ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P17 - 9853

Н.М.Плакида, Г.Л.Маилян

ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ВИБРОННОЙ МОДЕЛИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА

1976

P17 - 9853

Н.М.Плакида, Г.Л.Маилян

ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В ВИБРОННОЙ МОДЕЛИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА

Направлено в "ФТТ"

Плакида Н.М., Маилян Г.Л. Р17 - 9853

Флуктуационные эффекты в вибронной модели сегнетоэлектрика

Рассмотрена модель сегнетоэлектрика-полупроводника при учете флуктуаций параметра порядка (мягких фононов) в свободной энергии системы. Вычислена температура фазового перехода (ФП) и получено разложение Ландау для свободной энергии. Учет флуктуаций значительно понижает температуру ФП по сравнению с приближением среднего поля и при определенных условиях может давать ФП первого рода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1976

Plakida N.M., Mailian G.L. P17 - 9853

Fluctuation Effects in the Vibronic Model of Ferroelectric

The model of ferroelectric-semiconductor with account of fluctuations of the order parameter (the soft phonons) is considered. The temperature of the phase transition is calculated and the Landau expansion for the free energy is calculated. The fluctuations considerably reduce the temperature of the phase transition in comparison with the mean-field approximation and can give the phase transition of the first order.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research
Dubna 1976

В работах [1] был рассмотрен сегнетоэлектрический фазовый переход /ФП/ в вибронной модели, представляющей собой модель полупроводника, в котором достаточно сильное межзонное электрон-фононное взаимодействие приводит к деформации решетки при гибридизации валентной и зоны проводимости. Температура ФП и уравнение для параметра порядка - среднего смещения ионов одной из подрешеток, были вычислены в [1] в приближении среднего поля /ПСП/, в котором учитывается лишь взаимодействие электронов со статическим смещением ионов. Известно, однако, что флуктуации параметра порядка, в данном случае коллективные возбуждения - мягкие фононы, играют важную роль в ФП и учет их необходим при описании сегнетоэлектрических ФП /см. [2-5]/. В работах [6] было высказано предположение, что учет коллективных возбуждений при структурных переходах должен приводить к ФП первого рода.

В настоящей работе мы обсудим роль флуктуаций параметра порядка - мягких фононов, в вибронной модели сегнетоэлектрика [1], пользуясь полученными ранее в [7] результатами для функций Грина в этой модели. Будет показано, что учет вклада мягких фононов в свободную энергию приводит к существенному изменению картины ФП: температурная зависимость параметра порядка в основном определяется фононной подсистемой, а не электронной, как в ПСП, что приводит к значительному понижению температуры перехода по сравнению с ПСП, и при определенных условиях ФП становится переходом первого рода.

1. Свободная энергия сегнетоэлектрика-полупроводника

Гамильтониан вибронной модели сегнетоэлектрика /1/ представим в виде:

$$H = H_0 + H_1(\lambda), \qquad /1/$$

$$H_0 = \sum_{n,\vec{k}} \epsilon_{n\vec{k}} a^+_{n\vec{k}} a_{n\vec{k}} + \sum_{n,\vec{k}} V(0) a^+_{n\vec{k}} a_{\bar{n}\vec{k}} y + \frac{1}{2}\sum_{\vec{q}} (P^+_{\vec{q}} P_{\vec{q}} + \omega^2_{\vec{q}} Q^+_{\vec{q}} Q_{\vec{q}}) + \frac{N}{2}\omega_0^2 y^2, \qquad /1а/$$

$$H_1(\lambda) = \frac{\lambda}{\sqrt{N}} \sum_{n,\vec{k},\vec{q}} V(\vec{q}) a^+_{n\vec{k}} a_{\bar{n}\vec{k}-\vec{q}} Q_{\vec{q}}, \qquad /1б/$$

где $a^+_{n\vec{k}}$ и $a_{n\vec{k}}$ - операторы рождения и уничтожения электронов с импульсом $\vec{k}$ и энергией $\epsilon_{n\vec{k}}$ в зоне $n=1,2$; $V(\vec{q})$–матричный элемент межзонного электрон-фононного взаимодействия, и поэтому при суммировании по $n=1,2$ индекс $\bar{n}=2,1$, соответственно; $Q_{\vec{q}}$ и $P_{\vec{q}}$ - нормальные координата и импульс активного оптического фонона с частотой $\omega_{\vec{q}}$, а $y = N^{-1/2} < Q_{\vec{q}=0} >$ - среднее статическое смещение ионов одной из подрешеток при ФП. Гамильтониан H_0 описывает систему в ПСП, а $H_1(\lambda)$ учитывает взаимодействие электронов с фононами-флуктуациями смещений ионов. Константа связи λ меняется от 0 до 1, что соответствует переходу от гамильтониана H_0 к полному гамильтониану H. Отметим, что гамильтониан /1/ может описывать сегнетоэлектрический ФП, если активная мода нечетная /псевдоэффект Яна-Теллера/; если же фононная мода четная, то гамильтониан /1/ описывает структурный переход в полупроводнике с узкой зоной /см., напр., /6/ /. В последующих расчетах четность фононной моды роли не играет, и поэтому полученные результаты в равной степени относятся к обоим переходам.

Определяя свободную энергию, зависящую от параметра λ, в виде

$$F(\lambda) = -T \ln Sp(e^{-\frac{H(\lambda)}{T}}), \qquad /2/$$

получаем для нее уравнение

$$F = F_0 + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} < H_1(\lambda) >_\lambda , \qquad /3/$$

где $F_0 = F(\lambda = 0)$- свободная энергия в приближении среднего поля, которая, согласно /1/, может быть записана в виде:

$$F_0 = -NT \ln[2(1+ \mathrm{ch}\frac{\bar{\Lambda}}{2T})] + \frac{N}{2}\omega_0^2 y^2 + T\sum_{\vec{q}} \ln(2\,\mathrm{sh}\frac{\omega_{\vec{q}}}{2T}). \qquad /3а/$$

Эффективная щель $\bar{\Lambda}^2 = \Lambda^2 + 4V^2(0) y^2$ учитывает изменение затравочной щели $\Lambda = \epsilon_2(\vec{k}) - \epsilon_1(\vec{k})$ в полупроводнике при статическом смещении подрешетки на величину y/1/. Последний член - свободная энергия фононной подсистемы без учета электрон-фононного взаимодействия, не зависит от параметра y и поэтому не дает вклада в уравнение для y в ПСП.

Для вычисления поправки к свободной энергии в /3/ удобно воспользоваться уравнением движения для двухвременных функций Грина $D_{\vec{q}}(t-t') = \ll Q_{\vec{q}}(t); Q^+_{\vec{q}}(t') \gg$, фурье-компонента которой удовлетворяет, согласно /7/, уравнению

$$(\omega^2 - \omega^2_{\vec{q}}) D_{\vec{q}\lambda}(\omega) = 1 + \frac{\lambda}{\sqrt{N}}\sum_{n,\vec{k}} V(\vec{q}) \ll a^+_{n\vec{k}} a_{\bar{n}\,\vec{k}+\vec{q}} | Q^+_{\vec{q}} \gg_\omega = \qquad /4/$$

$$= 1 + \Pi_{\vec{q}\lambda}(\omega) D_{\vec{q}\lambda}(\omega).$$

Пользуясь спектральной теоремой для функций Грина в уравнении /4/, находим $< H_1(\lambda) >$ и получаем уравнение /3/ в виде

$$F = F_0 + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\; n(\omega) \sum_{\vec{q}} \{-\frac{1}{\pi} \mathrm{Im}[\Pi_{\vec{q}\lambda}(\omega+i\epsilon) D_{\vec{q}\lambda}(\omega+i\epsilon)]\}, \qquad /5/$$

где $n(\omega) = (e^{\omega/T}-1)^{-1}$. Вычисляя теперь поляризационный оператор $\Pi_{\vec q\lambda}(\omega)$ в /4/ согласно /7/ в петлевом приближении, получим

$$\Pi_{\vec q\lambda}(\omega) = \lambda^2 \Pi_{\vec q}(\omega) =$$

$$= \frac{\lambda^2}{N} \sum_{n,n',\vec k} V^2(\vec q) \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\omega+\omega_1-\omega_2} [f(\omega_1) - f(\omega_2)] \times \qquad /6/$$

$$\times [-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G^{(0)}_{n'\vec k, n\vec k}(\omega_1 + i\epsilon)][-\frac{1}{\pi}\operatorname{Im} G^{(0)}_{n\vec k+\vec q, n'\vec k+\vec q}(\omega_2 + i\epsilon)],$$

где электронные функции Грина вычислены в ПСП с гамильтонианом H_0 и не зависят от λ /см./7//. Это позволяет провести интегрирование по λ в /5/ и записать поправку к свободной энергии в виде /ср. с /6/ /

$$\Delta F = F - F_0 = \frac{T}{2\pi i} \int_c dz \operatorname{cth}\frac{z}{2T} \sum_{\vec q} \ln \frac{z^2 - \omega^2_{\vec q} - \Pi_{\vec q}(z)}{z^2 - \omega^2_{\vec q}} = \qquad /7/$$

$$= \frac{T}{2\pi i} \int_c dz \ln \operatorname{sh}\frac{z}{2T} \sum_{\vec q} \{ \frac{[z^2 - \omega^2_{\vec q} - \Pi_{\vec q}(z)]'}{z^2 - \omega^2_{\vec q} - \Pi_{\vec q}(z)} - \frac{[z^2 - \omega^2_{\vec q}]'}{z^2 - \omega^2_{\vec q}} \},$$

где контур C в комплексной плоскости z охватывает положительную полуось в положительном направлении и штрих у квадратной скобки означает дифференцирование по z. Вычисляя поляризационный оператор согласно /6/, убеждаемся, что основной вклад в интеграл по z в /7/ дает мягкая мода, т.е. решение уравнения $z^2 - \omega^2_{\vec q} - \Pi_{\vec q}(z) = 0$ с наименьшим значением $z = \Omega_{\vec q}$. Вклад от остальных нулей знаменателя в первом слагаемом в /7/ почти полностью компенсируется вкладом от полюсов $\Pi_{\vec q}(z)$ в числителе, которые описывают возбуждения электрон-дырочной пары, если энергия ее $\Delta \approx \epsilon_{2\vec k} - \epsilon_{1\vec k} \gg \omega_0$.

В этом случае поправка к свободной энергии определяется только за счет перенормировки фононной частоты и имеет вид

$$\Delta F = T \sum_{\vec q} \ln(2 \operatorname{sh}\frac{\Omega_{\vec q}}{2T}) - T\sum_{\vec q} \ln(2\operatorname{sh}\frac{\omega_{\vec q}}{2T}). \qquad /8/$$

Следовательно, полная свободная энергия с учетом /3а/ принимает окончательный вид

$$F = -NT \ln[2(1+\operatorname{ch}\frac{\bar\Lambda}{2T})] + \frac{N}{2}\omega_0^2 y^2 + T\sum_{\vec q} \ln(2\operatorname{sh}\frac{\Omega_{\vec q}}{2T}), \qquad /9/$$

где частота мягкой моды $\Omega^2_{\vec q} = \omega^2_{\vec q} + \operatorname{Re}\Pi_{\vec q}(\Omega_{\vec q})$ зависит от смещения подрешеток y через электронные функции Грина в /6/.

2. *Температура перехода и разложение Ландау*

Температура фазового перехода T_c и уравнение для равновесного значения параметра порядка $y = y_0(T)$ определяется из уравнения $dF/dy = 0$, которое, согласно /9/, имеет вид

$$y\{1 - \frac{g}{\sqrt{1+x^2}} \operatorname{th}\frac{\bar\Lambda}{4T} + \frac{g}{\Lambda}\frac{1}{N}\sum_{\vec q}\frac{1}{\Omega_{\vec q}}\frac{d\Omega^2_{\vec q}}{dx^2}\operatorname{cth}\frac{\Omega_{\vec q}}{2T}\} = 0, \qquad /10/$$

где введено безразмерное смещение $x^2 = \bar\Lambda^2/\Lambda^2 - 1 = (2g\omega_0^2/\Lambda)y^2$ и безразмерная константа электрон-фононной связи $g(q) = 2V^2(\vec q)/\Lambda\omega_0^2$, $g = g(0)$. При $T > T_c$ равновесное смещение подрешеток $y_0 = 0$, а при $T < T_c$ возникает решение $y_0(T) \neq 0$, которое обращает в нуль скобку в /10/. Следовательно, сама температура перехода T_c определяется из уравнения

$$1 - g \operatorname{th}\frac{\Delta}{4T_c} + \frac{g}{\Delta}\frac{1}{N}\sum_{\vec q}(\frac{1}{\Omega_{\vec q}}\frac{d\Omega^2_{\vec q}}{dx^2}\operatorname{cth}\frac{\Omega_{\vec q}}{2T_c})_{x=0} = 0. \qquad /11/$$

Как будет показано далее, $T_c \ll \Delta$, и поэтому температурной зависимостью в электронной подсистеме можно пренебречь: $\mathrm{th}(\Delta/4T_c) \approx 1$. Таким образом, учет флуктуаций параметра порядка меняет картину ФП: переход из сегнетофазы, $y_0 \neq 0$, в парафазу, $y_0 = 0$, обусловлен теперь не заполнением верхней зоны электронов, как в ПСП /1/, а увеличением колебательной энергии решетки с ростом температуры: при температуре перехода T_c выигрыш в электронной энергии при смещении подрешеток уже не достаточен, чтобы скомпенсировать проигрыш в энергии фононной подсистемы: $dF_{\text{эл.}}/dx^2 < 0$, но $dF_{\text{фон.}}/dx^2 > 0$. Нетрудно оценить температуру T_c в двух предельных случаях:

$$T_c \gg \omega_0 , \qquad /12а/$$

$$\frac{T_c}{\Delta} = \frac{g-1}{g}\left[\frac{1}{N}\sum_{\vec q}\frac{2}{\Omega^2_{\vec q}}\frac{d\Omega^2_{\vec q}}{dx^2}\right]^{-1}_{x=0} \approx \frac{1}{9}\,\frac{g-1}{g^2},$$

$$T_c \ll \omega_0, \qquad /12б/$$

$$\left(\frac{T_c}{\Delta}\right)^2 = \frac{g-g_c}{g}\,\frac{\omega_0}{\Delta}\left[\frac{\pi^2}{\omega_0^2}\,\frac{d\Omega_0^2}{dx^2}\right]^{-1}_{x=0} \approx \frac{g-g_c}{14g^2}\,\frac{\omega_0}{\Delta},$$

где для оценки суммы по $\vec q$ в /11/ мы воспользовались дебаевским приближением, полагая $\omega_\Gamma \approx \omega_0$, и, согласно расчетам в /7/, оценили зависимость частоты мягкой моды от смещения в виде

$$\frac{d\Omega^2_{\vec q}}{dx^2} = \frac{d\Pi_{\vec q}(\Omega_{\vec q})}{dx^2} \approx \frac{d\Pi_{\vec q}(0)}{dx^2} \approx \frac{3}{2}\,\frac{\omega_0^2 g(\vec q)}{(1+x^2)^{5/2}}. \qquad /13/$$

В /12б/ введено минимальное значение константы связи g_c ниже которой ФП невозможен:

$$g_c = 1 + \frac{g}{\Delta}\,\frac{1}{N}\sum_{\vec q}\frac{1}{\Omega_{\vec q}}\,\frac{d\Omega^2_{\vec q}}{dx^2} \approx 1 + 2g^2\frac{\omega_0}{\Delta}. \qquad /14/$$

Поправка к значению $g_c^{(0)} = 1$ в ПСП /1/ обусловлена учетом нулевых колебаний и обычно мала: $\omega_0 \ll \Delta$. Как видно, в обоих случаях температура перехода $T_c \ll \Delta$ при любых значениях константы связи: $(T_c/\Delta)_{max} \sim 1/40$ при $g \approx 2$. При этом случай $T_c \gtrsim \omega_0$ может быть реализован лишь для широкощельных полупроводников: $\Delta \gtrsim 40\omega_0$. Для узкощельных полупроводников, $\Delta \lesssim 10\omega_0$, температура перехода $T_c \ll \omega_0$ и целиком обусловлена вкладом в свободную энергию мягких фононов - флуктуаций параметра порядка. Температура перехода $T_c^{(0)}$, вычисленная в ПСП /1/, всегда больше: $T_c^{(0)} = (\Delta/2)\{\ln[(g+1)/(g-1)]\}^{-1} \gg T_c$.

Чтобы описать картину ФП, построим разложение Ландау для свободной энергии /9/ по степеням параметра порядка $x^2 \ll 1$:

$$f(T, x^2) = \frac{1}{N}F(T, x^2) = \alpha(T)x^2 + \frac{1}{2}\beta(T)x^4 + \frac{1}{6}\gamma(T)x^6, \qquad /15/$$

где для первого коэффициента, согласно /10/, /11/, получаем:

$$\alpha(\tau) = \left(\frac{df}{dx^2}\right)_{x=0} = \frac{\tau}{8T_c}\,\frac{1}{N}\sum_{\vec q}\frac{d\Omega^2_{\vec q}}{dx^2}\,\mathrm{sh}^{-2}\frac{\Omega_{\vec q}}{2T_c} \equiv a\tau, \qquad /16/$$

где $\tau = (T-T_c)/T_c$ - безразмерная температура. В предельных случаях $T_c \gg \omega_0$ и $T_c \ll \omega_0$ получаем, соответственно, $a = \Delta(g-1)/4g$ и $a = \Delta(g-1)/2g$ при $T \neq 0$. При $T = 0$ ФП может быть вызван изменением константы связи при действии внешнего давления:

$$\alpha(g) = \Delta\,\frac{g_c - g}{4g}. \qquad /16а/$$

При $g > g_c$ возможно появление сегнетофазы с $x \neq 0$.

Второй коэффициент разложения может быть представлен в виде

$$\beta(T) = \frac{d^2 f}{d(x^2)^2}\Big|_{x=0} = \beta_0[1-\xi(T)], \quad \beta_0 = \frac{\Delta}{8}, \qquad /17/$$

где флуктуационная поправка к ПСП обусловлена вкладом мягких фононов:

$$\xi(T) = \frac{1}{\Delta N}\sum_{\vec q}\Big\{\frac{1}{\Omega^3_{\vec q}}\Big(\frac{d\Omega^2_{\vec q}}{dx^2}\Big)^2 - \frac{1}{2\Omega_{\vec q}}\frac{d^2\Omega^2_{\vec q}}{d(x^2)^2}\Big\}\,\mathrm{cth}\frac{\Omega_{\vec q}}{2T} +$$

$$+\frac{1}{\Delta N}\sum_{\vec q}\frac{1}{\Omega^2_{\vec q}}\Big(\frac{d\Omega^2_{\vec q}}{dx^2}\Big)^2\frac{1}{2T}\,\mathrm{sh}^{-2}\frac{\Omega_{\vec q}}{2T}. \qquad /18/$$

Заметим, что все члены в /18/ положительны $(d^2\Omega^2_{\vec q}/d(x^2)^2 < 0, \; , \; d\Omega^2_{\vec q}/dx^2 > 0)$ и могут достигать значений порядка 1 даже вдали от температуры перехода T_c. При $T \to T_c$ $\xi(T)$ неограниченно возрастает за счет первого члена в /18/:

$$\frac{1}{N}\sum_{\vec q}\frac{1}{\Omega^3_{\vec q}}\,\mathrm{cth}\frac{\Omega_{\vec q}}{2T} \approx \frac{2T}{N}\sum_{\vec q}\frac{1}{\Omega^4_{\vec q}} \sim \frac{2T}{\omega_0^3}\,\frac{1}{\Omega_0(T)}, \qquad /19/$$

если считать, что $\Omega_0(T)\to 0$ при $T \to T_c$. Нужно, однако, отметить, что при вычислении свободной энергии /8/ для частоты мягкой моды $\Omega_{\vec q}$ мы пользовались ПСП для поляризационного оператора в /6/, и поэтому частота Ω_0 должна обращаться в нуль при температуре перехода $T_c^{(0)}$, вычисленной в ПСП. Поскольку $T_c^{(0)} >> T_c$, то в принятом приближении следует считать $\Omega_0(T_c) \lesssim \omega_0$, что приводит к следующей оценке для флуктуационной поправки:

$$\xi(T) \approx 10\frac{g-1}{g}\,\frac{T}{T_c}, \quad T_c >> \omega_0, \qquad /18a/$$

$$\xi(T) \approx 10g\frac{\omega_0}{\Delta} + 10\frac{g-1}{g}\Big(\frac{T}{T_c}\Big)^2, \quad T_c << \omega_0. \qquad /18б/$$

Учитывая сделанные выше замечания о величине температуры перехода, приходим к выводу, что флуктуационный параметр $\xi(T)$ может быть мал лишь для широкощельных полупроводников, $\Delta >> 10\omega_0$, в узкой области значений констант связи $g-1 << 0{,}1$. В остальных случаях $\xi(T) > 1$ и $\beta(T) < 0$ даже вдали от T_c, в результате чего ФП становится переходом первого рода /ср. с /6//. При этом необходимо вычислить третий коэффициент:

$$\gamma(T) = \frac{d^3 f}{d(x^2)^3}\Big|_{x=0} \approx \frac{3}{4}\Delta\Big(1-\frac{1}{5}\,\frac{g-1}{g}\,\frac{T}{T_c}\Big) - \frac{15}{2}\beta(T) +$$

$$+\frac{T}{N}\sum_{\vec q}\frac{1}{\Omega^6_{\vec q}}\Big(\frac{d\Omega^2_{\vec q}}{dx^2}\Big)^3, \qquad /20/$$

где приведено лишь выражение в случае $T_c >> \omega_0$. Видно, что при $\beta(T) < 0$ условие $\gamma(T) > 0$ выполняется. Отметим, что последний член в /20/ может также давать большой вклад, порядка $\Omega_0^{-3}(T)$, если $\Omega_0 \to 0$ при $T \to T_c$.

В случае $\beta(T) < 0$ температура ФП первого рода определяется стандартной формулой

$$T_1 = T_c\Big(1 + \frac{3}{2\Delta}\,\frac{g}{g-1}\,\frac{\beta^2(T_1)}{\gamma(T_1)}\Big) > T_c \qquad /21/$$

и может значительно превышать T_c.

В случае $\beta(T_c) > 0$ равновесное значение параметра порядка - смещения подрешеток $x_0(T)$ при $\tau \lesssim 0$ определяется выражением

$$x_0^2(T) = -\frac{\alpha(T)}{\beta(T)} = \tau\frac{a}{\beta(T_c)}. \qquad /22/$$

При $T=0$ равновесное смещение достигает максимального значения и, согласно /10/, равно

$$x_0^2(T=0) = \frac{2(g-g_c)}{g}(1-10g\frac{\omega_0}{\Lambda})^{-1}. \qquad /23/$$

Учет флуктуационных поправок увеличивает равновесное значение смещения подрешеток и приводит к дополнительной температурной зависимости по сравнению с ПСП. Температурная зависимость теплоемкости и других термодинамических величин при ФП может быть определена стандартным образом из разложения Ландау /15/.

3. *Обсуждение*

Проведенный в настоящей работе учет флуктуационных поправок в свободной энергии для вибронной модели сегнетоэлектрика - полупроводника /1/ оказывается существенным и необходим для количественного сравнения результатов теории с экспериментом. Наиболее важное влияние флуктуации параметра порядка оказывают на температуру ФП, которая значительно понижается по сравнению с ПСП: для узкощельных полупроводников она оказывается порядка или меньше частоты активных оптических фононов. Подобное же понижение температуры ФП, вычисленной в ПСП, следует ожидать при учете флуктуационных поправок и для других структурных переходов, обусловленных неустойчивостью электрон-фононной системы. При этом для объяснения низких температур ФП, наблюдаемых в эксперименте, не обязательно учитывать собственный ангармонизм колебаний решетки, как это предлагается в /1/.

Отметим в связи с этим недавнюю работу /8/, где учет диаграмм более высокого порядка по электрон-фононному взаимодействию для поляризационного оператора также дал более низкую по сравнению с ПСП температуру ФП, согласующуюся с точностью до численных коэффициентов с нашей формулой /12а/.

Флуктуационные поправки могут приводить к изменению рода перехода: для узкощельных сегнетоэлектриков полупроводников он становится переходом первого рода с температурой $T_1 > T_c$ (20). Если воспользоваться самосогласованным подходом при вычислении частот фононов /9/, т.е. определять частоту мягкой моды $\Omega_{\vec{q}}$ в /9/ из полной функции Грина, так, чтобы $\Omega_{\vec{q}=0} \to 0$ при $T \to T_c$, то ФП, согласно /18/, /19/, всегда должен быть переходом первого рода в соответствии с утверждением в работах /6/. Однако окончательные выводы о роде перехода можно сделать лишь после изучения собственно корреляционных эффектов, обусловленных взаимодействием флуктуаций - мягких фононов при учете ангармонического взаимодействия в фононной подсистеме. В случае достаточно слабого ангармонизма корреляционные эффекты могут быть существенны лишь в непосредственной окрестности ФП $\delta T_{кор.}$ /4/, и если $(T_1 - T_c) >> \delta T_{кор.}$, фазовый переход первого рода может быть описан в рамках развитой теории.

В заключение авторы хотели бы поблагодарить З.К.Петру за ряд полезных замечаний и Б.А.Волкова и Д.И.Хомского за обсуждения.

Литература

1. *Н.Н.Кристофель, П.И.Консин. Phys. stat. sol., 21, K39, 1967; 28, 731, 1968; Ferroelectrics, 6, 3, 1973.*
2. *В.Л.Гинзбург. ФТТ, 2, 2031, 1960.*
3. *А.П.Леванюк. ФТТ, 5, 1776, 1963; Изв. АН СССР, сер. физ., 29, 879, 1965.*
4. *В.Г.Вакс. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М., Наука, 1973.*
5. *А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. М., Наука, 1975.*
6. *Б.А.Волков, Ю.В.Копаев. Письма ЖЭТФ, 23,244,1976; ЖЭТФ, 64, 2184 /1973/.*
7. *З.К.Петру, Г.Л.Маилян. Препринт ОИЯИ, Р4-8893, Дубна, 1975; ТМФ, 27, 233, 1976.*
8. *Я.Г.Гиршберг, В.И.Тамарченко. ФТТ, 18, 1066, 1976.*
9. *Н.М.Плакида. В сб. "Статистическая физика и квантовая теория поля". Под ред. Н.Н.Боголюбова, М., Наука, 1973, стр. 205-240.*

Рукопись поступила в издательский отдел 8 июня 1976 года.