,7 · I0^{-2} и при $\theta_c \approx$ I,4 получаем $\ell_c \approx$ 0,I6. Для $RbCaF_3$ /II/ имеем $\delta^2(T) \approx$ 0,6 мэВ^2, $aT_c \approx$ 26 мэВ^2, $\nu^2 =$ I,4 I0^{-3}, $\Omega_{max} \approx$ 20 мэВ, что дает $\Delta_c^2 \approx$ 2,3 · I0^{-2}, и при $\theta_c \approx$ 0,44 получаем $\ell_c \approx$ 0,I2. Подобные же, менее надежные ввиду недостаточно полных экспериментальных данных оценки для других перовскитов ($KMnF_3$, $LaAlO_3$, $NaNbO_3$) с мягкой модой R_{25} или M_3 дают близкие значения $\ell_c \approx$ 0,I $\div$ 0,05 .

Учитывая весьма грубый характер модели (I) для описания реальных переходов в перовскитах, можно считать, что полученная оценка $\ell_c \approx$ 0,I разумно согласуется с теоретическим значением (см. рис. I,2). При этом важно отметить, что величина $\ell(T_c)$ несущественно зависит от дефектов, которые, однако, значительно увеличивают область существования ЦП по температуре (ср. рис. I и 2). Развитая теория приводит к быстрому уменьшению параметра $\delta^2(21)$ $(\Delta^2 \sim \ell^3(T))$ с увеличением $T - T_c$, что качественно согласуется с наблюдаемой в $RbCaF_3$ /II/ и $SrTiO_3$ /I0/ зависимостью, но противоречит данным /I9/. Как отмечалось в /II/, расхождение данных для зависимости $\delta^2(T)$ может быть связано с недостаточно аккуратным учетом дисперсии мягкой моды. Возможно также, что экспериментально наблюдаемый ЦП связан не только с рассмотренным в данной работе механизмом, но и дополнительно с прямым "примесным" механизмом.

Помимо ЦП переход в неэргодическое состояние при $T > T_c$ с $L_g \neq 0$, очевидно, приводит к рамановскому рассеянию света первого порядка для жестких мод, наблюдавшемуся в $KMnF_3$ и $RbCaF_3$ /I2/. Полученные авторами оценки $\ell_c = \ell(T_c) \approx \approx Q_{cp}^2(T_c)/Q^2(T_0)$ (в обозначениях работы /I2/) также дают близкие значения: $\ell_c \approx$ 0,I8 $(RbCaF_3)$ и $\ell_c \approx$ 0,05 $(KMnF_3)$. Оценка $\ell_c \approx$ 0,0I для $SrTiO_3$, полученная из данных по ЭПР /I2/, представляется заниженной.

Оценим пространственные размеры , возникающие при переходе в неэргодическое состояние кластеров ближнего порядка. Учитывая (II), получаем в изотропном случае (ν = I) при $s_q = s$ зависимость:

$$\ell(r) = \frac{\theta\pi}{\varphi_0 r}\left[\exp(-r/\xi_0) - \exp(-r/\xi_1)\right], \qquad (22)$$

где $\xi_0 = \sqrt{\varphi_0/\tau}$, $\xi_1 = \sqrt{\varphi_0/(\tau+\Delta^2)}$, $\Delta = s(T)/A$, $r = q_0 R$.

При $r < \xi_1 < \xi_0$ $\ell(r) \approx const$, и размеры кластера определяются корреляционной длиной ξ_1. При $\tau \to 0$ согласно приведенным оценкам $\xi_1 \approx \sqrt{\varphi_0/\Delta_c^2} \approx 30$, т.е. размеры кластеров составляют $\sim$30 постоянных решетки. В анизотропном случае, $\nu^2 \ll 1$, корреляционная длина $\xi_{12} \approx \nu\sqrt{\varphi_0/\Delta^2} \ll \xi_{11}$, т.е. кластеры имеют квазидвумерный характер.

4. Заключение

Основной результат исследования модели структурного фазового перехода (I) состоит в обнаружении динамического фазового перехода из эргодического в неэргодическое состояние при $T = T_g \geq T_c$. Этот переход характеризуется динамическим параметром порядка - константой неэргодичности L_{ij} (I0). Область $T_c - T_g$ существования неэргодической фазы, $L_{ij} \neq 0$, определяется безразмерной константой связи $\varphi_0 = cq_0^2/A$ и величиной анизотропии спектра флуктуаций параметра порядка в (I5), (I6): $T_c - T_g$ тем больше, чем меньше φ_0 и сильнее анизотропия $\nu^2 \ll 1$.

Неэргодическая фаза может возникать как в идеальной решетке, так и в решетке с примесями. Последние при малой их концентрации (p = I0^{-4} $\div$ I0^{-5}) существенно не меняют величину $L(T_c)$, но значительно увеличивают область существования неэргодической фазы. Этот результат, а также сильное влияние стабилизирующих парафазу примесей ($\alpha = A_D/A < 0$ в (I8)) показывают, что роль примесей в развитой теории совершенно другая, чем в теориях "примесного" ЦП /I/, в которых ЦП возникает только при медленно релаксирующих или замороженных дефектах.

Переход в неэргодическое состояние с $L_{ij} \neq 0$ в (I0) соответствует образованию кластеров ближнего порядка при $T_c < T < T_g$, с характерной корреляционной длиной $\xi_1 \sim \sqrt{\varphi_0/\Delta^2}$ (см. (22)). Наличие их естественным образом объясняет наблюдающиеся в экспериментах в парафазе предельно узкий ЦП и рамановское рассеяние первого порядка. Оценка величины безразмерной константы неэргодичности, полученная из этих экспериментов, качественно согласуется с теоретическим значением.

Значительный интерес для проверки развитой теории представляет тщательное измерение температурной зависимости интенсивности ЦП (величины $\delta^2(T)$ в (20)). Необходимо также уточнение развитой теории при учете вкладов более высокого порядка в матрицу релаксации (5) в более общей, чем (I), модели структурного перехода.

Авторы благодарят В. Гетце за стимулирующие замечания.

Литература

I. Брус А.Д., Каули Р.А. Структурные фазовые переходы ."Мир", М., I984.
2. Müller K.A. In.: Statics and Dynamics of Nonlinear Systems. Springer, Berlin, I983, p. 68.
3. Götze W. In.: Recent Developments in Condensed Matter Physics, New York , Plenum Press, I98I, v. I, p. I33.
4. Aksenov V.L., Bobeth M., Plakida N.M., Schreiber J. JINR, EI7-85-69I, Dubna, I985.
5. Церковников Ю.А. ТМФ, I98I, т. I9, с. 2I9.
6. Götze W., Sjögren L. J. Phys. C., I984, v. I7, p. 57-59.
7. Аксенов В.Л., Плакида Н.М. ТМФ, I978, т. 35, с. I04.
8. Götze W. Z. Phys. B., I985, v. 60, p. I95.
9. Shapiro S.M., Axe J.D., Schirane G., Riste T. Phys. Rev. B., I972, v. 6, p. 4332.
10. Currat R., Muller K.A., Berlinger W., Denoyer F., Phys.Rev. B, 1978, vol.17, p.2937.
11. Almairac R., Rousseau M., Gesland J.Y., Nouet J., Hennion B., J.Phys. (Paris), 1977, vol.38, p.1429.
12. Bruce A.D., Taylor W., Murray A.F., J.Phys. C., 1980, vol.13, p.483.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 мая I986 года.

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. и др. Р17-86-299

К теории центрального пика при структурных фазовых переходах

Предложен универсальный механизм, объясняющий появление центрального пика при структурных фазовых превращениях переходом от эргодического к неэргодическому динамическому поведению системы при некоторой температуре T_g выше температуры фазового перехода. Исследована скалярная решеточная модель φ^4 с дефектами. Обсуждается связь неэргодического состояния с возникновением кластеров ближнего порядка и экспериментами по КРС.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Aksenov V.L. et al. P17-86-299

On the Theory of the Central Peak at Structural Phase Transitions

A universal mechanism is proposed, which explains the appearance of the central peak by means of a transition from ergodic to nonergodic dynamical behaviour of the system at some temperature T_g above the phase transition. A detailed investigation of the scalar lattice φ^4-model with defects is given. The relation between the nonergodic state and appearance of precursor clusters and Raman scattering experiments is discussed.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986