

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

1834/82

19/4-82

P17-82-16

И.М.Рангелов

ПЕРЕНОРМИРОВКА ФОНОННОГО СПЕКТРА
В ОДНОМЕРНОМ ОДНОВАЛЕНТНОМ МЕТАЛЛЕ
В ПРИБЛИЖЕНИИ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

1982

В работах автора^{/1-3/} исследовалось влияние энергетического спектра коллективизированных валентных электронов /КВЭ/ на формирование и устойчивость кристаллической структуры металлов. В работе^{/4/} с помощью френкелевской модели изучалось изменение энергетического спектра фононов и свободной энергии решетки при пайерлсовском структурном переходе. В работе^{/5/} автор исследовал температурную зависимость диэлектрической проницаемости КВЭ вблизи температуры пайерлсовского структурного перехода. Однако остался неясным вопрос о роли зависимости матричного элемента потенциала электронно-фононного взаимодействия от волновых векторов КВЭ и фононов в отдельности, которая имеет место в приближении сильной связи.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы исследовать влияние электронно-электронного и электронно-фононного взаимодействий на энергетический спектр фононов в одномерном одновалентном металле, когда энергетический спектр и поведение КВЭ точнее описываются в приближении сильной связи. Оказывается^{/6/}, что вследствие специфической нелокальной зависимости матричного элемента потенциала электронно-фононного взаимодействия от волновых векторов КВЭ и фононов в отдельности появляются некоторые особенности в формулах, описывающие экранировку электронно-фононного взаимодействия и перенормировку фононного спектра, которые отсутствуют в приближении слабой связи.

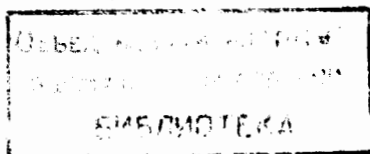
Для дальнейшего исследования воспользуемся следующим гамильтонианом для КВЭ в приближении сильной связи^{/6-9/}:

$$H = \sum \epsilon_n a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma} + \frac{1}{2} \sum (J_{n,n+1} a_{n\sigma}^+ a_{n+1\sigma} + J_{n+1,n} a_{n+1\sigma}^+ a_{n\sigma}) \quad /1/$$

Здесь ϵ_n - энергия КВЭ в одном изолированном ионе, а $J_{n+1,n}$ - матричный элемент перехода КВЭ из n узла в $n+1$ узел. В искаженной решетке изменяется расстояние между ближайшими узлами и поэтому изменяются интегралы перекрытия $J_{n+1,n}$. Так как искажение решетки намного меньше расстояния между ближайшими ионами ($x_n \ll a$), то имеют место разложения

$$J_{n,n+1} = J_{n,n+1}^0 + \frac{\partial J_{n,n+1}}{\partial a} (x_{n+1} - x_n) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 J_{n,n+1}}{\partial a^2} (x_{n+1} - x_n)^2,$$

$$J_{n+1,n} = J_{n+1,n}^0 + \frac{\partial J_{n+1,n}}{\partial a} (x_{n+1} - x_n) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 J_{n+1,n}}{\partial a^2} (x_{n+1} - x_n)^2. /26/$$



Для перехода из узлового описания гамильтонианом /1/ в импульсное можно воспользоваться формулами

$$a_{n\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum a_{n\sigma} e^{ikR_n}, \quad a_{n\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum a_{n\sigma}^+ e^{-ikR_n},$$

$$x_n = \sum x_q e^{iqR_n},$$

где

$$x_q = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} (b_q + b_{-q}^+). \quad /4/$$

Здесь необходимо отметить, что пока мы не учли экранировку, необходимо пользоваться моделью Эйнштейна с плазменной частотой ионов $\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi N z^2 e^2}{M}}$, как это сделано в /4/. Действительно, лишь после учета экранировки можем получить выражение

$$\omega_q^2 = \frac{\omega_0^2 q^2}{\kappa^2 + q^2}, \quad /5/$$

которое при $q^2 \ll \kappa^2$ переходит в формулу Бома и Стейвера /10/:

$$\omega_q \approx \frac{\omega_0}{\kappa} |q| = \sqrt{\frac{4\pi N z^2 e^2 \epsilon_F}{6\pi e^2 N z M}} |q| = \sqrt{\frac{2z\epsilon_F}{3M}} |q|. \quad /6/$$

После подстановки /3/ и /4/ в /1/ при учете разложений /2/ в линейном приближении можно записать

$$H = \sum \epsilon_0 a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \sum J(1 + \cos(ka)) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum g(k, q) a_{k+q\sigma}^+ a_{k\sigma} (b_q + b_{-q}^+), \quad /7/$$

где $J_{n, n\pm 1}^0 = J_{n\pm 1, n}^0 = J$,

$$ag(k, q) = 2i \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0}} \frac{\partial J}{\partial a} [\sin(ka + qa) - \sin(ka)]. \quad /8/$$

Чтобы вычислить изменение энергетического спектра фононов вследствие электронно-электронного кулоновского и электронно-фононного взаимодействий, необходимо к гамильтониану /7/ прибавить энергию фононов и кулоновскую энергию электронно-электронного взаимодействия. Таким образом, получаем полный гамильтониан КВЭ и фононов:

$$H = \sum (\epsilon_0 - J(1 + \cos(ka))) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum \hbar \omega_0 (b_q^+ b_q + \frac{1}{2}) + \sum g(k, q) a_{k+q\sigma}^+ a_{k\sigma} (b_q + b_{-q}^+) + \frac{1}{2} \sum V(q) a_{k+q\sigma}^+ a_{k_1 - q\sigma_1}^+ a_{k_1 \sigma_1} a_{k\sigma}. \quad /9/$$

Уравнения движения для операторов рождения $a_{k\sigma}^+$ и уничтожения $a_{k\sigma}$ КВЭ имеют следующий вид:

$$\hbar \frac{\partial a_{k\sigma}^+}{\partial t} = -\epsilon_k a_{k\sigma}^+ - \sum a_{k+q\sigma}^+ V(q) a_{k_1 - q\sigma_1}^+ a_{k_1 \sigma_1} - \sum g(k, q) a_{k+q\sigma}^+ (b_q + b_{-q}^+), \quad /10a/$$

$$\hbar \frac{\partial a_{k\sigma}}{\partial t} = \epsilon_k a_{k\sigma} + \sum a_{k_1 - q\sigma_1}^+ a_{k_1 \sigma_1} V(q) a_{k-q\sigma} + \sum g(k-q, q) a_{k-q\sigma} (b_q + b_{-q}^+), \quad /10б/$$

$$\hbar \frac{\partial a_{k-p\sigma}}{\partial t} = -\epsilon_{k-p} a_{k-p\sigma}^+ - \sum a_{k-p+q\sigma}^+ V(q) a_{k_1 - q\sigma_1}^+ a_{k_1 \sigma_1} - \sum g(k-p, q) a_{k-p+q\sigma}^+ (b_q + b_{-q}^+). \quad /10в/$$

С помощью уравнений движения /10/ и в приближении случайных фаз можно получить следующее равенство:

$$a_{k-p\sigma}^+ a_{k\sigma} = \frac{V(p) (n_{k-p} - n_k)}{\epsilon_{k-p} - \epsilon_k - \hbar\omega} \rho_p + \frac{g(k-p, p) (n_{k-p} - n_k)}{\epsilon_{k-p} - \epsilon_k - \hbar\omega} (b_p + b_{-p}^+). \quad /11/$$

После суммирования по k и перегруппирования членов из /11/ получаем:

$$\rho_p = \sum_k \frac{g(k-p, p)}{1 - V(p) \chi(p)} \frac{n_{k-p} - n_k}{\epsilon_{k-p} - \epsilon_k - \hbar\omega} (b_p + b_{-p}^+). \quad /12/$$

Из /12/ видно, что вместо /11/ необходимо написать:

$$a_{k-p\sigma}^+ a_{k\sigma} = \frac{g(k-p, p)}{1 - V(p) \chi(p)} \frac{n_{k-p} - n_k}{\epsilon_{k-p} - \epsilon_k - \hbar\omega} (b_p + b_{-p}^+). \quad /13/$$

Действительно, если просуммируем /13/, то сразу получим /12/. Из /13/ видно, что кулоновское взаимодействие между КВЭ приводит к экранировке константы электронно-фононного взаимодействия $g(k-p, p)$, причем

$$\kappa(p) = 1 - V(p) \chi(p), \quad /14/$$

если

$$\chi(p) = \sum \frac{n_{k-p} - n_k}{\epsilon_{k-p} - \epsilon_k - \hbar\omega}. \quad /15/$$

Подставив /12/ в /10/, можно получить

$$\hbar \frac{\partial a_{k\sigma}^+}{\partial t} = -\epsilon_k a_{k\sigma}^+ - \sum \left(\frac{V(q) Q(q)}{1 - V(q) \chi(q)} + g(k-q, q) \right) a_{k+q\sigma}^+ (b_q + b_{-q}^+), \quad /16a/$$

$$\hbar \frac{\partial a_{k\sigma}}{\partial t} = \epsilon_k a_{k\sigma} + \sum \left(\frac{V(q) Q(q)}{1 - V(q) \chi(q)} + g(k-q, q) \right) a_{k-q\sigma} (b_q + b_{-q}^+), \quad /16б/$$

где /в/

$$Q(q) = \sum \frac{g(k-q, q) (n_{k-q} - n_k)}{\epsilon_{k-q} - \epsilon_k - \hbar\omega}. \quad /17/$$

Формула /17/ является обобщением формулы /15/ для случая, когда матричный элемент электронно-фононного взаимодействия $g(k, q)$ зависит от волнового вектора k КВЭ. Эта зависимость $g(k, q)$ от k мешает вынести множитель $g(k-q, q)$ из-под знака суммирования, как это сделано в /15/. Поэтому в /16/ мы не можем объединить оба члена в скобке. Однако для случая $qa = \pi$, т.е. при искажении с удвоением периода решетки, электронно-электронное кулоновское взаимодействие не дает вклада в электронно-фононное взаимодействие. Действительно, если подставим /8/ в /13/, то получаем для $a_{k-q\sigma}^+ a_{k\sigma}$ следующее выражение:

$$a_{k-q\sigma}^+ a_{k\sigma} = i \frac{\partial J}{\partial a} \sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega_0}} \frac{(\sin(ka) - \sin(ka+qa))}{1 - V(q)\chi(q)} \frac{n_{k-q} - n_k}{\epsilon_{k-q} - \epsilon_k - \hbar\omega} (b_q + b_{-q}^+) /18/$$

Так как $qa = \pi$, то $\sin(ka) - \sin(ka + \pi) = 2 \sin(ka)$. При выборе начала отсчета энергии КВЭ так, чтобы $\epsilon_k = -J \cos(ka)$, в одновалентном металле имеем $\mu = 0$. Поэтому вместо /18/ можно записать:

$$a_{k-q\sigma}^+ a_{k\sigma} = 2i \frac{\partial J}{\partial a} \frac{\sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega_0}} \sin(ka)}{1 - V(q)\chi(q)} \frac{\text{th}(\frac{J \cos(ka)}{2k_0 T})}{\hbar\omega - 2J \cos(ka)} (b_q + b_{-q}^+) /19/$$

После суммирования по k из /19/ получаем:

$$\rho_{\pi/a} = 2i \frac{\partial J}{\partial a} \frac{\sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega_0}}}{1 - V(q)\chi(q)} \sum \frac{\text{th}(\frac{J \cos(ka)}{2k_0 T})}{\hbar\omega - 2J \cos(ka)} \sin(ka) (b_q + b_{-q}^+) /20/$$

Так как в /20/ суммирование происходит в области $-\pi/2 \leq ka \leq \pi/2$, то знак аргумента ka меняется. Но при замене ka на $-ka$ только $\sin(ka)$ меняет знак на $-\sin(-ka)$, так как $\cos(ka) = \cos(-ka)$. Поэтому из /20/ следует, что амплитуда волны зарядовой плотности $\rho_{\pi/a} = 0$, хотя амплитуда искажения $b_{\pi/a} + b_{\pi/a}^+ \neq 0$. А это означает, что в приближении сильной связи 1/ искажение с удвоением периода решетки не вызывает волны зарядовой плотности; 2/ кулоновское электронно-электронное взаимодействие не экранирует электронно-фононного взаимодействия при искажении с удвоением периода решетки, так как экранировка КВЭ с $ka > 0$ компенсирует экранировку КВЭ с $ka < 0$.

При выборе $\epsilon_k = -J \cos(ka)$ в одновалентном металле вместо /15/ имеем

$$\chi(\frac{\pi}{a}, \omega) = \sum \frac{\text{th}(\frac{J \cos(ka)}{2k_0 T})}{\hbar\omega - 2J \cos(ka)} /21/$$

Так как поведение $\chi(\pi/a, \omega)$ из /21/ уже исследовалось в /5/ автором, то здесь мы не будем больше на этом останавливаться.

Для вычисления энергетического спектра фононов мы воспользуемся уравнениями движения для операторов $(b_q + b_{-q}^+)$ и $(b_q - b_{-q}^+)$.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (b_q + b_{-q}^+) = \hbar\omega_0 (b_q - b_{-q}^+) /22a/$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (b_q - b_{-q}^+) = \hbar\omega_0 (b_q + b_{-q}^+) + 2 \sum g(k, -q) a_{k-q\sigma}^+ a_{k\sigma} /22b/$$

Из /22/ можно получить:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} (b_q + b_{-q}^+) = (\hbar\omega_0)^2 (b_q + b_{-q}^+) + 2\hbar\omega_0 \sum g(k, -q) a_{k-q\sigma}^+ a_{k\sigma} /23/$$

Если предположить, что

$$b_q(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} b_q(\omega) e^{i\omega t} d\omega /24/$$

то из /23/ и /24/ следует:

$$b_q(\omega) + b_{-q}^+(\omega) = \frac{2\hbar\omega_0}{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\omega_0)^2} \sum g(k, -q) a_{k-q\sigma}^+ a_{k\sigma} /25/$$

С помощью /25/ и /13/ получается следующее уравнение:

$$(b_q(\omega) + b_{-q}^+(\omega)) \left(1 - \frac{2\hbar\omega_0}{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\omega_0)^2} \sum \frac{g(k, -q)g(k-q, q)}{1 - V(q)\chi(q)} \frac{(n_{k-q} - n_k)}{(\epsilon_{k-q} - \epsilon_k - \hbar\omega)} \right) = 0 /26/$$

Так как $b_q(\omega) + b_{-q}^+(\omega) \neq 0$, то из /26/ следует, что фононный спектр $\omega(q)$ можно вычислить с помощью равенства

$$(\hbar\omega)^2 = (\hbar\omega_0)^2 - 2\hbar\omega_0 \sum \frac{g(k, -q)g(k-q, q)}{1 - V(q)\chi(q)} \frac{(n_{k-q} - n_k)}{\epsilon_{k-q} - \epsilon_k - \hbar\omega} /27/$$

В том, что равенство /27/ правильно, можно убедиться, если пренебречь зависимостью $g(k, q)$ от k . Тогда в приближении слабой связи имеем /11, 12/:

$$g(q) = i \frac{4\pi z e^2}{q} \sqrt{\frac{N\hbar N}{2M\omega_0}} /28/$$

Здесь $\omega_0 = \sqrt{\frac{4\pi N z^2 e^2}{M}}$ плазменная частота ионов. С помощью /28/ имеем

$$2\hbar\omega_0 g(q)g(-q) = \frac{16\pi^2 N^2 z^2 e^4 \hbar^2}{M q^2} /29a/$$

Правую сторону в /29a/ можно переписать в следующем виде:

$$\frac{4\pi N e^2}{q^2} \cdot \frac{4\pi N z^2 e^2}{M} \hbar^2 = V(q) \omega_0^2 \hbar^2 /29b/$$

После подстановки /296/ в /27/ и суммирования по k получаем:

$$\omega^2 = \omega_0^2 + \omega_0^2 \frac{V(q)\chi(q)}{1 - V(q)\chi(q)} = \frac{\omega_0^2}{1 - V(q)\chi(q)}. \quad /30/$$

Выражение /30/ совпадает с выражением /5/ для трехмерного металла в приближении слабой связи при $q \ll 2k_F$.

С помощью /8/ из /27/ можно получить:

$$2\hbar\omega_0 g(k, -q) g(k-q, q) = \frac{4\hbar^2}{M} \left(\frac{\partial J}{\partial a}\right)^2 [\sin(ka) - \sin(ka - qa)]^2. \quad /31/$$

После такого преобразования и учета того, что в /27/ происходит суммирование как по $ka > 0$, так и по $ka < 0$, из /27/ и /31/ имеем:

$$\omega^2 = \omega_0^2 + \frac{4}{M} \left(\frac{\partial J}{\partial a}\right)^2 (1 - \cos(qa))^2 \frac{\chi(q)}{1 - V(q)\chi(q)} + \frac{8}{M} \frac{\cos(qa)(1 - \cos(qa)) \sum \cos^2(ka) (n_{k-q} - n_k)}{1 - V(q)\chi(q) (\epsilon_{k-q} - \epsilon_k - \hbar\omega)}. \quad /32/$$

Если опять выберем $\epsilon_k = -J\cos(ka)$, то для одновалентного металла, когда $\mu = 0$ и $qa = \pi$, сумма последнего члена принимает вид

$$\sum \frac{\cos^2(ka) \text{th}\left(\frac{J\cos(ka)}{2k_0 T}\right)}{(\hbar\omega - 2J\cos(ka))} - \sum \frac{\sin^2(ka) \text{th}\left(\frac{J\sin(ka)}{2k_0 T}\right)}{(\hbar\omega - 2J\sin(ka))}. \quad /33/$$

Так как особенность в знаменателе суммы /33/ имеет место при $2J\sin(ka) \approx \hbar\omega$, то множитель $\sin^2(ka)$ в числителе суммы сильно уменьшает ее полное значение. Действительно, при $T = 0$ К замена суммы интегралом дает нам следующее значение:

$$\frac{N}{J\pi} \int_0^1 \frac{x^2 dx}{(x-a)\sqrt{1-x^2}} = \frac{N}{J\pi} \left[1 + \frac{\pi a}{2} + \frac{a^2}{\sqrt{1-a^2}} \ln\left(\frac{1+\sqrt{1-a^2}}{a}\right) \right], /34a/$$

где $a = \hbar\omega/2J$. А в приближении $\sin x \approx x$ вместо /34a/ имеем

$$\frac{N}{2J} \int_0^{\pi/2} \frac{x^2 dx}{x-a} = \frac{N}{2J} \left[\frac{\pi^2}{8} + \frac{\pi a}{2} + a^2 \ln\left(\frac{\pi - 2a}{2a}\right) \right]. \quad /34б/$$

Замена суммирования интегрированием в /21/ при $T = 0$ К дает нам

$$\frac{N}{\pi J} \int_0^1 \frac{dx}{(x-a)\sqrt{1-x^2}} = \frac{N}{\pi J \sqrt{1-a^2}} \ln\left(\frac{1+\sqrt{1-a^2}}{a}\right). \quad /35a/$$

А в приближении $\sin x \approx x$ вместо /35a/ имеем

$$\frac{N}{2J} \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{x-a} = \frac{N}{2J} \ln\left(\frac{\pi - 2a}{2a}\right). \quad /35б/$$

Сравнение /34/ с /35/ показывает, что влияние члена /34/ с нелокальной зависимостью матричного элемента потенциала электронно-фононного взаимодействия $g(k, q)$ от волнового вектора k в формуле /8/ слабо и ни в коем случае не может сравниться с влиянием основного члена /35/. Действительно, наличие расходящегося множителя $\chi(q)$ в знаменателе третьего члена правой части равенства /32/ сводит на нет влияние конечного значения суммы /33/, так как во втором члене равенства /32/ присутствует расходящийся множитель $\chi(q)$ как в знаменателе, так и в числителе. Поэтому в случае, когда из-за расходимости $\chi(q, \omega)$ произведение $V(q)\chi(q, \omega)$ намного больше 1, фононный спектр $\omega(q)$ определяется следующим равенством:

$$\omega^2 = \omega_0^2 - 16 \left(\frac{\partial J}{\partial a}\right)^2 \frac{\sin^4(qa/2)}{MV(q)}. \quad /36/$$

Таким образом, получаем, что частота фононов в точке $q = 2k_F$ может аннулироваться только при выполнении неравенства

$$\omega_0^2 = \frac{4\pi N z^2 e^2}{M} \leq \frac{16\Omega_0 4k_F^2}{4\pi e^2 M} \left(\frac{\partial J}{\partial a}\right)^2 \sin^4\left(\frac{qa}{2}\right). \quad /37/$$

Так как $\sin^4(qa/2) \leq 1$, то из /37/ можно получить условие для первой производной матрицы перехода $\partial J/\partial a$, при которой возможно аннулирование фононной частоты вследствие электронно-фононного взаимодействия:

$$a \left| \frac{\partial J}{\partial a} \right| \geq k_F a \frac{4\pi \tau e^2}{\Omega_0 16k_F^2}. \quad /38/$$

С помощью соотношения $3\pi^2 z = \Omega_0 k_F^3$ правую сторону /38/ можно привести в более наглядный вид:

$$a \left| \frac{\partial J}{\partial a} \right| \geq \frac{4a}{3\pi} \left(\frac{e^2 m}{\hbar^2}\right) \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}. \quad /39/$$

Если учесть, что $\frac{\hbar^2}{me^2} = a_0$ есть радиус Бора и поэтому $a \gg 2a_0$, то из /39/ следует, что произведение $a \left| \frac{\partial J}{\partial a} \right|$ должно быть намного больше энергии Ферми ϵ_F . Если примем обозначение $\left| \frac{\partial J}{\partial a} \right| = \tilde{q}_0 J$, то вместо /39/ будем иметь

$$\tilde{q}_0 a_0 J \geq \frac{4\epsilon_F}{3\pi}. \quad /40/$$

В работе /6/ приведены следующие значения констант: $J = 1,6$ эВ, а $\tilde{q}_0 a_0 = 1,32$. Поэтому верхняя граница для ϵ_F из /40/ имеет вполне разумное значение 4,6 эВ.

Мы до сих пор интересовались только возможностью аннулирования фононной частоты $\omega(q)$, но пренебрегали температурной зависимостью $\chi(q, \omega)$. Для выяснения влияния температуры нам не-

обходимо вычислить интеграл

$$\int_0^{\pi/2} \frac{\text{th} \left(\frac{J \sin x}{2k_0 T} \right)}{a - \sin x} dx. \quad /41/$$

Точное вычисление этого интеграла невозможно из-за наличия в нем $\text{th} \left(\frac{J \sin x}{2k_0 T} \right)$. Но мы можем сделать удобную и хорошую интерполяцию:

$$\text{th} \left(\frac{\sin x}{2\delta} \right) \approx \text{tg} \left(\frac{x}{2} \right) / \sqrt{\delta^2 + \text{tg}^2 \left(\frac{x}{2} \right)}, \quad /42/$$

где $\delta = k_0 T / J$. Тогда вместо /41/ нам необходимо вычислить интеграл

$$\int_0^{\pi/2} \frac{\text{tg}(x/2) dx}{\sqrt{\delta^2 + \text{tg}^2(x/2)} \cos^2(x/2) [a(1 + \text{tg}^2(x/2)) - 2\text{tg}(x/2)]}. \quad /43/$$

После замены переменной $\text{tg}(x/2) = t$ из /43/ получаем более простое выражение:

$$\int_0^t \frac{2t dt}{\sqrt{t^2 + \delta^2} [a(1 + t^2) - 2t]} = \quad /44/$$

$$= -\frac{a}{\sqrt{1-a^2}} \int_0^t \frac{t dt}{\sqrt{\delta^2 + t^2}} \left[\frac{1}{at + \sqrt{1-a^2} - 1} + \frac{1}{\sqrt{1-a^2} + 1 - at} \right].$$

Оба интеграла в /44/ можно решить точно с помощью замены переменной $t = \delta \text{tg} \phi$. Таким образом, из /44/ получаем:

$$\frac{2}{\sqrt{1-a^2}} \left[\nu \int_0^{z_1} \frac{dz}{2z - \nu(1-z^2)} - \xi \int_0^{z_1} \frac{dz}{2z - \xi(1-z^2)} \right], \quad /45/$$

где

$$\nu = \frac{\gamma}{a\delta}; \quad \xi = \frac{a}{\gamma\delta}; \quad \gamma = 1 + \sqrt{1-a^2} \quad \text{и} \quad z_1 = \sqrt{1+\delta^2} - \delta.$$

После несложных преобразований из /45/ можно получить:

$$\frac{1}{\sqrt{1-a^2}} \left\{ \frac{\nu}{\sqrt{1+\nu^2}} \left[\ln \left(\frac{1+\sqrt{1+\nu^2}}{\sqrt{1+\nu^2}-1} \right) - \ln \left(\frac{\sqrt{1+\nu^2}-1 + \nu z_1}{\sqrt{1+\nu^2}+1 - \nu z_1} \right) \right] - \frac{\xi}{\sqrt{1+\xi^2}} \left[\ln \left(\frac{1+\sqrt{1+\xi^2}}{\sqrt{1+\xi^2}-1} \right) - \ln \left(\frac{\sqrt{1+\xi^2}-1 + \xi z_1}{\sqrt{1+\xi^2}+1 - \xi z_1} \right) \right] \right\}. \quad /46/$$

С помощью обратной подстановки для ν и ξ вместо /46/ имеем

$$\frac{1}{\sqrt{1-a^2}} \left\{ \frac{\gamma}{\sqrt{\gamma^2 + a^2 \delta^2}} \left[2 \ln \left(\frac{a\delta + \sqrt{\gamma^2 + a^2 \delta^2}}{\gamma} \right) - \right. \right.$$

$$\left. - \ln \left(\frac{\sqrt{\gamma^2 + a^2 \delta^2} - a\delta + \gamma \sqrt{1 + \delta^2} - \gamma \delta}{\sqrt{\gamma^2 + a^2 \delta^2} + a\delta - \gamma \sqrt{1 + \delta^2} + \gamma \delta} \right) \right] -$$

$$- \frac{a}{\sqrt{a^2 + \gamma^2 \delta^2}} \left[2 \ln \left(\frac{\gamma \delta + \sqrt{a^2 + \gamma^2 \delta^2}}{a} \right) - \right.$$

$$\left. - \ln \left(\frac{\sqrt{a^2 + \gamma^2 \delta^2} - \gamma \delta + a \sqrt{1 + \delta^2} - a\delta}{\sqrt{a^2 + \gamma^2 \delta^2} + \gamma \delta - a \sqrt{1 + \delta^2} + a\delta} \right) \right] \}. \quad /47/$$

При $\delta \rightarrow 0$, когда $\gamma \gg a\delta$ и поэтому $\sqrt{\gamma^2 + a^2 \delta^2} \approx \gamma$, имеет место равенство

$$\frac{\sqrt{\gamma^2 + a^2 \delta^2} - a\delta + \gamma \sqrt{1 + \delta^2} - \gamma \delta}{\sqrt{\gamma^2 + a^2 \delta^2} + a\delta - \gamma \sqrt{1 + \delta^2} + \gamma \delta} \approx \frac{2\gamma}{\delta(\gamma + a)}. \quad /48a/$$

А при $a \gg \gamma \delta$, когда $\sqrt{a^2 + \gamma^2 \delta^2} \approx a$, имеет место равенство

$$\frac{\sqrt{a^2 + \gamma^2 \delta^2} - \gamma \delta + a \sqrt{1 + \delta^2} - a\delta}{\sqrt{a^2 + \gamma^2 \delta^2} + \gamma \delta - a \sqrt{1 + \delta^2} + a\delta} \approx \frac{2a}{\delta(\gamma + a)}. \quad /48b/$$

Таким образом, при $\delta \rightarrow 0$ первый и третий члены в /47/ аннулируются, а второй и четвертый дают конечное выражение

$$\frac{1}{\sqrt{1-a^2}} \ln \left(\frac{a}{\gamma} \right). \quad /49/$$

Если учесть, что $\gamma = 1 + \sqrt{1-a^2}$, то сравнение /49/ с /35a/ показывает, что при $\delta \rightarrow 0$ выражение /47/ переходит в выражение /35a/ без каких-либо особенностей. Поэтому возможность аннулирования /смягчения/ фононного спектра $\omega(q)$, которая является следствием сильного электронно-фононного взаимодействия, не меняется существенно при изменении температуры. А это означает, что фононный спектр меняется слабо при изменении температуры и не имеет никаких особенностей при $T \rightarrow 0$ K.

Итак, специальный вид матричного элемента электронно-фононного взаимодействия в приближении сильной связи не дает нам возможности использовать некоторые упрощения, которые имеют место в приближении слабой связи. Сделанное исследование показывает, что отсутствие какой-либо связи между матричными элементами кулоновского электронно-электронного и электронно-фононного взаимодействия дает возможность появления локального минимума в энергетическом спектре фононов. Однако степень смягчения фононного спектра слабо зависит от температуры, и поэтому это смягчение нельзя путать с проявлением мягкой моды при пайерлсов-

ском структурном переходе. Специальный вид матричного элемента нелокального электронно-фононного взаимодействия приводит к изменению связи между амплитудой искажения решетки и амплитудой волны зарядовой плотности $\rho_{\pi/a} / 13/$, а также к изменению зависимости энергетического спектра фононов $\omega(q)$ от константы электронно-фононного взаимодействия /27/. Формула /16/ показывает, что аналитическое представление /8/ матричного элемента электронно-фононного взаимодействия $g(k, q)$ обеспечивает полную компенсацию экранировки КВЭ с $ka > 0$ и $ka < 0$ при $ga = \pi$. Эти особенности заставляют нас пересмотреть некоторые общепринятые соотношения, которые получены в приближении слабой связи для КВЭ при их применении в случае, когда энергетический спектр и поведение КВЭ лучше описываются в приближении сильной связи. Это очень важно, так как поведение КВЭ во всех интерметаллических соединениях с высокими критическими температурой и магнитным полем описывается в приближении сильной связи с ярко выраженными одномерными свойствами одновалентного металла.

ЛИТЕРАТУРА

1. Архипов Р.Г., Рангелов Й.М. ФТТ, 1970, т.12, №12, с.3414-3424.
2. Рангелов Й.М. ФТТ, 1972, т.14, №1, с.364-372.
3. Рангелов Й.М. ФНТ, 1977, т.3, №6, с.745-753.
4. Рангелов Й.М. ОИЯИ, Р17-10558, Дубна, 1977.
5. Рангелов Й.М. ОИЯИ, Р17-81-446, Дубна, 1981.
6. Bjelis A., Saub K., Barisic S. Nuovo Cim., 1974, vol.23B, No.1, p.102-123.
7. Toombs S.A. Phys.Rep., 1978, vol.40, No.3, p.181-260.
8. Friedman L. Phys.Rev.A, 1965, vol.140, No.6, p.1649-1667.
9. Mitra T.K. Journ.Phys.C., 1969, vol.2, No.1, p.52-65.
10. Bohm D., Staver T. Phys.Rev., 1950, vol.84, p.836-837.
11. Киттель Ч. Квантовая теория твердого тела. "Наука", М., 1967.
12. Маттук Р. Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел. "Наука", М., 1969, с.274.
13. Labbe J., Friedel S. Journ.de Phys., 1966, vol.27, p.153, 303.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 января 1982 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д1,2-9224	IV Международный семинар по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1975.	3 р. 60 к.
Д-9920	Труды Международной конференции по избранным вопросам структуры ядра. Дубна, 1976.	3 р. 50 к.
Д9-10500	Труды II Симпозиума по коллективным методам ускорения. Дубна, 1976.	2 р. 50 к.
Д2-10533	Труды X Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Баку, 1976.	3 р. 50 к.
Д13-11182	Труды IX Международного симпозиума по ядерной электронике. Варна, 1977.	5 р. 00 к.
Д17-11490	Труды Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1977.	6 р. 00 к.
Д6-11574	Сборник аннотаций XV совещания по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1978.	2 р. 50 к.
Д3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
Д1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
Д13-12157	Труды III Совещания по использованию ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1978.	2 р. 20 к.
Д1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
Р2-12462	Труды V Международного совещания по нелокальным теориям поля. Алушта, 1979.	2 р. 25 к.
Д-12831	Труды Международного симпозиума по фундаментальным проблемам теоретической и математической физики. Дубна, 1979.	4 р. 00 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д2-81-158	Труды XIV Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий, Дубна, 1980	3 р. 50 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

**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

Рангелов Я.М. P17-82-16
Перенормировка фононного спектра в одномерном одновалентном металле в приближении сильной связи

Исследовано влияние приближения, в котором описываются энергетический спектр и поведение КВЭ, на матричный элемент электронно-фононного взаимодействия. Показано, что в приближении сильной связи, когда потенциал электронно-фононного взаимодействия имеет нелокальный вид, возможно появление новых связей, которые не имеют места в приближении слабой связи. Исследовано поведение волны зарядовой плотности, экранировка электронно-фононного взаимодействия кулоновским электронно-электронным взаимодействием и перенормировка фононного спектра за счет электронно-фононного взаимодействия.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Rangelov J.M. P17-82-16
Renormalization of the Phonon Spectrum in One-Dimensional One-Valence Metals within the Tight Binding Approximation

The influence on the matrix element of the electron-phonon interaction of the approximations used to describe the energy spectrum and the behaviour of CVE is investigated. It is shown that within the tight-binding approximation, when the electron-phonon interaction potential has a nonlocal character, the appearance of new relations which do not occur in the nearly free electron approximation becomes possible. The behaviour of charge density waves, the screening of electron-phonon interaction because of electron-electron Coulomb interaction and the renormalization of the phonon spectrum as a result of the electron-phonon interaction are investigated.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.