СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р17 - 10558

Й.М.Рангелов

ИЗМЕНЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ФОНОНОВ ПРИ ПАЙЕРЛСОВСКОМ СТРУКТУРНОМ ПЕРЕХОДЕ

1977

P17 - 10558

И.М.Рангелов

ИЗМЕНЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ФОНОНОВ ПРИ ПАЙЕРЛСОВСКОМ СТРУКТУРНОМ ПЕРЕХОДЕ

Рангелов Й.М. P17 - 10558

Изменение энергетического спектра фононов при пайерлсовском структурном переходе

Вычисление изменения свободной энергии фононов при удвоении периода кристаллической решетки показало, что при определении равновесной деформации пайерлсовского полупроводника изменение спектра колебаний ионов можно не учитывать. Коновская аномалия может проявляться только в неискаженной решетке вблизи T_p / температуры структурного перехода/. На френкелевской модели металла показана зависимость собственно-энергетической части фононов от частоты и параметра искажения в перенормированном фононном спектре искаженной решетки после учета электрон-фононного и фонон-фононного взаимодействий.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Rangelov I.M. P17 - 10558

Instability in Phonon Energy Spectrum at the Peierls Structure Transition

The investigation of instability of the phonon free energy at doubling the crystallic lattice constant has revealed that instability in the ion spectrum fluctuation could be neglected when the Peierls simiconductor equilibrium deformation is determined. The Kohn anomaly may occur only in an undistorted lattice near T_p (the Peierls transition temperature).The dependence of self-energy of part of phonons on the frequency and distortion parameter in renormalized phonon spectrum of a distorted lattice with taking into account electron-phonon and phonon-electron interactions was shown using the Frenkel model of metal.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

Вычислены энергетический спектр фононов в одномерной модели пайерлсовского полупроводника, величины изменения полной энергии фононов и увеличения упругой энергии кристаллической решетки при удвоении ее периода. Показано, что можно пренебречь изменениями спектра и полной энергии фононов при определении равновесного значения параметра деформации решётки. На френкелёвской модели металла показана зависимость собственно-энергетической части фононов от частоты и параметра искажения в перенормированном фононном спектре искажённой решётки после учёта электрон-фононного и фонон-фононного взаимодействий.

Эти результаты были получены несколько лет тому назад для учёта влияния изменения фононного спектра на устойчивость металлического состояния одномерной модели. Тогда автор не опубликовал их, так как аналогичные вычисления делались в работе /1/, где вычислялось изменение термодинамических характеристик одномерной цепочки с двумя атомами в элементарной ячейке в зависимости от разности их масс. Однако вот уже несколько лет неправильно экстраполируются результаты Афанасьева и Кагана /2/. Везде говорится о мягкой моде ω_{q_0} (которая не существует ниже точки структурного перехода T_p), о ее влиянии на температуру перехода металла из нормального в сверхпроводящее состояние /3,4,5/.

Последняя, самая грубая ошибка в этой интерпретации сделана в работе Булаевского [6].

Афанасьев и Каган показали, что в первом приближении появляется особенность в энергетическом спектре фононов металла (рис. I) с плоскими участками на ферми-поверхности (ФП) его коллективизированных валентных электронов (КВЭ). Из рисунка видно, что частота колебания с волновым вектором $q_0 = 2K_F$, соединяющим два противоположных плоских участников ФП КВЭ, стремится к нулю, т.е. выбранное формой ФП КВЭ колебание замораживается. Это доказывает неустойчивость кристаллической структуры относительно таких колебаний, вызывающих искажение решётки. Пайерлсом [7] было показано, что изменение энергетического спектра КВЭ понижением симметрии кристаллического потенциала может обеспечить выгодность структурного перехода. Однако спектр колебаний ионов искажённой удвоением периода решётки отличается от спектра, представленного на рис. I, тем, что только акустическая ветвь спектра уменьшает свою частоту, а оптическая ветвь должна увеличить свою частоту. Эта ошибка только показывает, что нельзя получить энергетический спектр фононов искажённой удвоением периода решётки, выходя из энергетического спектра фононов неискажённой решётки, решая приближённо задачу без учёта изменения симметрии упругих констант кристаллической решётки при искажении. Пайерлсом показано [8], что неэквивалентность атомов кристалла, вызванную периодическим искажением решётки, можно рассматривать, как изменение одной из его характеристик. Для определения спектра колебаний решётки существенными являются массы ионов и силовые константы. Деформация решётки меняет только силовые константы.

Рассмотрим одномерную цепочку из одинаковых атомов. КВЭ

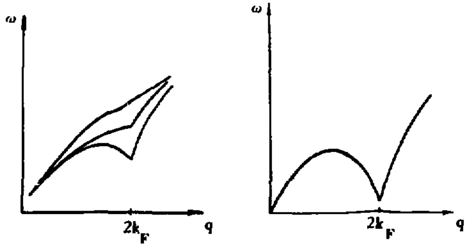

Рис. I. Аномалия в энергетическом спектре фононов в металле с плоскими участками на ФП КВЭ (Афанасьев и Каган) /2/.

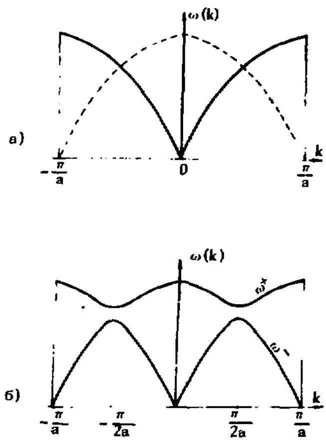

Рис. 2. Изменение энергетического спектра фононов при удвоении периода кристаллической решётки.

находятся в одномерной цепочке потенциалов ионных остовов. В стационарном состоянии максимум плотности КВЭ расположен в промежутках между положительными ионами, и поэтому Френкель предложил рассматривать металл в некотором приближении как ионный кристалл из $2N$ разноимённых ионов /9,10/. Для описания колебаний решётки выбираем модель одномерного металла. Полная энергия такой системы складывается из потенциальной энергии кулоновского притяжения между положительными ионами и КВЭ W_1 и из кинетической энергии КВЭ T_e, давление которых соответствует силам отталкивания, обусловленным принципом Паули. Обменную энергию $W_{o6} = -\frac{3}{5}\frac{e^2}{R}\left(\frac{3}{2\pi}\right)^{\frac{2}{3}} Z^{\frac{4}{3}}$ и корреляционную энергию КВЭ ради простоты не будем учитывать, так как в металлах численно они компенсируются собственной энергией однородного распределения КВЭ $W_2 = \frac{3}{5}\frac{e^2 Z^2}{R}$ /11/. В этом приближении зависимость полной энергии E от расстояния между ионами R, от валентности Z и числа ионов N описывается выражением /12/

$$E(R) = \frac{NB}{R^2} - \frac{NA}{R}. \qquad (1)$$

Здесь $A = \alpha e^2 Z^2$, где α – константа Маделунга /13/, а $B = \frac{\hbar^2 \pi^2 Z^3}{6 m a^2}$ в одномерной модели и $B = \frac{3}{5}\frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m a^2}\left(\frac{3}{\xi\pi}\right)^{\frac{2}{3}} Z^{5/3}$ в трехмерном случае (ξ – постоянная порядка 1, зависящая от структуры кристаллической решётки $\Omega_0 = \xi a^3$). Равновесное значение расстояния между ионами a находится минимизацией полной энергии (1). Так получаем зависимость полной энергии от изменения расстояния между ионами от равновесного значения $\delta R = R - a$ при однородной деформации

$$E(\delta R) = N\Phi\left\{-1 + \frac{(\delta R)^2}{(a+\delta R)^2}\right\}, \qquad (2)$$

где $\Phi = Z\varepsilon_F/3$ в одномерной модели и $\Phi = 0{,}6\, Z\varepsilon_F$ в трехмерной ,а $\mathcal{E}_F$ -энергия Ферми КВЭ. В случае колебаний решетки полная энергия системы описывается выражением, полученным из (2) заменой $\frac{N(\delta R)^2}{(a+\delta R)^2}$ на соответствующий член, учитывающий изменение энергии системы за счет изменения расстояний между ближайшими ионами $(U_{n+1}-U_n)$, а именно:

$$E(a) = \Phi \sum \frac{(U_{n+1}-U_n)^2}{(a+U_{n+1}-U_n)^2} - N\Phi + \sum \frac{\dot{U}_n^2}{2M} \cdot \quad (3)$$

Движение n - го иона цепочки описывается координатой U_n, которая в гармоническом приближении является решением системы уравнений

$$M\ddot{U}_n = \beta(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \ , \quad (4)$$

где M -масса иона и $\beta = 2\Phi/a^2$ - силовая константа. Определённая системой уравнений (4) частота колебаний такой модели

$$\omega_q = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}}\ \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \quad (5)$$

является частотой акустического колебания со скоростью звука $S_0 = \sqrt{\frac{\beta a^2}{M}}$, которая в одномерной модели металла совпадает со скоростью звука $\tilde{S} = \sqrt{\frac{2\mathcal{E}_F Z}{3M}}$, найденной Бомом и Стейвером /I4/.

При удвоении периода решётки полная энергия в гармоническом приближении записывается в виде $E = -N\Phi + \sum \frac{\dot{U}_n^2}{2M}$

$$+ \Phi \left\{ \frac{N\Delta^2(1+\Delta^2)}{(1-\Delta^2)^2} + \sum \frac{(U_{2n}-U_{2n+1})^2}{a^2(1+\Delta)^2} + \sum \frac{(U_{2n-1}-U_{2n})^2}{a^2(1-\Delta)^2} \right\} . \quad (6)$$

Второй член в (6) описывает увеличение упругой энергии решётки при удвоении периода. Система уравнений движения для координат U_n в искажённой решётке имеет вид

$$M\ddot{u}_{2n} = \beta_2(u_{2n+1} - u_{2n}) + \beta_1(u_{2n-1} - u_{2n}),$$

$$M\ddot{u}_{2n+1} = \beta_1(u_{2n+2} - u_{2n+1}) + \beta_2(u_{2n} - u_{2n+1}), \tag{7}$$

где $\beta_1 = \frac{\beta}{(1-\Delta)^2}$ и $\beta_2 = \frac{\beta}{(1+\Delta)^2}$. Эти результаты можно получить, сразу предположив, что при деформации удвоением периода решётки плотность КВЭ не меняется / $\varepsilon_F = const$ /, и заменив силовую константу β силовыми константами β_1 и β_2, в которых вместо параметра решётки a стоят новые расстояния между ионами $a(1-\Delta)$ и $a(1+\Delta)$.

Частота колебаний ионов искажённой решетки описывается формулой (рис. 2)

$$\omega_q^{\pm} = \sqrt{\frac{(\beta_1+\beta_2)}{M}\left\{1 \pm \sqrt{\cos^2(qa) + V^2\sin^2(qa)}\right\}}, \tag{8}$$

где $V = (\beta_1 - \beta_2)/(\beta_1 + \beta_2) = 2\Delta/(1+\Delta^2)$.

Энергетический спектр фононов (8) имеет акустическую ω_q^- и оптическую ω_q^+ ветви, разделённые энергетической щелью величиной $\frac{2\Delta}{1-\Delta^2}\,\frac{S_0}{a}$. Хотя объём цепочки не изменился при структурном переходе, максимальная частота колебаний ионов искажённой решётки $\omega_M = \frac{\sqrt{1+\Delta^2}}{1-\Delta^2}\,\frac{2S_0}{a}$ больше максимальной частоты колебаний ионов неискажённой решётки $\omega_M^0 = \frac{2S_0}{a}$, а скорость звука S меньше S_0 / $S = S_0/\sqrt{1+\Delta^2}$ /.

Если рассмотреть колебания ионов одномерной модели металла как распространение продольных волн в однородной струне /15/, то связь упругой постоянной $\tilde{C}$ с силовой константой $\tilde{\beta}$ / $\tilde{C} = \tilde{\beta}a$ / определяет другую зависимость частоты колебаний от параметра деформации Δ :

$$\tilde\beta_1+\tilde\beta_2 = 2\tilde\beta/(1-\Delta^2)\,;\ \tilde\nu = \Delta \quad \text{и} \quad \tilde\omega_M = \frac{2}{\sqrt{1-\Delta^2}}\sqrt{\frac{\tilde\beta}{M}}\,. \tag{9}$$

Так как в модели однородной струны скорость звука при структурном переходе не меняется, то экспериментальным образом можно определить модель,правильно описывающую колебания ионов металла.

Здесь необходимо напомнить, что величина параметра искажения решётки Δ зависит от температуры /I6/ (рис. 3). Выше T_p в неискажённой фазе решётка симметрична и фононный спектр колебаний решётки описывается формулой (5). С приближением к T_p сверху электрон-фононное и фонон-фононное взаимодействия постепенно усиливаются и начинают проявляться аномалии Кона /I7/. В этом температурном интервале ангармонизм очень большой и говорить о фононах необходимо очень осторожно. При температуре T_p решётка искажается и получается энергетический спектр фононов (8). Ниже T_p искажённая решётка устойчива, ангармонизм мал, и поэтому спокойно можно описывать колебания решётки на языке фононов, хотя параметры их энергетического спектра будут зависеть от температуры T.

Чтобы доказать истинность сделанного утверждения о неточности показанного на рис. I изменения энергетического спектра фононов необходимо проследить образование энергетического спектра (8) фононов в искажённой решётке от энергетического спектра (5) фононов неискажённой решётки. В работе /I8/ показано, что энергетический спектр фононов искажённой решётки описывается формулой

$$2[\Omega_q^{\pm}]^2 = \omega_q^2 + \omega_{q+q_0}^2 \pm \sqrt{(\omega_q^2 - \omega_{q+q_0}^2)^2 + 4|W_{q_0}|^2}\,,$$
(10)

где ω_q – частота фононов неискажённой решётки и $|W_{q_0}|^2 = \Sigma_{20}\Sigma_{02}$, где Σ_{20} и Σ_{02} –собственно-энергетические части фононного спектра (10) после учёта ангармонизма и электрон-фононного взаимодействия. Допустим, что в симметричной фазе неискажённая решётка имела только акустическую ветвь ω_q с периодом $2q_0 = \frac{2\pi}{a}$. Тогда из формулы (10) следует, что корни Ω_q^+ и Ω_q^- описывают спектры оптической и акустической ветвей в перестроенной решётке. В представлении приведённых зон вместо ω_{q+q_0} необходимо писать ω_{q_0-q}. Из (10) видно, что щель в спектре фононов в точке $q_1 = q_0/2$

$$[\Omega_{q_1}^+]^2 - [\Omega_{q_1}^-]^2 = 2|\Sigma_{20}\Sigma_{02}|\,, \tag{11}$$

где $\omega_{q_1} = \omega_{q_0-q_1}$ определяется собственно-энергетическими частями Σ_{20} и Σ_{02}. Видно также, что условие устойчивости искажённой решётки $\mathrm{Im}\,\Omega_q^{\pm} = 0$ можно выразить неравенством

$$[\Omega_q^+\Omega_q^-]^2 = \omega_q^2\,\omega_{q_0-q}^2 - \Sigma_{20}\Sigma_{02} \geq 0\,. \tag{12}$$

Чтобы неравенство (12) выполнялось везде, необходимо предположить, что произведение собственно-энергетических частей $\Sigma_{02}\Sigma_{20}$ можно представить в виде

$$|W|^2 = \omega_q^2\,\omega_{q-q_0}^2\,\lambda^2\,, \tag{13}$$

где λ – параметр, который следует определить.

Из (10) следует, что далеко от точки $q_1 = q_0/2$, где выполняется неравенство $|\omega_q^2 - \omega_{q_0-q}^2| \gg |W|$, можно приближённо представить $\Omega_q^{\pm}$ в виде

$$2\left[\Omega_q^{\pm}\right]^2 = \omega_q^2 + \omega_{q_0-q}^2 \pm |\omega_q^2 - \omega_{q_0-q}^2| \pm \frac{2|W|^2}{|\omega_q^2 - \omega_{q_0-q}^2|} . \tag{14}$$

Вблизи точки q_0 частота ω_{q_0-q} немного меньше частоты ω_q, и поэтому из (14) получаем

$$\left[\Omega_q^{+}\right]^2 \approx \omega_q^2 - |W|^2/(\omega_{q_0-q}^2 - \omega_q^2), \tag{15a}$$

$$\left[\Omega_q^{-}\right]^2 \approx \omega_{q_0-q}^2 - |W|^2/(\omega_q^2 - \omega_{q_0-q}^2) . \tag{15б}$$

Учитывая неравенство (12) и представление (13), для $\Omega_{q_0}^{+}$ и $\Omega_{q_0}^{-}$ сразу получаем

$$\left[\Omega_{q_0}^{+}\right]^2 = \omega_{q_0}^2 + \lambda^2 \omega_{q_0-q_0}^2 = \omega_{q_0}^2 , \tag{16a}$$

$$\left[\Omega_{q_0}^{-}\right]^2 = \omega_{q_0-q_0}^2 - \lambda^2 \omega_{q_0-q_0}^2 = 0 . \tag{16б}$$

Итак, мы получили, что вблизи точки q_0 взаимодействие между обеими ветвями очень слабо и в точке q_0, где $\omega_{q_0-q_0} = 0$, оно исчезает. Поэтому $\Omega_{q_0}^{+}$ и $\Omega_{q_0}^{-}$ можно представить как ω_{q_0} и 0. Остаётся только связать формулу (10) с формулой (8), чтобы определить λ. Полное соответствие между (8) и (10) можно установить с помощью равенств

$$\omega_q^2 = \frac{(\beta_1 + \beta_2)}{M}\left(1 - \cos(qa)\right) , \tag{17a}$$

$$\omega_{q_0-q}^2 = \frac{(\beta_1 + \beta_2)}{M}\left(1 + \cos(qa)\right) , \tag{17б}$$

$$|W|^2 = \frac{(\beta_1-\beta_2)^2}{M^2} \sin^2(qa) .$$

(I7в)

Равенство (I7в) показывает, что сделанное нами раньше предположение (I3) о представлении $|W|^2$ действительно имеет место, так как
$$\frac{(\beta_1-\beta_2)^2}{M^2}\sin^2(qa) =$$
$$\frac{(\beta_1+\beta_2)}{M}(1-\cos(qa))\frac{(\beta_1+\beta_2)}{M}(1+\cos qa)\frac{(\beta_1-\beta_2)^2}{(\beta_1+\beta_2)^2} . \quad (I8)$$

Равенство (I8) определяет значение константы λ, которая оказывается равной параметру расщепления энергетического спектра (8) ν. Поэтому можно считать, что энергетический спектр (I0) правильно описывает колебания устойчивой искажённой решётки. Таким образом, можно считать, что нами получен фононный спектр ω_q^x искаженной решетки на основе фононного спектра ω_q симметричной решётки. Кроме того, мы получили, что описание колебаний ионов металла на фононном языке соответствует распространению волн в однородной струне. Поэтому параметры β и ν для (I0) необходимо брать из (9).

Свободную энергию фононов искажённой удвоением периода решётки можно представить в виде
$$F_\phi = \frac{2NT}{\pi}\int_\nu^1 \ln\{4\,\mathrm{sh}(t\sqrt{1-y})\,\mathrm{sh}(t\sqrt{1+y})\}\frac{y\,dy}{\sqrt{1-y^2}\sqrt{y^2-\nu^2}} , \quad (I9)$$

где $t=\hbar\omega_1/T$ и $\omega_1^2=(\beta_1+\beta_2)/M$. Так как все структурные переходы происходят при температурах T_p намного ниже температуры Дебая Θ_D, то для $T>\Theta_D$ ограничимся только записью общего выражения для свободной энергии фононов /I9/:

$$F_\phi(\nu) = F_\phi(0) + NT\ln(1-\nu^2) + 2NT\sum_{n=1}^{\infty}\ln\left\{\frac{1+\sqrt{1+\gamma_n^2-\nu^2\gamma_n^2}}{1+\sqrt{1+\gamma_n^2}}\right\}, \tag{20}$$

где $\gamma_n^2 = \dfrac{t^4}{n^2\pi^2(2t^2+n^2\pi^2)}$, а $F_\phi(0)$ – свободная энергия фононов неискажённой решётки. Первая производная свободной энергии фононов (II) по параметру ν определяется выражением

$$\frac{\partial F_\phi}{\partial \nu} = -\frac{2\nu NT}{1-\nu^2} - \sum_{n=1}^{\infty}\frac{2NT}{\sqrt{1+\gamma_n^2-\nu^2\gamma_n^2}}\cdot\frac{\nu\gamma_n^2}{1+\sqrt{1+\gamma_n^2-\nu^2\gamma_n^2}} \tag{21}$$

При низких температурах $T < \Theta_D$ параметр t велик и основной вклад в свободную энергию фононов даёт энергия нулевых колебаний

$$E_\phi^0 = \frac{2N\hbar\omega_1}{\pi}\left\{\frac{\sqrt{1-\nu^2}}{\sqrt{2}} + (1-\nu^2)\int_0^{\frac{\sqrt{2}}{2}}\frac{(1-x^2)\,dx}{\sqrt{(1-x^2)^2-\nu^2x^4}} + \nu^2\int_0^{\frac{\sqrt{2}}{2}}\frac{dx}{\sqrt{(1-x^2)^2-\nu^2x^4}}\right\}. \tag{22}$$

Так как $\nu \ll 1$, то с точностью до ν^2 для энергии нулевых колебаний получаем

$$E_\phi^0 \simeq N\hbar\omega_0\frac{\sqrt{1+\Delta^2}}{(1-\Delta^2)}\left\{\sqrt{2}\left(1-2\nu^2+\sqrt{1-\nu^2}\right) + \frac{7\nu^2}{4}\ln(3+2\sqrt{2})\right\}. \tag{23}$$

Первая производная энергии нулевых колебаний (22) по ν имеет вид

$$\frac{\partial E_\phi^0}{\partial \nu} = \frac{N\hbar\omega_1}{\pi}\left\{-\frac{\nu}{\sqrt{2(1-\nu^2)}} + \nu\int_0^{\frac{\sqrt{2}}{2}}\frac{x^2\,dx}{\sqrt{(1-x^2)^2-\nu^2x^4}}\right\}. \tag{24}$$

Первая производная энергии нулевых колебаний (22) по параметру деформации Δ при учёте зависимостей $\nu = 2\Delta/(1+\Delta^2)$ и $\omega_1/\omega_0 = \sqrt{1+\Delta^2}/(1-\Delta^2)$

$$\frac{\partial E^{\circ}_{\Phi}}{\partial \Delta} = \frac{\nu}{2}\,\frac{1+2\sqrt{1-\nu^2}}{\sqrt{1-\nu^2}}\,\omega_1 \frac{\partial E^{\circ}_{\Phi}}{\partial \omega_1} + \sqrt{1-\nu^2}\,(1+\sqrt{1-\nu^2})\,\frac{\partial E^{\circ}_{\Phi}}{\partial \nu} \tag{25}$$

после несложных преобразований записывается в виде

$$\frac{\partial E^{\circ}_{\Phi}}{\partial \Delta} = \frac{N\hbar\omega_1\nu}{\pi}\left\{\frac{\sqrt{1-\nu^2}}{\sqrt{2}} + (1-\nu^2)\int_0^{\frac{\sqrt{2}}{2}} \frac{(1-x^2)\,dx}{\sqrt{(1-x^2)^2-\nu^2x^4}}\right\}$$

$$+\frac{N\hbar\omega_1\nu}{\pi}\left\{1+\nu^2+\frac{1}{\sqrt{1-\nu^2}}\right\}\int_0^{\frac{\sqrt{2}}{2}} \frac{dx}{\sqrt{(1-x^2)^2-\nu^2x^4}} \,. \tag{26}$$

Так как в (26) нет особенности по ν, то можно ограничиться только линейным по параметру Δ членом. В этом приближении получаем

$$\frac{\partial E^{\circ}_{\Phi}}{\partial \Delta} = \frac{2N\hbar\omega_0\Delta}{\pi}\left\{\sqrt{2} + \ln(3+2\sqrt{2})\right\} \,. \tag{27}$$

Первая производная увеличения упругой энергии по параметру Δ

$$\frac{\partial\, \delta E_{упр}}{\partial \Delta} = \frac{2NZ\varepsilon_F}{3}\,\frac{\Delta^2(1+3\Delta^2)}{(1-\Delta^2)^3} \tag{28}$$

в $\frac{k_F a}{2}\sqrt{\frac{ZM}{3m}}$ раз больше первой производной (27). Поэтому при определении равновесного значения параметра деформации решётки вкладом нулевых колебаний можно пренебречь.

Результаты верхнего исследования показывают, во-первых, что при определении энергетического спектра фононов решетки с удвоенным периодом необходимо точно решать систему уравнений движения, используя силовые константы искажённой решётки, так как приближённое решение даёт неверные результаты /20/, и, во-вторых, что изменение полной энергии фононов в следствие изменения их энергетического спектра при удвоении периода решётки намного меньше увеличения упругой энергии решетки за счет этого же искажения, и поэтому можно не учитывать влияние фононов при определении равновесного значения параметра деформации. Коновская аномалия в спектре фононов (рис. I) существует только в неискажённой решетке вблизи температуры структурного перехода T_p /2I/. Так как мягкими модами называются те ветви в спектре колебаний кристалла, которые имеют небольшие амплитуды смещения атомов, то, следовательно, акустические низкочастотные колебания являются "мягкими модами". Однако искажение решётки слабо меняет энергетический спектр "мягких мод". Ниже T_p существенно меняется энергетический спектр фононов лишь вблизи $q_1 = q_0/2$, где появляется щель (рис. 2).

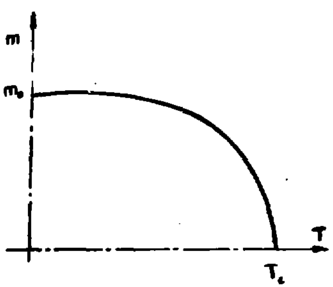

Рис. 3. Температурная зависимость параметра деформации Δ решётки.

Литература

I. E.Karthenser, J.Daltor. Physica, 31 , 269 /1965/.

2. А.М. Афанасьев, Ю. Каган. ЖЭТФ, 43, I456 (I962).

3. M.J.Rica, S.Strassler. Sol.St.Commun, 13, 697; 1931 /1973/.

4. Ph.B.Allen, Sol.St.Commun., 14, 937 /1974/

5. A.Birnboim, H.Gutfreund. J.Phys.Lett. /France/ 35,L147 /1974/

6. Л.Н. Булаевский. УФН, II5, 263 (I975).

7. Р.Е. Пайерлс. Квантовая теория твёрдых тел . ИЛ, Москва, (I956), с. I29.

8. R.E.Peierls.Ann.de Institue Henri Poincaré,5,177 /1935/.

9. А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников , ФМ, Москва (I962), с. 50.

IO. Endel Niels. J.Sci, and Ind.Res., 32, 615 /1973/.

II. Ч. Киттель. Квантовая теория твёрдых тел . Наука, Москва, (I967), с. I08 и I39.

I2. Я.И. Френкель. Введение в теорию металлов . ФМЛ, Москва, (I958), с. 43.

I3. E.Madelung. Phys.Zts., 19, 524 /1918/.

I4. D.Bohm, T.Staver. Phys.Rev., 84, 836 /1950/.

I5. Ч. Киттель. Введение в физику твёрдого тела , Москва (I963), с. I27.

I6. Р.Г. Архипов, Й.М. Рангелов. ФТТ, I2, 3414 (I970).

I7. Ю.В. Копаев, Р.Х. Тимеров. ЖЭТФ, 63, 290 (I972).

I8. W.Kohn. Phys.Rev.Lett., 2, 393 /1959/.

I9. И.М. Рыжик, И.С. Градштейн. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений . ФМ, Москва (I963), с. 608.

20. А.А. Овчинников. ФТТ, 7, 832 (I965).

21. M.J.Rice, S.Strassler. Helv.Phys.Acta, 46, 426 /1973/.

Рукопись поступила в издательский отдел
I апреля I977 года