

# Диффузное рассеяние рентгеновского излучения на кристалле каломели вблизи температуры структурного фазового перехода

А. С. Юрков<sup>1)</sup>

644076 Омск, Россия

Поступила в редакцию 24 марта 2008 г.

Теоретически исследуется рассеяние рентгеновского излучения на кристалле каломели вблизи температуры структурного фазового перехода. Показано, что в высокотемпературной фазе возникают диффузные линии рентгеновской дифракции, соответствующие как  $X$ -точкам, так и  $Z$ -точке зоны Бриллюэна. Последние есть ни что иное, как рассеяние на биениях флуктуаций двух компонент параметра порядка. Такие линии наблюдались ранее экспериментально, но природа линий, соответствующих  $Z$ -точке, оставалась не выясненной. Показано, что  $Z$ -линия в точке  $(5, 0, 0)$  должна быть на порядок сильнее, чем наблюдавшаяся  $Z$ -линия в точке  $(4, 3, 0)$ .

PACS: 61.10.Nz, 63.70.+h

Диффузное рассеяние рентгеновского излучения на кристаллах – это давно и хорошо известное физическое явление. По существу это рассеяние с участием фононов, причем в кристаллах без мягких мод оптические фононы не дают явно выраженной дифракционной картины, а процессы с акустическими фононами дают диффузные линии, сосредоточенные вблизи узких линий фундаментального рассеяния.

В кристаллах, испытывающих непрерывные фазовые переходы с конденсацией мягкой фононной моды на границе зоны Бриллюэна, специфично рассеяние с участием этой моды. Такое рассеяние уже не сосредоточено вблизи фундаментальных линий и, поскольку флуктуации мягкой моды имеют достаточно большую корреляционную длину, проявляется в эксперименте в виде отдельных диффузных линий.

Диффузное рассеяние рентгеновского излучения с участием мягкой фононной моды наблюдалось в перовскитах [1–3], а также в кристаллах галогенидов одновалентной ртути, в частности, каломели [4–6]. В данной работе мы, для определенности, говорим о каломели, но все то же самое относится и к другим, изоморфным ей, галогенидам ртути.

В кристалле каломели мягкие фононные моды имеют волновые векторы в двух  $X$ -точках на границе зоны Бриллюэна, что дает двухкомпонентный параметр порядка структурного фазового перехода. При этом естественно ожидать возникновения диффузных линий с волновым вектором рассеяния  $\mathbf{k}$  вблизи  $X$ -точек, смещенных на некий вектор обратной решетки. И действительно, такие линии наблюдались. В единицах  $2\pi/a$ , где  $a$  – параметр тетрагональной

решетки каломели в базисной плоскости, этому рассеянию соответствуют, в частности, наблюдавшиеся значения  $\mathbf{k} = (3.5, 2.5, 0)$  и  $\mathbf{k} = (2.5, 1.5, 0)$ .

Однако в работах [4–6], кроме указанных диффузных линий, вблизи температуры фазового перехода наблюдались также и слабые диффузные линии вблизи точек  $\mathbf{k} = (3, 2, 0)$  и  $\mathbf{k} = (4, 3, 0)$ . Эти значения волнового вектора не соответствуют ни векторам обратной решетки, ни смещенным  $X$ -точкам. Природа этих линий в указанных работах осталась не выясненной.

В то же время оказывается, что при последовательном теоретическом рассмотрении рентгеновского рассеяния на кристалле каломели вблизи температуры фазового перехода, диффузное рассеяние вблизи точек  $\mathbf{k} = (3, 2, 0)$  и  $\mathbf{k} = (4, 3, 0)$  (а также им подобным) возникает совершенно естественным образом. Это ни что иное, как рассеяние, соответствующее смещенной  $Z$ -точке зоны Бриллюэна, возникающее в результате биений флуктуаций двух компонент параметра порядка. Такое значение волнового вектора возникает в силу того, что вектор  $Z$ -точки эквивалентен сумме векторов из двух  $X$ -точек.

Интересно, что рассматриваемое рассеяние экспериментально наблюдалось при довольно “неудачных” векторах рассеяния. В силу того, что мягкие моды в кристалле каломели поляризованы перпендикулярно волновому вектору соответствующей  $X$ -точки, рассеяние с  $\mathbf{k} = (4, 3, 0)$ , например, должно быть на порядок слабее, чем для  $\mathbf{k} = (5, 0, 0)$ . Тем не менее, эффект наблюдался. Ниже приводится краткое изложение теоретического анализа, из которого следует качественная физическая картина, описанная выше.

<sup>1)</sup>e-mail: fitec@omskcity.com

Рассматривая дифракцию рентгеновского излучения по теории возмущений, не сложно показать, что, с точностью до плавно зависящего от угла рассеяния множителя и в пренебрежении неполной когерентностью падающего излучения, плотность рассеянного излучения определяется величиной

$$S(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \langle n(\mathbf{r} + \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') \rangle d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}', \quad (1)$$

где  $\mathbf{k}$  – волновой вектор рассеяния,  $n(\mathbf{r})$  – электронная плотность, угловые скобки означают статистическое усреднение.

Обозначим:  $\mathbf{R}_n$  – векторы решетки Браве кристалла,  $\mathbf{b}_m$  – векторы базиса решетки,  $F_m(\mathbf{r})$  – распределение электронной плотности в  $m$ -м атоме,  $\mathbf{u}_{mn}$  – вектор флуктуационного смещения  $m$ -го атома в  $n$ -й примитивной ячейке. Для электронной плотности  $n(\mathbf{r})$  кристалла тогда можно записать:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{mn} F_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{b}_m - \mathbf{u}_{mn}). \quad (2)$$

Представив  $F_m(\mathbf{r})$  в виде фурье-интеграла и подставив это выражение в (1), получим:

$$S(\mathbf{k}) = (2\pi)^3 \sum_{m,m'} A_{mm'}(\mathbf{k}) B_{mm'}(\mathbf{k}), \quad (3)$$

где

$$A_{mm'}(\mathbf{k}) = F_m(\mathbf{k}) F_{m'}(-\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{b}_m - \mathbf{b}_{m'})}, \quad (4)$$

$$F_m(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} F_m(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \quad (5)$$

$$B_{mm'}(\mathbf{k}) = \sum_{n,n'} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})} \langle e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{u}_{mn} - \mathbf{u}_{m'n'})} \rangle. \quad (6)$$

Так как под усреднением в (6) стоит экспонента от линейной по смещениям формы, это среднее для статистически независимых флуктуационных движений факторизуется. Поэтому, интересуясь лишь эффектами флуктуаций мягких фононных мод, мы не будем рассматривать флуктуации жестких мод, которые дают лишь обычный фактор Дебая-Валлера и диффузное рассеяние на акустических фононах, сосредоточенное вблизи линий фундаментального рассеяния.

Представив смещения  $\mathbf{u}_{mn}$  в виде суммы вкладов двух компонент параметра порядка:  $\mathbf{u}_{mn} = \sum_{\alpha=1}^2 \mathbf{u}_{mn}^{\alpha}$ , получим, что усредняемая экспонента распадается на произведение двух аналогичных

экспонент, отличающихся лишь индексами, нумерующими компоненты параметра порядка.

Далее надо учесть, что в кристалле каломели фазовый переход происходит с удвоением решетки. Поэтому для половины узлов решетки Браве  $\mathbf{u}_{mn}^{\alpha} = \mathbf{e}_m^{\alpha} \eta_{\alpha}(\mathbf{R}_n)$ , где  $\mathbf{e}_m^{\alpha}$  – набор поляризационных векторов, по  $\alpha$  нет суммирования,  $\eta$  – флуктуирующее поле параметра порядка, в то время как для другой половины узлов знак другой:  $\mathbf{u}_{mn}^{\alpha} = -\mathbf{e}_m^{\alpha} \eta_{\alpha}(\mathbf{R}_n)$ .

Для того чтобы выделить узлы этих двух типов, применим следующий трюк. Пусть  $\mathbf{X}_{\alpha}$  – волновой вектор в той  $X$ -точке зоны Бриллюэна, которой соответствует  $\eta_{\alpha}$ , а система координат выбрана таким образом, что ее начало совпадает с одним из узлов решетки Браве. Для каждого из двух значений индексов  $\alpha$  введем по две функции узлов:

$$\chi_{\alpha}^{+}(\mathbf{R}_n) = \frac{1}{2} (1 + e^{i\mathbf{X}_{\alpha}\mathbf{R}_n}) \quad , \quad (7)$$

$$\chi_{\alpha}^{-}(\mathbf{R}_n) = \frac{1}{2} (1 - e^{i\mathbf{X}_{\alpha}\mathbf{R}_n}) \quad . \quad (8)$$

Одна из этих функций единична на узлах одного типа и нулевая на узлах другого типа. Вторая – наоборот, а их сумма – это единица на любом узле. Пусть, для определенности, именно первая функция выделяет узлы, на которых  $\mathbf{u}_{mn}^{\alpha} = \mathbf{e}_m^{\alpha} \eta_{\alpha}(\mathbf{R}_n)$ . Заметим, что функции  $\chi$  являются четными.

Используя тождество

$$(\chi_{\alpha}^{+}(\mathbf{R}_n) + \chi_{\alpha}^{-}(\mathbf{R}_n)) \times (\chi_{\alpha}^{+}(-\mathbf{R}_{n'}) + \chi_{\alpha}^{-}(-\mathbf{R}_{n'})) = 1, \quad (9)$$

позволяющее записать усредняемую экспоненту в виде суммы четырех слагаемых, в каждом из которых знаки в связях смещений с величиной параметра порядка уже фиксированы, получим:

$$\begin{aligned} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{u}_{mn}^{\alpha} - \mathbf{u}_{m'n'}^{\alpha})} = & \\ = \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^{\alpha}\eta_n^{\alpha}) \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^{\alpha}\eta_{n'}^{\alpha}) + & \\ + ie^{-i\mathbf{X}_{\alpha}\mathbf{R}_{n'}} \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^{\alpha}\eta_n^{\alpha}) \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^{\alpha}\eta_{n'}^{\alpha}) - & \\ - ie^{i\mathbf{X}_{\alpha}\mathbf{R}_n} \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^{\alpha}\eta_n^{\alpha}) \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^{\alpha}\eta_{n'}^{\alpha}) + & \\ + e^{i\mathbf{X}_{\alpha}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})} \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^{\alpha}\eta_n^{\alpha}) \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^{\alpha}\eta_{n'}^{\alpha}), & \quad (10) \end{aligned}$$

где мы ввели обозначение  $\eta_n^{\alpha} = \eta_{\alpha}(\mathbf{R}_n)$ .

Далее необходимо взять произведение двух сумм (10), соответствующих двум компонентам параметра порядка, и усреднить результат. При перемножении сумм будут получаться слагаемые в виде экспонент, умноженных на произведение четырех тригонометрических функций. Из физических соображений ясно, что усредненные произведения тригонометрических функций будут зависеть только от разности  $\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}$ , но не от соответствующей суммы. Поэтому

следует учитывать только те слагаемые, экспонента в которых не меняет свой знак при одновременном прибавлении к  $\mathbf{R}_n$  и  $\mathbf{R}_{n'}$  любого вектора прямой решетки.

Используя сказанное и тот факт, что сумма и разность волновых векторов  $\mathbf{X}_1$  и  $\mathbf{X}_2$  эквивалентны  $Z$ -точке, получим:

$$\begin{aligned} & \left\langle e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{u}_{mn} - \mathbf{u}_{m'n'})} \right\rangle = \\ & = \langle \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^1 \eta_n^1) \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^1 \eta_{n'}^1) \times \\ & \quad \times \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^2 \eta_n^2) \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^2 \eta_{n'}^2) \rangle + \\ & + e^{i\mathbf{X}_2(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})} \langle \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^1 \eta_n^1) \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^1 \eta_{n'}^1) \times \\ & \quad \times \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^2 \eta_n^2) \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^2 \eta_{n'}^2) \rangle + \\ & + e^{i\mathbf{X}_1(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})} \langle \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^1 \eta_n^1) \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^1 \eta_{n'}^1) \times \\ & \quad \times \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^2 \eta_n^2) \cos(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^2 \eta_{n'}^2) \rangle + \\ & + e^{i\mathbf{Z}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})} \langle \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^1 \eta_n^1) \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^1 \eta_{n'}^1) \times \\ & \quad \times \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^2 \eta_n^2) \sin(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^2 \eta_{n'}^2) \rangle, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\mathbf{Z}$  – волновой вектор, соответствующий  $Z$ -точке на границе зоны Бриллюэна.

Далее нам необходимо вычислить статистические средние в полученной формуле. Совершенно ясно, что если мы вычислим выражение

$$\langle \exp\{ia\eta_1(0) + ib\eta_1(\mathbf{r}) + ic\eta_2(0) + id\eta_2(\mathbf{r})\} \rangle, \quad (12)$$

то, комбинируя такие слагаемые с подходящими  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$ , мы найдем все, что нам нужно.

Представив усреднение в (12) в виде континуального интеграла по флуктуирующему полю параметра порядка, легко заметить, что (12) – это ни что иное, как  $\exp(-W[J]/T + W[0]/T)$ , где  $W$  – производящий функционал связанных функций Грина при источнике специфического вида:

$$\begin{aligned} J_\alpha(\mathbf{x}) = & -iaT\delta_{\alpha 1}\delta(\mathbf{x}) - ibT\delta_{\alpha 1}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}) - \\ & - icT\delta_{\alpha 2}\delta(\mathbf{x}) - idT\delta_{\alpha 2}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (13)$$

Представляя функционал  $W[J]$  через его разложение по связанным функциям Грина, получаем общее выражение требуемых нам статистических средних через связанные функции Грина флуктуирующего поля параметра порядка, причем при этом все интегрирования снимаются дельта-функциями из (13). Подчеркнем, что пока мы не предполагали гауссова характера флуктуаций, и в рамках такого подхода можно, во всяком случае пертурбативно, работать с негауссовыми флуктуациями.

Далее можно показать, что выражение (12) есть экспонента от суммы диаграмм, в которых связанные функции Грина всех порядков подсоединяют

свои “хвосты” к двум точкам  $\mathbf{x} = 0$  и  $\mathbf{x} = \mathbf{r}$  всеми возможными способами. У каждого такого слагаемого есть комбинаторный множитель и коэффициенты  $ia$ ,  $ib$ ,  $ic$ ,  $id$ , причем если в диаграммной технике для флуктуирующего поля имеются связанные диаграммы только с четным числом “хвостов” (чаще всего так и есть), то получающиеся выражения при этом оказываются действительными.

Мы, однако, не будем здесь развивать эту общую технику и ограничимся гауссовым случаем, когда имеется всего одна связанная функция Грина: двухточечная. В этом случае усреднять сомножители, относящиеся к разным компонентам параметра порядка, можно по отдельности, и нам достаточно более простого выражения, получающегося указанным способом:

$$\begin{aligned} & \langle \exp\{ia\eta_\alpha(0) + ib\eta_\alpha(\mathbf{r})\} \rangle = \\ & \exp\{-(a^2 + b^2)G_\alpha(0)/2 - abG_\alpha(\mathbf{r})\}, \end{aligned} \quad (14)$$

где  $G_\alpha(\mathbf{r})$  – связанная двухточечная функция Грина  $\alpha$ -моды, которая определяется выражением

$$G_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{T}{\lambda_{ij}^\alpha k_i k_j + \tau} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3\mathbf{k}. \quad (15)$$

В этой формуле  $\lambda_{ij}^\alpha$  – параметры дисперсии соответствующей мягкой моды,  $\tau \sim (T - T_C)$ ,  $T$  – абсолютная температура,  $T_C$  – температура фазового перехода. Отметим, что  $G_1(0) = G_2(0)$ , и в этой величине мы будем опускать индекс. Ясно, что при вычислении  $G(0)$  импульс в интеграле (15) должен быть обрезан на верхнем пределе, определяемом первой зоной Бриллюэна.

Используя приведенные выше формулы, легко получить, что величина  $B_{mm'}(\mathbf{k})$  из (6) представляется в виде суммы четырех слагаемых:

$$\begin{aligned} B_{mm'}^{(1)}(\mathbf{k}) = & e^{-W_{mm'}} \sum_{n,n'} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{nn'}} \times \\ & \times \cosh(P_1 G_1(\mathbf{R}_{nn'})) \cosh(P_2 G_2(\mathbf{R}_{nn'})), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} B_{mm'}^{(2)}(\mathbf{k}) = & e^{-W_{mm'}} \sum_{n,n'} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{X}_1)\mathbf{R}_{nn'}} \times \\ & \times \sinh(P_1 G_1(\mathbf{R}_{nn'})) \cosh(P_2 G_2(\mathbf{R}_{nn'})), \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} B_{mm'}^{(3)}(\mathbf{k}) = & e^{-W_{mm'}} \sum_{n,n'} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{X}_2)\mathbf{R}_{nn'}} \times \\ & \times \cosh(P_1 G_1(\mathbf{R}_{nn'})) \sinh(P_2 G_2(\mathbf{R}_{nn'})), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} B_{mm'}^{(4)}(\mathbf{k}) = & e^{-W_{mm'}} \sum_{n,n'} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{Z})\mathbf{R}_{nn'}} \times \\ & \times \sinh(P_1 G_1(\mathbf{R}_{nn'})) \sinh(P_2 G_2(\mathbf{R}_{nn'})), \end{aligned} \quad (19)$$

где  $\mathbf{R}_{nn'} = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}$ ,  $P_\alpha = (\mathbf{k}\mathbf{e}_m^\alpha)(\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^\alpha)$ ,

$$W_{mm'} = \frac{1}{2}G(0) \sum_{\alpha} [(\mathbf{k}\mathbf{e}_m^\alpha)^2 + (\mathbf{k}\mathbf{e}_{m'}^\alpha)^2] \quad (20)$$

Ради краткости изложения мы не будем приводить дальнейшие выкладки, они стандартны а физические результаты ясны уже из этих формул.

Прежде всего обратим внимание на экспоненты перед суммами. Это мягкомодовый фактор Дебая-Валлера. Его температурная зависимость не совпадает с температурной зависимостью обычного фактора Дебая-Валлера, что связано с тем, что жесткость мягких мод меняется с температурой.

Формулы (16)-(19) описывают рассеяние в общем случае, для процессов с участием любого числа фононов. Для наших же целей достаточно главного приближения, которое получается при замене гиперболических косинусов на единицы, а гиперболических синусов – на их аргументы. Это первые члены разложения гиперболических функций. В принципе имеется также рассеяние, соответствующее высшим членам. Однако такое рассеяние сосредоточено вблизи тех же точек обратного пространства, что и рассеяние, соответствующее первым членам разложения. Экспериментальное наблюдение таких составляющих затруднительно.

В таком приближении первое слагаемое (16) – это фундаментальное рассеяние, возникающее при равенстве волнового вектора  $\mathbf{k}$  какому-либо вектору обратной решетки. Второе и третье слагаемые (17) и (18) описывают диффузное рассеяние, соответствующее двум  $X$ -точкам зоны Бриллюэна. Форма этих диффузных линий определяется лоренцианом, стоящим под интегралом в (15). Вполне также ясно, что, поскольку в (17) и (18) стоит не интеграл, а сумма по решетке, в обратном пространстве такие диффузные линии повторяются (с медленно меняющимся множителем, возникающим из атомных формфакторов) с периодичностью обратной решетки. Рассеяние, соответствующее  $Z$ -точке, описывается слагаемым (19). Из этой формулы легко видеть, что данная часть рассеяния имеет интермодуляционную природу, так что это – рассеяние на биениях флуктуаций двух разных компонент параметра порядка.

Как ясно из изложенного, диффузные линии в  $Z$ -точках являются двухфононными и, вообще говоря, слабыми по сравнению с однофононными в  $X$ -точках. Тем не менее, поскольку в этих точках обратного пространства нет ни фундаментальных линий, ни однофононных, они вполне наблюдаемы.

Экспериментальное наблюдение таких линий в [4–6] осуществлялось в точке обратного простран-

ства, где поляризационный множитель  $P_1P_2$ , возникающий при разложении двух гиперболических синусов, весьма мал, в то время как есть точки обратного пространства, где он на порядок больше.

Действительно, так как в кристалле каломели поляризация мягких мод перпендикулярна волновому вектору соответствующей  $X$ -точки, для  $\mathbf{k} = (4, 3, 0)$  общий поляризационный множитель составляет всего лишь 0.08 от его значения при  $\mathbf{k} = (5, 0, 0)$ . При этом модуль вектора  $\mathbf{k}$  тот же самый, остальные факторы не меняются и такое же соотношение будет и для амплитуд линий.

Форма диффузных линий вблизи  $Z$ -точек определяется интегралом:

$$\int \frac{T}{\lambda_{ij}^{(1)}(q_i - k_i)(q_j - k_j) + \tau} \cdot \frac{T}{\lambda_{ij}^{(2)}q_iq_j + \tau} d^3\mathbf{q}, \quad (21)$$

и, естественно, эти линии также периодически повторяются в обратном пространстве.

Не останавливаясь на вычислении интеграла (21), отметим лишь, что характер его температурной зависимости сразу определяется из (21). Сделав преобразование  $\mathbf{q} = \tau^{1/2}\mathbf{q}'$ , легко видеть, что без учета фактора Дебая-Валлера амплитуда  $Z$ -линии зависит от температуры как  $T^2(T - T_C)^{-1/2}$ , а ее ширина при  $T \rightarrow T_C$  уменьшается как  $\Delta k \sim (T - T_C)^{1/2}$ .

Таким образом, последовательный теоретический анализ естественным образом приводит к качественной физической картине, описанной в начале данной работы. Диффузные линии, наблюдавшиеся вблизи  $Z$ -точек в [4–6], могут быть интерпретированы как рассеяние на биениях флуктуаций двух компонент параметра порядка, причем существуют эквивалентные точки обратного пространства, где такие линии должны быть на порядок сильнее. Также представляют интерес формулы, полученные для мягкомодового фактора Дебая-Валлера, который необходимо учитывать при анализе экспериментальных данных.

1. S. R. Andrews, J. Phys. C: Sol. Stat. Phys. **19**, 3721 (1986).
2. U. J. Nicholls and R. A. Cowley, J. Phys. C: Sol. Stat. Phys. **20**, 3417 (1987).
3. A. Gibaud, R. A. Cowley, and P. W. Mitchell, J. Phys. C: Sol. Stat. Phys. **20**, 3849 (1987).
4. Ю. Ф. Марков, К. Кнорр, ФТТ **41**, 148 (1999).
5. Yu. F. Markov, K. Knorr, and E. M. Roginskii, Ferroelectrics **265**, 67 (2002).
6. Ю. Ф. Марков, К. Кнорр, Е. М. Рогинский, ФТТ **47**, 314 (2005).