ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 10476

В.Л.Аксенов, С.Стаменкович

ТЕОРИЯ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ НА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ С ВОДОРОДНЫМИ СВЯЗЯМИ

1977

P4 - 10476

В.Л.Аксенов, С.Стаменкович*

ТЕОРИЯ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ НА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ С ВОДОРОДНЫМИ СВЯЗЯМИ

Направлено в журнал "Физика твердого тела"

* Институт ядерных исследований им. Б.Кидрича, Белград, СФРЮ.

Аксенов В.Л., Стаменкович С.

P4 - 10476

Теория неупругого рассеяния нейтронов на сегнетоэлектриках с водородными связями

На основе динамической модели протон-ионного взаимодействия развивается микроскопический подход к описанию рассеяния тепловых нейтронов на сегнетоэлектриках типа КДР. В энергетическом распределении нейтронов получены два пика, обусловленные связанными протон-фононными возбуждениями. Введена функция распределения этих возбуждений, которая отражает интерференцию нейтронных волн в результате туннелирования протонов.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Aksienov V.L., Stamenković S.

P4 - 10476

Theory of Inelastic Scattering of Neutrons by Hydrogen-Bonded Ferroelectrics

The microscopical approach to description of thermal neutron scattering by KDP type ferroelectrics is developed on the basis of the dynamical proton-ion interaction model. Two peaks due to bonding proton-phonon excitations are obtained in the energetic distribution of neutrons. The distribution function of these excitations which describes the neutron waves interference as a result of proton tunneling motions is introduced.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

В последнее время наблюдается повышенный интерес к кристаллам с водородными связями, в которых возможность двух положений равновесия для протонов приводит к ряду интересных явлений. Наиболее изученным примером такого рода кристаллов являются сегнетоэлектрики типа KH_2PO_4/КДР/, где при определенной температуре за счет смещения тяжелых ионов вдоль с-оси кристалла возникает спонтанная поляризация. Предполагается, что смещение ионов и появление при этом мягкой моды в спектре обусловлены поведением протонов. Анализ экспериментальных данных, полученных различными методами, показывает [1], что наиболее адекватной для описания кристаллов типа КДР является динамическая модель протон-ионного взаимодействия [2,3]. Важное место среди экспериментальных методов исследования динамики атомных движений в кристаллах занимает метод рассеяния нейтронов. При любом виде рассеяния /когерентном, некогерентном, упругом, неупругом/ на водородосодержащих соединениях главную роль в сечениях /интенсивностях/ рассеяния играет эффект интерференции нейтронных волн [5,6], являющийся прямым следствием туннелирования протонов на водородной связи. Туннелирование протонов в кристаллах КДР, а также его связь с движениями ионов были установлены в экспериментах [7,8].

Большинство теоретических работ по рассеянию нейтронов на кристаллах КДР выполнено на основе модели туннелирования при фиксированной решетке [9]. В работе [10] исследовалось критическое рассеяние в модифицированной модели де Жена с учетом протон-ионного взаимодействия в виде эффективной связи самих псевдоспиновых переменных. Однако в этом подходе описание изотопического эффекта не согласуется с результатами экспериментов, что связано с непоследовательным учетом туннелирования при переходе к бозонному представлению. В работе/11/ на основе модели /2,3/ обсуждались вопросы критического когерентного рассеяния. Эта модель в работах/4/ исследовалась полуфеноменологически при температурах, близких к нулю.

В настоящей работе в рамках модели/2,3/ развивается последовательный, с микроскопической точки зрения, подход к изучению рассеяния нейтронов на сегнетоэлектриках типа КДР в широком интервале температур.

1. *Обозначения и гамильтониан модели*

При описании рассеяния медленных нейтронов на кристаллах типа КДР достаточно учесть только ядерное рассеяние. В борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния нейтронов на ядрах в пределах телесного угла $d\Omega$ и интервале энергий dE можно представить в виде /12/:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE} = \frac{m_n^2}{(2\pi)^3} \frac{p'}{p} \sum_{ij\mu\nu} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(E_{p'}-E_p)t}\, a_{i\mu} a_{j\nu} \times \qquad /1/$$

$$\times \langle e^{-i\vec{k}\vec{R}_{i\mu}(0)}\, e^{i\vec{k}\vec{R}_{j\nu}(t)} \rangle ,$$

где m_n - масса нейтрона; $\vec{k} = \vec{p} - \vec{p}\,'$, $E = E_{p'} - E_p$ - импульс и энергия перехода; $\vec{p}$, E_p и $\vec{p}\,'$ $E_{p'}$ - волновой вектор и энергия падающего и рассеянного нейтрона соответственно. Индексы i , j нумеруют ячейки, а μ, ν - атомы. $a_{i\mu} = A_{i\mu} + B_{i\mu} (\vec{I}_n \cdot \vec{I}_{i\mu})$ - амплитуда рассеяния ядер /I_n , $I_{i\mu}$ - операторы спина нейтрона и ядер соответственно, $A_{i\mu}$ и $B_{i\mu}$ - ядерные константы/. Здесь и далее используется система единиц с $\hbar = 1$. Мгновенные координаты атомов решетки, в i -ой элементарной ячейке которой находится n тяжелых ионов и n' протонов, $\vec{R}_{i\mu}(t)(\mu = s,r,\ 1 \le s \le n,\ 1 \le r \le n')$ определим следующим образом:

$$\vec{R}_{i\mu}(t) = \langle \vec{R}_{i\mu} \rangle + \vec{u}_{i\mu}(t) \equiv \vec{x}_{i\mu} + \vec{u}_{i\mu}(t), \qquad /2/$$

где $\vec{x}_{i\mu}$ - равновесные положения атомов сорта μ в ячейке i. $\vec{u}_{i\mu}(t)$ - их динамические смещения. Средние $\langle ... \rangle$ вычисляются по каноническому ансамблю Гиббса с гамильтонианом системы, который, следуя /2/, запишем в виде:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{is}\frac{P_{is}^2}{2M_{is}} + V(\{\vec{R}_{i\mu}\}) - 2\Omega\sum_{ir} S_{ir}^{x} - \qquad /3/$$

$$-\sum_{ijr'r} J_{ij}^{rr'} S_{ir}^{z} S_{jr'}^{z} - \sum_{ijrs} S_{ir}^{z}(\vec{a}_{ij}^{rs}\vec{u}_{js}).$$

Здесь первые два члена описывают кинетическую энергию и взаимодействие ионов. При рассмотрении ионной подсистемы ограничимся гармоническим приближением в разложении потенциальной энергии по смещениям $\vec{u}_{is}$, при этом удобно перейти к разложению по нормальным координатам. Предполагается, что каждый из n' протонов находится в потенциале с двумя минимумами на r-й связи и может туннелировать из одного минимума в другой с частотой Ω /9/. Положение протона задается псевдоспином S_{ir}^{z}, равным +1/2 или -1/2, если протон находится в правом или левом минимуме. Короткодействующее взаимодействие протонов описывается четвертым членом в /3/. Последний же член описывает взаимодействие протонов и ионов в простейшем приближении. a_{ij}^{rs} - постоянная протон-ионного взаимодействия, имеющая электростатическую природу /13,14/.

В пространстве псевдоспинов от системы координат XYZ удобно перейти к координатам $\xi Y \zeta$ таким образом, чтобы средние значения $\vec{S} = \langle \vec{S}_{ir} \rangle$ были направлены вдоль оси 0ζ. При этом будет выполняться условие $\langle S_{ir}^{\xi} \rangle = \langle S_{ir}^{y} \rangle = 0$. Преобразование имеет вид:

$$S^x_{ir} = S^\zeta_{ir}\sin\Phi + S^\xi_{ir}\cos\Phi,$$
$$S^z_{ir} = S^\zeta_{ir}\cos\Phi - S^\xi_{ir}\sin\Phi, \qquad /4/$$

где Φ - угол между осями $0Z$ и 0ζ. Заметим, что при $T \geq T_c$ ось 0ζ переходит в ось $0X$.

В дальнейшем для простоты ограничимся моделью с одной протонной связью в решетке $(r=1)$ и взаимодействием протонов только с одной оптической ветвью колебаний комплекса тяжелых ионов. Производя Фурье-преобразование и преобразование /4/, гамильтониан /3/ приводим к виду

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\bar{q}j}\frac{\omega_{\bar{q}j}}{2}(B^+_{\bar{q}j}B_{\bar{q}j} + A^+_{\bar{q}j}A_{\bar{q}j}) - \sqrt{N}(H_x\sin\Phi +$$
$$+ H_z\cos\Phi)S^\zeta_0 - \sum_{\bar{q}} J_{\bar{q}}[\cos\Phi S^\zeta_{\bar{q}} - \frac{1}{2}\sin\Phi(S^-_{\bar{q}} + S^+_{-\bar{q}})]\times$$
$$\times[\cos\Phi S^\zeta_{-\bar{q}} - \frac{1}{2}\sin\Phi(S^-_{-\bar{q}} + S^+_{\bar{q}})] - \qquad /5/$$
$$- \sum_{\bar{q}} F_{\bar{q}}[\cos\Phi S^\zeta_{-\bar{q}} - \frac{1}{2}\sin\Phi(S^-_{-\bar{q}} + S^+_{\bar{q}})]A_{\bar{q}},$$

где

$$H_x = 2\Omega, \quad H_z = H^p_z + H^I_z, \quad H^I_z = |\vec{a}_0|^2 \langle S^z\rangle / M\omega^2_0,$$
$$H^p_z = 2J_0\langle S_z\rangle, \quad F_{\bar{q}} = F^*_{-\bar{q}} = \sqrt{(2M\omega_{\bar{q}j})^{-1}}\,(\vec{a}_{\vec{q}}\,\vec{e}_{\vec{q}j}),$$

M - приведенная масса комплекса тяжелых ионов, $A_{\vec{q}j}$, $B_{\vec{q}j}$ - операторы нормальных координат, которые связаны с обычными бозе-операторами рождения и уничтожения фононов соотношениями $A_{\bar{q}j} = b^+_{\bar{q}j} + b_{-\bar{q}j}$, $B_{\bar{q}j} = b^+_{\bar{q}j} - b_{-\bar{q}j}$.

2. *Сечение одноквантового рассеяния*

Рассмотрим одноквантовое неупругое рассеяние. Как видим, используя /2/, коррелятор в /1/ состоит из корреляторов операторов смещений ионов и протонов. Первый в гармоническом приближении легко вычисляется и для случая неупругого однофононного рассеяния имеет вид

$$<e^{i\vec{k}\vec{u}_i}\, e^{i\vec{k}\vec{u}_j(t)}>_{in} \approx e^{-2w(k)} <\vec{k}\,\vec{u}_i\,|\vec{k}\,\vec{u}_j(t)>, \qquad /6/$$

где фактор Дебая-Валлера определяется обычным образом: $\exp(-2w(k)) = \exp[-(1/2)<(\vec{k}\,\vec{u}_i)^2>]$.

Чтобы получить корреляторы протонных смещений, последние представим в эквивалентном виде через операторы псевдоспинов[9]:

$$e^{i\vec{k}\vec{u}_{kr}} = \alpha_k^{ir} + 2\beta_k^{ir} S_{ir}^x + 2\gamma_k^{ir} S_{ir}^z + 2\delta_k^{ir} S_{ir}^y,$$

где псевдоспиновые формфакторы α, β, γ, δ определяются с помощью базисных волновых функций протона левого и правого состояний в двухминимумном одночастичном потенциале[4], в предположении действительности этих функций $\delta_k^{ir} = 0$. Используя преобразование /4/, для неупругого рассеяния получаем

$$<e^{-i\vec{k}\vec{u}_{ir}}\, e^{i\vec{k}\vec{u}_{jr}(t)}>_{in} = |f_k^2| <[S_i^+(0)S_j^-(t) + S_i^-(0)S_j^+(t)]>, \qquad /7/$$

где мы не учитываем "недиагональные" члены типа $<S^{\pm}S^{\pm}>$, $<S^{\pm}S^{\zeta}>$[12]. Эффективный псевдоспиновый формфактор $f_k = \beta_k \cos\Phi - \gamma_k \sin\Phi$ можно вычислить в приближении двух взаимодействующих линейных осцилляторов[4,6]:

$$f_k = [e^{(\ell|2b)^2} \cos\Phi + i\sin\frac{(\vec{\ell}\vec{k})}{2}\sin\Phi]\, e^{-\frac{b^2k^2}{4}}, \qquad /8/$$

где ℓ - расстояние между минимумами потенциала, ω - классическая частота гармонического осциллятора в одном из минимумов, $b = \sqrt{\hbar/m_p\omega}$ / m_p - масса протона/.

Таким образом, сечение рассеяния является Фурье-образом от корреляционных функций смещений ионов и корреляционных функций псевдоспинов, которые можно выразить с помощью спектральных теорем [15] через двухвременные термодинамические функции Грина /ФГ/:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} \langle (\vec{k}\vec{u}_i)(\vec{k}\vec{u}_j(t))\rangle = \langle \vec{k}\vec{u}_i | \vec{k}\vec{u}_j \rangle_\omega =$$
$$= [e^{\frac{\omega}{\theta}} - 1]^{-1} [-2 \operatorname{Im} \langle\langle (\vec{k}\vec{u}_i)(\vec{k}\vec{u}_j)\rangle\rangle^r_{\omega + i\epsilon}], \qquad /9/$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t} \langle S_i^- S_j^+(t)\rangle = \langle S_i^- S_j^+ \rangle_\omega =$$
$$= [e^{\frac{\omega}{\theta}} - 1]^{-1} [-2 \operatorname{Im} \langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle^r_{\omega + i\epsilon}], \qquad /10/$$

где $\langle\langle (\vec{k}\vec{u}_i)(\vec{k}\vec{u}_j)\rangle\rangle^r_\omega$, $\langle\langle S_i^+ | S_j^- \rangle\rangle^r_\omega$ - Фурье-образы определенных обычным образом [15] запаздывающих ФГ.

В выражении /1/ произведем усреднение по изотопам, ориентациям ядерных спинов и ориентациям спинов в нейтронном пучке. После этого введем амплитуды когерентного b_0 и некогерентного b_I рассеяния:

$$b_0 = \frac{m_n^2}{(2\pi)^3} (\bar{A})^2, \quad b_I = \frac{m_n^2}{(2\pi)^3} [\bar{A^2} - (\bar{A})^2 + \frac{1}{4} \overline{B^2 I(I+1)}]. \qquad /11/$$

Переходя в /1/ к обратному пространству волновых векторов и используя /6/-/11/, получаем для неупругого одноквантового рассеяния на фононной подсистеме

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE}\right)_{in} = \frac{p'}{p} e^{-2w(k)} \sum_{qj} (N b_{0I} \Delta(\vec{k}+\vec{q}) + b_{II}) \times$$
$$\times \frac{(\vec{k}\,\vec{\ell}_{qj})^2}{2M\omega_{qj}} [1 + n(\omega)][-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} D_q(\omega + i\epsilon)], \qquad /12/$$

где $\Delta(\vec{k}+\vec{q})$ равно 1 при $\vec{k}+\vec{q}=\vec{g}_n$ или O при $\vec{k}+\vec{q}\neq\vec{g}_n$ / g_n - вектор обратной решетки/, и на протонной подсистеме:

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dE}\right)_{in}=\frac{p'}{p}(f_k)^2\sum_q (Nb_{0p}\,\Delta(\vec{k}+\vec{q})+b_{1p})\times$$
$$\times[1+n(\omega)][-\frac{2}{\pi}\,\mathrm{Im}G_q^{\xi\xi}(\omega+i\epsilon)]. \qquad /13/$$

Фактор Дебая-Валлера также связан с однофононной ФГ

$$D_q(\omega)=\langle\langle A_q|A_q^+\rangle\rangle_\omega \; : \qquad /14/$$

$$\langle(\vec{k}\,\vec{u}_i)^2\rangle=\frac{1}{NM}\sum_{qj}\frac{(\vec{k}\,\vec{e}_{qj})}{2\omega_{\bar{q}j}}\int_0^\infty d\omega\,\mathrm{cth}\frac{\omega}{2\theta}[-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}D_q(\omega)].$$

Необходимые ФГ получим методом уравнений движения /15/ с гамильтонианом /5/. Используя приближение типа хаотических фаз для псевдоспиновых функций Грина, получаем для фононной ФГ:

$$D_q(\omega)=\frac{2\omega_q(\omega^2-\epsilon_q^2)}{(\omega^2-E_{q+}^2)(\omega^2-E_{q-}^2)}, \qquad /15/$$

где ω_{qj} - частота нормальных колебаний ионов, $E_{q\pm}$ - энергия связанных протон-ионных возбуждений, которая имеет вид

$$E_{q\pm}^2=\frac{\epsilon_q^2+\omega_{qj}^2}{2}\pm\sqrt{\frac{(\epsilon_q^2-\omega_{qj}^2)^2}{4}-\sigma\lambda\omega_{qj}\,F_q^2\sin\Phi}\,. \qquad /16/$$

ϵ_q - энергия возбуждения протонной подсистемы,

$$\epsilon_q^2=\lambda^2-\sigma\lambda J_q\sin^2\Phi, \qquad /17/$$

$$\lambda=H_x\sin\Phi+H_z\cos\Phi+J_0\,\sigma\cos^2\Phi. \qquad /18/$$

ФГ $G_q^{\xi\xi}(\omega)=\langle\langle S_{-q}^{\xi}|S_q^{\xi}\rangle\rangle_\omega$ имеет вид:

$$G_q^{\xi\xi}(\omega)=\frac{\sigma\lambda(\omega^2-\omega_{qj}^2)}{2(\omega^2-E_{q+}^2)(\omega^2-E_{q-}^2)}. \qquad /19/$$

В ФГ /15/, /19/ входит параметр $\sigma=2\langle S_i^{\zeta}\rangle$. Используя операторное тождество $S_i^{\zeta}=1/2-S_i^-S_i^+$, после усреднения получаем

$$\sigma=1-\frac{2}{N}\sum_q\langle S_{-q}^-S_q^+\rangle. \qquad /20/$$

Коррелятор $\langle S_{-q}^- S_q^+\rangle$ согласно спектральным теоремам вычисляется с помощью ФГ $G_q^{+-}(\omega)$, которую получаем в виде

$$G_q^{+-}(\omega)=\frac{\sigma[\frac{\sigma}{2}\omega_{qj}F_q^2\sin^2\Phi+(\omega^2-\omega_{qj}^2)(\omega-\lambda+\frac{\sigma}{2}J_q\sin\Phi)]}{(\omega^2-E_{q+}^2)(\omega^2-E_{q-}^2)}. \qquad /21/$$

Разлагая функцию $G_q^{+-}(\omega)$ на простые дроби, можно вычислить коррелятор $\langle S_{-q}^- S_q^+\rangle$ /14/.

Используя выражения /15/, /19/, можем записать выражения для сечения рассеяния в окончательном виде. При рассеянии на фононной подсистеме:

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE\,d\Omega}\right)_{in}^{\pm}=\frac{p'}{p}e^{-2w(k)}\sum_{qj}\left(Nb_{0I}\Delta(\vec{k}+\vec{q})+b_{II}\right)\frac{(\vec{k}\vec{e}_{\vec{q}j})^2}{2M\omega_{\vec{q}j}}\times$$

$$\times\frac{\omega_{\vec{q}j}}{E_{q+}^2-E_{q-}^2}\Big\{\frac{E_{q+}^2-\epsilon_q^2}{E_{q+}}[n(E_{q+})+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}]\delta(\omega\pm E_{q+})-$$

$$-\frac{E_{q-}^2-\epsilon_q^2}{E_{q-}}[n(E_{q-})+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}]\delta(\omega\pm E_{q-})\Big\} \qquad /22/$$

и при рассеянии на протонной подсистеме:

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE\,d\Omega}\right)^{\pm}_{in} = \frac{p'}{p}|f_k|^2 \sum_q (Nb_{0p}\Delta(\vec{k}+\vec{q}) + b_{1p})\frac{\sigma\lambda}{2(E^2_{q+}-E^2_{q-})}\times$$

$$\times\Big\{\frac{E^2_{q+}-\omega^2_q}{E_{q+}}[n(E_{q+})+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}]\delta(\omega\pm E_{q+}) - \qquad /23/$$

$$-\frac{(E^2_{q-}-\omega^2_q)}{E_{q-}}[n(E_{q-})+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}]\delta(\omega\pm E_{q-})\Big\}.$$

В выражениях /22/, /23/ верхний знак соответствует рассеянию с испусканием, нижний - с поглощением связанного протон-фононного возбуждения.

3. Связанные протон-фононные возбуждения

Рассмотрим выражения /22/, /23/ при когерентном рассеянии. Заметим, что если мы выключим взаимодействие фононной и протонной подсистем, то есть положим $F_q = 0$, то получим только два пика, соответствующих энергиям фононов ω_{qj} и энергиям псевдоспиновых волн ϵ_q. Если же $F_q \neq 0$, то в энергетическом распределении нейтронов должны наблюдаться пики, соответствующие испусканию или поглощению связанных протон-фононных возбуждений. Положения этих пиков определяются законами сохранения энергии

$$E_{p'} - E_p \pm E_{k(\pm)} = 0. \qquad /24/$$

Ширина пиков в нашем приближении равна нулю, что определяется пренебрежением взаимодействием возбуждений. Эффект конечности времени жизни возбуждений и действительную ширину пиков можно рассмотреть в используемом в данной работе формализме, рассматривая следующие члены в уравнениях для функций Грина.

Наблюдение связанных протон-фононных возбуждений ограничено особенностями рассеяния нейтронов на водородосодержащих кристаллах. Когерентная часть рассеяния становится существенной только при малоугловом рассеянии. На дейтерированных образцах дисперсионная зависимость возбуждений типа $E_{q\pm}$ проявляется при квазиупругом рассеянии /4,9/. Детально эти вопросы будут рассмотрены в отдельной работе. Заметим только, что при $T \to T_c$

$$\frac{d\sigma_{coh}}{d\Omega} \sim |f_{\vec{q}_n - \vec{k}}|^2 \frac{p'}{p} \frac{T_c \cdot H_x}{E^2_{q-}}, \qquad /25/$$

где, как показано в /2,16/, E_{q-} при $T \sim T_c$ имеет преимущественно характер моды туннелирования и имеет вид $E^2_{q-} = P|T-T_c| + Qq^2$, где P и Q определяются параметрами модели /3/, /5/. При этом E_{q+} носит фононный оптический характер.

Рассмотрим некогерентное рассеяние. Сумму по q в выражениях /22/, /23/ можно вычислить, лишь зная явный вид функций $E_{q\pm}$, однако некоторые физические следствия можно получить из общего вида сечений /22/, /23/. Нейтроны, рассеянные в любом направлении, имеют непрерывный энергетический спектр в интервале энергий

$$E_p \le E_{p'} \le E_p + E_{\pm max} \qquad /26а/$$

при рассеянии с поглощением и

$$E_p \ge E_{p'} \ge \begin{cases} E_p - E_{\pm max} & \text{при } E_p > E_{\pm max} \\ 0 & \text{при } E_p < E_{\pm max} \end{cases} \qquad /26б/$$

при рассеянии с испусканием.

Поскольку $b_{1p} \approx 10^2 b_{11}$, то сечение рассеяния /22/, /23/ можно записать в виде

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE\,d\Omega}\right)^{inc}_{in} = \frac{p'}{p}\,|f_k|^2 b_{1p}(1+n(\omega))A(\omega^2), \qquad /27/$$

где мы ввели функцию распределения связанных протон-фононных возбуждений

$$A(\omega^2) = \frac{1}{N}\sum_q\left[-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\,G_q^{\xi\xi}(\omega+i\epsilon)\right]. \qquad /28/$$

Используя /8/ в /27/, видим, что сечение рассеяния является периодической функцией от угла θ между вектором рассеяния $\vec{k}$ и направлением водородной связи $\vec{\ell}$. При $\theta = 90°$, когда вектор рассеяния перпендикулярен водородной связи, сечение рассеяния минимально; при $\theta = 0$, когда $\vec{k}$ параллелен $\vec{\ell}$, сечение рассеяния максимально. Этот эффект наблюдался в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов на кристаллах КДР[7] при комнатных температурах, что явилось прямым доказательством флуктуаций протона на водородной связи. Как видно из /27/, /25/, интенсивность рассеяния при $T \to T_c$ возрастает и максимальна при $T = T_c$, что наблюдалось в [8] для упругого рассеяния. В случае $T \sim T_c$ можно ввести функции распределения отдельно для фононно-подобной E_{q+} – и псевдоспин-подобной E_{q-} - ветвей согласно определению:

$$g(\omega) = \frac{1}{N}\sum_q \delta(\omega - E_{q+}), \quad G(\omega) = \frac{1}{N}\sum_q \delta(\omega - E_{q-}). \qquad /29/$$

Тогда сечение рассеяния /22/, /23/ можно представить в виде:

$$\left(\frac{d^2\sigma^{\pm}}{dE\;d\Omega}\right)^{inc}_{in} = \frac{p'}{p}\;\frac{[n(\omega)+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}]}{\omega}\times \qquad /30/$$

$$\times\left\{b_{1p}|f_k|^2\,\frac{\sigma\lambda}{2}G(|\omega|) + b_{1I}\,e^{-2w(k)}\frac{k^2}{M}g(|\omega|)\right\}.$$

Как следует из /30/, в спектре рассеянных нейтронов при $T = T_c$ возникает центральный пик /при $\omega = 0$ / с нулевой шириной. Последнее обусловлено сделанными приближениями /см. замечание после выражения /24//. Центральный пик в кристаллах КДР наблюдался в экспериментах по рассеянию света /17/, однако природа его пока не ясна и этот вопрос требует отдельного рассмотрения. Основой для этого может служить модель /3/ /улучшенная в духе /18//, поскольку она отражает наиболее важные свойства системы, проявляющиеся при рассеянии нейтронов на водородосодержащих соединениях.

Авторы благодарны Н.М.Плакиде за прочтение рукописи и обсуждения.

Литература

1. *Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. "Мир", М., 1975.*
2. *Villian J., Stamenković S. Phys. stat. sol., 1966, 15, p.585.*
3. *Kobayashi K.K. Phys. Lett., 1967, 26A, p.55; J.Phys. Soc. Japan, 1968, 24, p.497.*
4. *Stamenkovic S. J. Low Temp. Phys., 1972, 9, pp. 475, 485.*
5. *Stiller H. Ber. Bunsenges. Phys. Chem . 1968. 72, p. 94.*
6. *Стаменкович С. ФТТ, 1968, 10, с.861.*
7. *Plesser Th., Stiller H. Sol. State Commun., 1969, 7, p. 323.*
8. *Grimm H., Stiller H., Plesser Th. Phys. stat. sol., 1970, 42, p. 207.*
9. *De Gennes P.G. Sol. State. Commun., 1963, 1, p.132.*
10. *Novaković L., Stamenković S., Vlahov A. J.Phys. Chem. Sol., 1971, 32, p.487.*
11. *Cochran W. Adv. Phys., 1969, 18, p.157.*
12. *Изюмов Ю.А. УФН, 1963, 80, с.41.*
13. *Stamenković S., Novaković L. Phys. stat. sol., 1970, 41, p.135.*
14. *Стасюк И.В., Левицкий Р.Р. УФЖ, 1969, 14, с.110; 1970, 15, с.460.*
15. *Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. "Наука", М., 1971.*

16. *Stamenković S. Dynamical Theory of Collective Atomic Motions in Hydrogen-Bonded Ferroelectrics, Thesis, Fac. Nat. Seien, and Math., Belgrade, 1975.*
17. *Lagakos N., Cummins H.Z. Phys. Rev., 1974, B10, p.1063.*
18. *Stamenković S., Plakida N.M., Aksienov V.L. Siklos T., Ferroelectrics, 1976, 14, p.655; Phys. Rev., 1976, B14, p.5080.*

Рукопись поступила в издательский отдел 2 марта 1977 года.