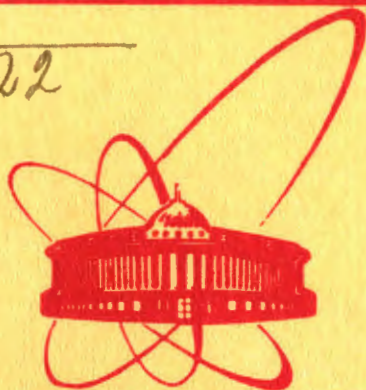


P-22



объединенный  
институт  
ядерных  
исследований  
дубна

4651/2-81

14/9-81

P17-81-446

И.М.Рангелов

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ  
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ КВЗ  
ВБЛИЗИ ТЕМПЕРАТУРЫ  
ПАЙЕРЛСОВСКОГО СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА

Направлено в журнал "Физика низких температур"

1981

Методом самосогласованного поля в линейном приближении получена правильная формула для диэлектрической проницаемости коллективизированных валентных электронов /КВЭ/. Определена температурная зависимость неприводимого поляризаационного оператора  $\Pi_0(q, \omega)$  для одномерного металла при  $\omega \neq 0$  в приближении сильной связи.

Прошло больше пяти лет с тех пор<sup>/1/</sup>, как автор указал на неправильное применение теории возмущения при вычислении изменения энергетического спектра /ЭС/ фононов /ЭС Ф/ при пайерлсовском структурном переходе /ПСП/. Скоро исполнится 20 лет со дня выхода работы Афанасьева и Кагана<sup>/2/</sup>, в которой исследовалось влияние ЭС КВЭ на интенсивность электрон-фононного взаимодействия /ЭФВ/ и устойчивость кристаллической структуры металлов /КСМ/. В этой работе показано, что в некоторых металлах, где для ЭС КВЭ имеет место равенство  $\epsilon(k+q_0) = -\epsilon(k)$ , ЭФВ очень сильно, а если плотность КВЭ такова, что  $\epsilon_F = \epsilon(q_0/2)$ , то поверхность Ферми /ПФ/ КВЭ совпадает с поверхностью вырождения энергии КВЭ, поэтому КСМ неустойчива и решетка получает новый период  $q_0$  ( $|q_0| = 2k_F$ ). Искажение решетки снимает вырождение в ЭС КВЭ, причем грани новых зон Бриллюэна совпадают с ПФ КВЭ, и поэтому металл переходит в диэлектрик. Авторы приближенно и поэтому неточно учли влияние ЭС КВЭ на КСМ, и в результате сделанные выводы оказались неправильными. Такую же ошибку сделал и Овчинников<sup>/3/</sup>, а потом и другие<sup>/4-13/</sup>. Если посмотреть работы Вентцеля<sup>/14/</sup>, Тябликова и Толмачева<sup>/15/</sup>, то можно увидеть эту же ошибку при учете /приближенном!/ влияния ЭС КВЭ на интенсивность ЭФВ и устойчивость КСМ. Необходимо отметить, что многие авторы знали, как правильно определить диэлектрическую проницаемость /ДП/ КВЭ в металлах  $\kappa(q, \omega)$ <sup>/16-23/</sup>:

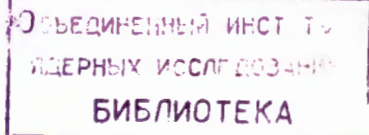
$$\kappa^{-1}(q, \omega) = 1 + V_0(q)K(q, \omega), \quad /1/$$

где  $V_0(q)$  - фурье-компонента кулоновского потенциала, а  $K(q, \omega)$  является фурье-компонентой опаздывающей двухчастичной функции Грина<sup>/21/</sup>:

$$K(q, t-t') = -i\theta(t-t') \langle [\rho(q, t)\rho(-q, t')] \rangle. \quad /2/$$

В /2/ использовалось обозначение

$$\rho(q, t) = \sum_k a_{k-q\sigma}^+(t) a_{k\sigma}(t), \quad /3/$$



описывающее фурье-компоненту оператора волны зарядовой плотности /ВЗП/. Хорошо известно, что

$$K^T(q, t-t') = -i \langle T(\rho(q, t), \rho(-q, t')) \rangle \quad /4/$$

можно вычислить с помощью неприводимого поляризационного оператора /НПО/  $\Pi(q, \omega)$  при помощи формулы

$$K^T(q, \omega) = \Pi(q, \omega) + \Pi(q, \omega) V_0(q) K^T(q, \omega). \quad /5/$$

Из /5/ следует, что

$$K^T(q, \omega) = \Pi(q, \omega) (1 - \Pi(q, \omega) V_0(q))^{-1}. \quad /6/$$

При приближенном определении вместо настоящего НПО  $\Pi(q, \omega)$  мы можем пользоваться приближенным НПО  $\Pi_0(q, \omega)$ , который вычисляется с помощью гриновской функции  $G_0(p, \epsilon)$  невзаимодействующих КВЭ:

$$\Pi_0(q, \omega) = -2i \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} G_0(p + \frac{q}{2}) G_0(p - \frac{q}{2}). \quad /7/$$

Дальше легко можно получить, что

$$K(q, \omega) = \Pi_0^R(q, \omega) (1 - \Pi_0^R(q, \omega) V_0(q))^{-1}, \quad /8/$$

где

$$\Pi_0^R(q, \omega) = \chi_0(q, \omega) = -\sum \frac{f(p) - f(p+q)}{\omega + \epsilon_p - \epsilon_{p+q} + i\delta}. \quad /9/$$

После подстановки /8/ в /1/ имеем

$$\kappa^{-1}(q, \omega) = 1 + \frac{V_0(q) \chi_0(q, \omega)}{1 - V_0(q) \chi_0(q, \omega)} = (1 - V_0(q) \chi_0(q, \omega))^{-1}. \quad /10/$$

Этот ответ не так уж сложен, и он получается сразу в приближении самосогласованного поля. Действительно, если поместить металл во внешнее периодическое поле с потенциалом  $W_0(q)$ , то КВЭ перераспределяются и самосогласованный потенциал  $W(q)$ , в котором они будут двигаться, должен определяться равенством

$$W(q) = W_0(q) + \rho(q) V_0(q) = W_0(q) + \chi_0(q) V_0(q) W(q). \quad /11/$$

Из /11/ легко можно получить, что ДП КВЭ  $\kappa(q, \omega) = W_0(q) / W(q)$  должна определяться равенством /10/. Для дальнейшего исследования нам необходимо написать равенство

$$\omega^2(q) = \frac{\omega_0^2(q)}{\kappa(q, \omega)} = \frac{\omega_0^2(q)}{[1 - V_0(q) \chi_0(q, \omega)]}. \quad /12/$$

Из /12/ видно, что только в случае, если выполняется неравенство  $|V_0(q) \chi_0(q, \omega)| \ll 1$ , вместо /12/ можно пользоваться приближенной формулой:

$$\omega^2(q) \approx \omega_0^2(q) (1 + V_0(q) \chi_0(q, \omega)). \quad /13/$$

Выводя формулу /13/, убеждаемся, что равенство /13/ приближенное и имеет смысл только при выполнении необходимого условия:  $1 \gg |V_0(q) \chi_0(q, \omega)|$ , при котором равенства /12/ и /13/ пренебрежимо слабо отличаются друг от друга. Поэтому не только грубо и неверно, но и непростительно использовать приближенное равенство /13/ в качестве условия, определяющего устойчивость КСМ. А ведь все выводы о температурной зависимости самосогласованно перенормированной частоты  $\omega(q)$  делались на основе равенства /13/. Всегда утверждалось, что, вычисляя функцию отклика  $\chi_0(q, \omega)$  с помощью формулы /9/, можно прийти к выводу, что при некоторых температурах произведение  $V_0(q) \chi_0(q, \omega)$  уменьшается и принимает значение, близкое к -1. Вот и говорится, что в этой области частота  $\omega(q)$  сильно уменьшается и при  $T = T_c$ , когда  $V_0(q) \chi_0(q, \omega) = -1$ , частота  $\omega(q)$  становится нулевой, а при  $T < T_c$  КСМ является неустойчивой, так как квадрат частоты  $\omega^2(q)$  становится отрицательным, а сама частота - комплексной. Но автору на основе сказанного при выводе равенства /13/ кажется, что эти утверждения неверны, и поэтому физическая картина, описывающая изменение ЭС Ф, является также необоснованной и неверной. Из формулы /12/ следует, что в рассматриваемой ранее модели все ПСП должны происходить при  $T \rightarrow 0$  К, то есть когда функция отклика  $\chi_0(q, \omega) \rightarrow \infty$  и ДП КВЭ  $\kappa(q, \omega) \rightarrow \infty$ .

Цель настоящей работы - исследовать температурную зависимость ДП КВЭ  $\kappa(q, \omega, T)$  в случае выполнения равенства  $\epsilon(k+q_0) = -\epsilon(k)$ , которое чаще всего наблюдается в квазиодномерных системах, когда ЭС КВЭ описывается лучше в приближении сильной связи. Но сначала мы покажем, что равенство /12/ действительно имеет место в приближении самосогласованного поля. Для этой цели можно воспользоваться гамильтонианом:

$$H = \sum \epsilon(k) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum V_0(q) a_{k+q\sigma}^+ a_{k_1-q\sigma}^+ a_{k_1\sigma} a_{k\sigma} + \sum \hbar \omega^0(q) (b_q^+ b_q + \frac{1}{2}) + \sum g_0(q) a_{k+q\sigma}^+ a_{k\sigma} (b_q + b_{-q}^+). \quad /14/$$

Тогда эволюция оператора рождения КВЭ  $a_{p\sigma}^+$  описывается уравнением движения:

$$i\hbar \frac{\partial a_{p\sigma}^+}{\partial t} = -\epsilon(p) a_{p\sigma}^+ - \sum g_0(q) a_{p+q\sigma}^+ (b_q + b_{-q}^+) - \sum V_0(q) a_{p+q\sigma}^+ \rho(q). \quad /15/$$

где  $g_0(q)$  есть константа незранированного ЭФВ. При ПСП КСМ меняется, решетка искажается ( $\langle b_{q_0} \rangle + \langle b_{-q_0}^+ \rangle \neq 0$ ), и получается новый период с волновым вектором  $q_0 = 2k_F$ . Существенный вклад в изменение ЭС КВЭ вносит член с  $q = q_0$ . Тогда из /15/ можно получить

$$i\hbar \frac{\partial a_{p\sigma}^+}{\partial t} = -\epsilon(p) a_{p\sigma}^+ - g_0(q_0) a_{p+q_0\sigma}^+ (b_{q_0} + b_{-q_0}^+) - V_0(q_0) a_{p+q_0\sigma}^+ \rho(q_0). \quad /16/$$

Из теории линейного отклика следует /18,23/, что в приближении среднего поля

$$\langle V_{q_0}^i \rangle = \kappa(q_0) (V_0(q_0) \langle \rho(q_0) \rangle + \langle V_{q_0}^i \rangle) = \frac{\kappa(q_0) V_0(q_0) \langle \rho(q_0) \rangle}{(1 - \kappa(q_0))}, \quad /17/$$

где

$$\langle V_{q_0}^i \rangle = g_0(q_0) (\langle b_{q_0} \rangle + \langle b_{-q_0}^+ \rangle) \quad /18/$$

есть потенциал модуляции плотности зарядов ионов, вносимый искажением решетки  $\Delta a = \eta$ . Поэтому в приближении среднего поля при учете /17/ из /16/ можно получить

$$i\hbar \frac{\partial a_{p\sigma}^+}{\partial t} = -\epsilon(p) a_{p\sigma}^+ - \frac{W_0(q_0)}{\kappa(q_0, \omega)} a_{p+q_0\sigma}^+ \eta. \quad /19/$$

Из /19/ вытекает, что роль ЭС КВЭ при определении самосогласованного искажения решетки проявляется в замене незранированной константы ЭФВ  $g_0(q_0)$  на экранированную  $g(q_0, \omega) = g_0(q_0, \omega) / \kappa(q_0, \omega)$ . Поэтому дальше мы можем вместо /16/ записать

$$i\hbar \frac{\partial a_{p\sigma}^+}{\partial t} = -\epsilon(p) a_{p\sigma}^+ - \frac{W_0(q_0)}{\kappa(q_0, \omega)} a_{p+q_0\sigma}^+ \eta. \quad /20a/$$

$$i\hbar \frac{\partial a_{p+q_0\sigma}^+}{\partial t} = -\epsilon(p+q_0) a_{p+q_0\sigma}^+ - \frac{W_0(q_0)}{\kappa(q_0, \omega)} a_{p\sigma}^+ \eta. \quad /20b/$$

где

$$W_0(q_0) = g_0(q_0, \omega) \sqrt{\frac{2M\omega_0(q_0)}{\hbar}} \quad /21a/$$

и искажение решетки

$$\eta = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_0(q_0)}} (\langle b_{q_0} \rangle + \langle b_{-q_0}^+ \rangle). \quad /21b/$$

Если предположить, что временная зависимость операторов рождения  $a_{p\sigma}^+$  и  $a_{p+q_0\sigma}^+$  имеет экспоненциальный вид  $\exp(i \frac{E(p)t}{\hbar})$ , то из /20/ для перенормированного ЭС КВЭ можно по-

лучить

$$E(p) = \left( \frac{\epsilon(p) + \epsilon(p+q_0)}{2} \right) \pm \sqrt{\left( \frac{\epsilon(p) - \epsilon(p+q_0)}{2} \right)^2 + \eta^2 |W(q_0)|^2}. \quad /22/$$

Итак, из /19/ следует, что формула /10/ является правильной и физически обоснованной, и поэтому дальше нам остается только воспользоваться формулой /9/. Если учесть, что при  $\mu=0$  и выполнении равенства  $\epsilon(p+q_0) = -\epsilon(p)$  можно получить

$$f(\epsilon(p+q_0)) = \left[ \exp\left(\frac{\epsilon(p+q_0)}{k_0 T}\right) + 1 \right]^{-1} = \left[ \exp\left(\frac{-\epsilon(p)}{k_0 T}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad /23a/$$

то есть что

$$f(\epsilon(p+q_0)) = f(\epsilon(p)) \exp\left(\frac{\epsilon(p)}{k_0 T}\right). \quad /23b/$$

то из /9/ следует

$$\chi_0(q, \omega, T) = -\sum_p \frac{f(\epsilon(p)) (\exp(\frac{\epsilon(p)}{k_0 T}) - 1)}{(\omega + 2\epsilon(p))}. \quad /24/$$

При  $T \rightarrow 0$  из /24/ вытекает

$$\chi_0(q, \omega) = -\sum_p \frac{1}{(\omega + 2\epsilon(p))}. \quad /25/$$

Как было отмечено раньше, ПСП происходит в квазиодномерных металлах, где для описания ЭС КВЭ удобнее воспользоваться приближением сильной связи. Если учесть, что  $\epsilon(k) = \epsilon_0(1 - \cos(ka))$ , то из /25/ можно получить

$$\chi_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega, 0\right) = -\frac{N}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{d(ka)}{\omega + 2\epsilon_0(1 - \cos(ka))} - \frac{2N}{\pi} \int_0^{\epsilon_0} \frac{d\epsilon}{(\omega + 2\epsilon)\sqrt{\epsilon(2\epsilon_0 - \epsilon)}}. \quad /26/$$

После замены в /26/ переменной имеем

$$\chi_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega, 0\right) = -\frac{2N}{\pi} \int_0^1 \frac{dy}{\omega + (\omega + 4\epsilon_0)y^2} = -\frac{2N \operatorname{arctg}\left(\sqrt{\frac{\omega + 4\epsilon_0}{\omega}}\right)}{\pi\sqrt{\omega(\omega + 4\epsilon_0)}}. \quad /27/$$

Таким образом, мы получили, что при  $T=0$  K приближенный НПО  $\chi_0(\frac{\pi}{a}, \omega, 0)$  не расходится при  $\omega \neq 0$ , и поэтому при  $T \neq 0$  K, но при  $T \rightarrow 0$  K приближенный НПО  $\chi_0(\frac{\pi}{a}, \omega, 0)$  не может иметь особенности по  $T$ . Действительно, из /24/ следует

$$\chi_0(q_0, \omega, T) = -\sum_p \frac{\operatorname{th}(\epsilon(p)/2k_0 T)}{\omega + 2\epsilon(p)}. \quad /28/$$

После подстановки ЭС КВЭ  $\epsilon(k) = \epsilon_0(1 - \cos(ka))$  в /28/ получаем

$$\chi_0(q_0, \omega, T) = -\frac{N}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{d(ka)}{\omega + 2\epsilon_0(1 - \cos(ka))} \operatorname{th}\left(\frac{\epsilon_0 \cos(ka)}{2k_0 T}\right). \quad /29/$$

Прямое решение интеграла в /29/ невозможно, поэтому мы должны воспользоваться интерполяционным приближением:

$$\operatorname{th} x \approx x / \sqrt{1+x^2} \quad /30/$$

Тогда на основе /29/ и /30/

$$X_0(q_0, \omega, T) = -\frac{N}{2\pi\epsilon_0} \int_0^{\pi/2} \frac{dy}{a+1-\cos y} \cdot \frac{\cos y}{\sqrt{\delta^2 + \cos^2 y}} \quad /31a/$$

$$= -\frac{N}{2\pi\epsilon_0} \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{a+1-\sin x} \cdot \frac{\sin x}{\sqrt{\delta^2 + \sin^2 x}}, \quad /31b/$$

где  $a = \frac{\omega}{2\epsilon_0}$  и  $\delta = \frac{2k_0\Gamma}{\epsilon_0}$ . Но и это выражение слишком сложное, чтобы получить легко обозримое выражение. Поэтому мы можем воспользоваться приближением  $\sin x \approx x$ . Тогда из /31б/ получаем простое выражение:

$$\tilde{X}_0(q_0, \omega, T) = -\frac{N}{4\epsilon_0} \int_0^1 \frac{dx}{1+a-x} \cdot \frac{x}{\sqrt{\delta^2 + x^2}} \quad /32/$$

Необходимо отметить, что сделанное приближение не снимает расходимости приближенного НПО /функции отклика/  $X_0(q_0, \omega, T)$  при  $T=0$ К. Действительно, из /32/ при  $\delta=0$  можно получить

$$\tilde{X}_0(q_0, \omega, 0) = -\frac{N}{4\epsilon_0} \ln\left(\frac{1+a}{a}\right) = -\frac{N}{4\epsilon_0} \ln\left(\frac{2\epsilon_0 + \omega}{\omega}\right) \quad /33/$$

В результате, сравнения /27/ с /33/, видим, что сделанное приближение  $\sin x \approx x$  заменяет корневую расходимость в /27/ по частоте  $\omega$  на логарифмическую расходимость в /33/. После замены переменной интегрирования в /32/ имеем

$$X_0(q, \omega, T) = -\frac{N}{2\epsilon_0} \left[ \int_0^{t_1} \frac{(1+a)^2 dt}{(1+a)^2 + \delta^2 - (\delta + (1+a)t)^2} - \int_0^{t_1} \frac{dt}{1-t^2} \right], \quad /34/$$

где верхняя граница интегрирования есть  $t_1 = \sqrt{1+\delta^2} - \delta$ . После несложных преобразований из /34/ можно получить простое и обозримое выражение:

$$X_0(q, \omega, T) = -\frac{N}{4\epsilon_0} \left\{ \frac{(1+a)}{\sqrt{(1+a)^2 + \delta^2}} \ln \left[ \frac{\sqrt{(1+a)^2 + \delta^2} + (1+a)\sqrt{1+\delta^2 - a\delta}}{\sqrt{(1+a)^2 + \delta^2} - (1+a)\sqrt{1+\delta^2 + a\delta}} \right] - \ln \left[ \frac{1+\sqrt{1+\delta^2} - \delta}{1-\sqrt{1+\delta^2} + \delta} \right] \right\} \quad /35/$$

Необходимо отметить, что выражение /31/ можно проинтегрировать точно. Поэтому для полноты изложения мы представим здесь только преобразование и конечный результат:

$$X_0(q, \omega, T) =$$

$$= -\frac{N}{2\pi\epsilon_0} \left[ \int_0^{\pi/2} \frac{(1+a)\cos x dx}{[(1+a)^2 - \cos^2 x]\sqrt{1+\delta^2 - \sin^2 x}} + \int_0^{\pi/2} \frac{\cos^2 x dx}{[(1+a)^2 - \cos^2 x]\sqrt{1+\delta^2 - \sin^2 x}} \right] = /36a/$$

$$= -\frac{N}{2\pi\epsilon_0} \left[ \int_0^1 \frac{(1+a)dx}{[2a+a^2+t^2]\sqrt{1+\delta^2 - t^2}} + \int_0^{\pi/2} \frac{\cos^2 \nu \cos^2 x}{[1 - \cos^2 \nu \cos^2 x]\sqrt{1+\delta^2 - \sin^2 x}} \right], \quad /36б/$$

где  $\cos \nu = (1+a)^{-1}$ . Первый интеграл берется точно с помощью элементарных функций, а второй интеграл можно представить только с помощью специальных функций:

$$X_0(q, \omega, T) = -\frac{N}{2\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{(1+a)}{\sqrt{(1+a)^2 + \delta^2} \sqrt{a^2 + 2a}} \operatorname{arctg} \left( \frac{\sqrt{(1+a)^2 + \delta^2}}{\delta \sqrt{2a+a^2}} \right) + \right. \quad /37a/$$

$$\left. + \frac{1}{\sqrt{1+\delta^2} \sin \nu \sqrt{1+k^2 \operatorname{tg}^2 \nu}} \left[ \frac{\pi}{2} + K(k) [F(\nu, k') - E(\nu, k')] - E(k) F(\nu, k') \right] \right\}.$$

После подстановки  $\cos \nu = (1+a)^{-1}$  и  $k = (1+\delta^2)^{-1/2}$  во второй член из /37а/ находим

$$X_0(q, \omega, T) = -\frac{N}{2\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{(1+a)}{\sqrt{(1+a)^2 + \delta^2} \sqrt{2a+a^2}} \operatorname{arctg} \left( \frac{\sqrt{(1+a)^2 + \delta^2}}{\delta \sqrt{2a+a^2}} \right) + \right. \quad /37б/$$

$$\left. + \frac{(1+a)}{\sqrt{(1+a)^2 + \delta^2} \sqrt{2a+a^2}} \left[ \frac{\pi}{2} + K(k) (F(\nu, k') - E(\nu, k')) - E(k) F(\nu, k') \right] \right\}.$$

В /37/ использовались эллиптические интегралы первого  $F(\nu, k)$  и второго  $E(\nu, k)$  родов <sup>25/</sup>, причем  $K(k) = F(\frac{\pi}{2}, k)$  и  $E(k) = E(\frac{\pi}{2}, k)$  - полные эллиптические интегралы I и II родов. Чтобы легче было определить роль температурной зависимости приближенного НПО  $\tilde{X}_0(q, \omega, T)$ , необходимо преобразовать выражение /35/. После этого можно получить

$$\tilde{X}_0(q, \omega, T) = -\frac{N}{4\epsilon_0} \left\{ \frac{2(1+a)}{\sqrt{(1+a)^2 + \delta^2}} \ln \left( \frac{\sqrt{(1+a)^2 + \delta^2} + (1+a)\sqrt{1+\delta^2 - a\delta}}{1 + \sqrt{1+\delta^2} - \delta} \right) + \right. \quad /38/$$

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

Из /38/ видно, что при  $\delta \rightarrow 0$  мы должны получить выражение



$$\bar{\chi}_0(q, \omega, 0) = -\frac{N}{4\epsilon_0} \left[ \frac{(1+\alpha)}{(1+\alpha)} \ln \left( \frac{4(1+\alpha)^2}{4\alpha(1+\alpha)} \right) \right], \quad /39/$$

которое полностью совпадает с выражением /33/.

Вот и наступил момент, когда необходимо отметить, что рассмотренная модель не лишена недостатков. Так, например, при  $\alpha=0$  выражение  $\chi_0(q, 0, T)$  расходится, как это видно из формулы

$$\chi_0(q, 0, T) = -\frac{N}{2\pi\epsilon_0} \int_0^{\pi/2} \frac{dy}{1-\cos y} \cdot \frac{\cos y}{\sqrt{\delta^2 + \cos^2 y}}, \quad /40/$$

при любых  $\delta$  /то есть при любых температурах  $T$ /, так как вся расходимость происходит при  $\cos y \rightarrow 1$ , где влиянием  $\delta$  можно пренебречь /нельзя забывать, что  $\delta^2 = \left(\frac{2k_0 T}{\epsilon_0}\right)^2 \ll 1$ /, и тогда выражение /40/ переходит в /27/. Поэтому нам необходимо выяснить, откуда возникает эта расходимость. Для этого вместо ЭС КВЗ в одномерном металле

$$\epsilon(k) = \epsilon_0(1 - \cos(ka)) \quad /41a/$$

необходимо использовать ЭС КВЗ в квазиодномерном металле

$$\epsilon(k) = \epsilon_0((1 - \cos(k_x a)) + \gamma(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a))). \quad /41b/$$

Здесь  $\gamma$  - параметр гофрировки ПФ КВЗ<sup>/26,27/</sup>. Тогда вместо расходящегося интеграла:

$$\int_0^{\pi/2} \frac{dy}{2 \sin^2 y/2} = \int_0^1 \frac{dt}{t^2}, \quad /42/$$

нам необходимо использовать конечный интеграл:

$$\int \frac{dx dy dz}{z^2 + \gamma(x^2 + y^2)} = \frac{2\pi}{\gamma} \int_0^1 \ln \left( \frac{1-t^2}{t^2} \right) = \frac{4\pi}{\gamma} \ln 2. \quad /43/$$

Из /43/ видно, что расходимость приближенного НПО /функции отклика/  $\bar{\chi}_0(q, 0, T)$  при  $\omega=0$  в /40/ является следствием пренебрежения зависимостью ЭС КВЗ /41b/ от поперечных компонент волнового вектора  $K_x$  и  $K_y$ , которая есть в /41b/. Поэтому мы никогда не должны забывать о квазиодномерности ЭС КВЗ. Таким образом, из сделанного исследования следует, что при  $\omega \rightarrow 0$  мы не имеем права воспользоваться рассматриваемой идеализированной моделью. Кроме того, мы не имеем права утверждать, что при  $T \rightarrow 0K$  и  $\omega \rightarrow 0$  НПО  $\chi(q, \omega, T)$  должен расти неограниченно.

Итак, мы получили, что в квазиодномерных металлах, где ЭС КВЗ точнее описывается в приближении сильной связи, ДП КВЗ для

волнового вектора  $q_0$ , для которого  $\epsilon(k+q_0) = -\epsilon(k)$ , при плотности КВЗ  $\epsilon_F = \epsilon(q_0/2)$  может иметь очень большое значение, существенно зависящее от температуры. Оказывается, что в таких сильно анизотропных металлах КСМ проявляет неустойчивость<sup>/26,27/</sup> относительно появления волн зарядовой плотности /ВЗП/ с волновым вектором  $q_0 = 2k_F$ . В работе<sup>/24/</sup> автором показано, что роль ДП КВЗ  $\kappa(q_0)$  можно определить, заменяя незэранированный матричный элемент  $W_0(q_0)$  решеточного потенциала экранированным матричным элементом  $W(q_0) = W_0(q_0)/\kappa(q_0)$ . Так, например, равновесное значение искажения решетки  $\eta_0 = \Delta_0 a$  определяется с помощью выражения

$$\Delta_0 = \frac{4\epsilon_F \kappa(q_0)}{W_0(q_0)} \exp \left[ -\frac{A(1+\lambda)}{B\kappa(q_0)} \left( \frac{2\epsilon_F \kappa(q_0)}{W_0(q_0)} \right)^2 \right]. \quad /44/$$

В формуле /44/ учтено влияние экранировки КВЗ на упругость решетки /заменой константы  $A$  на  $A/\kappa(q_0)$ /. Формула /44/ показывает, что большое значение ДП КВЗ  $\kappa(q_0)$  обеспечивает экспоненциальное уменьшение равновесного значения искажения решетки  $\eta_0 = \Delta_0 a$ . Действительно, хотя, с одной стороны, большое значение ДП КВЗ  $\kappa(q_0)$  уменьшает устойчивость КСМ вследствие замены константы упругости незэранированной решетки  $A$  на  $A/\kappa(q_0)$ , с другой - она /ДП КВЗ/ сильно уменьшает экранированный матричный элемент  $W(q_0) = W_0(q_0)/\kappa(q_0)$ , и поэтому, как следует из /44/, в сумме большое значение ДП КВЗ  $\kappa(q_0)$  экспоненциально уменьшает равновесное значение искажения решетки  $\Delta_0$ . Это означает, что не ангармонизм, а экранирующее влияние КВЗ сильно ограничивает величину равновесного искажения решетки  $\eta_0$ . Таким образом, выходит, что влияние КВЗ на устойчивость КСМ можно рассматривать как влияние среды, в которой движутся гармонические осцилляторы.

В конце необходимо отметить, что часто ПСП переносится из чистых металлов в соединения, где одновременно сосуществуют трехмерная каркасная решетка из сильно поляризуемых ионов больших размеров и металлические цепочки, заполняющие пустые проходы. В этих соединениях КВЗ одномерных металлов свободно движутся только вдоль цепочек. Поэтому КВЗ способны экранировать электрические поля только в областях своего свободного передвижения. В перпендикулярном направлении и вне этих областей электрическое поле и поляризация каркасной решетки определяются большими и сильно поляризуемыми ионами, поэтому некоторые явления в этих соединениях могут происходить как в обычном диэлектрике. Но нельзя забывать при этом о присутствии металлических цепочек, наличие которых может сильно исказить электрическое поле в диэлектрике. Поэтому нельзя стараться объяснить большинство динамических свойств решетки этих соединений с по-

мощью чисто металлических моделей без учета влияния сильно поляризуемого каркаса. КВЭ металлических цепочек поляризуют окружающую среду /ионы каркаса/, и при движении они увлекают за собой поляризационные облака<sup>/28/</sup>. Кроме того, нельзя забывать, что положительные ионы металлических цепочек тоже обладают иногда немалой электронной поляризуемостью<sup>/29/</sup>, которая может вызвать взаимодействие Ван дер Вальса между ионами<sup>/30/</sup>. Так как указанное взаимодействие обеспечивается высокочастотными колебаниями, то оно экранируется КВЭ слабее, чем обычное кулоновское отталкивание между ионами, поэтому при описании динамики их одномерных цепочек понадобится учитывать и убывающие по степеням /а не экспоненциально/ силы Ван дер Вальса. Необходимо иметь в виду, что большая ДП диэлектрического каркаса может сильно экранировать кулоновское взаимодействие между ВЗП в ближайших металлических цепочках. Поэтому в таких соединениях сначала могут происходить одномерные ПСП в результате возбуждения ВЗП в каждой цепочке, амплитуды которых одинаковые, но фазы вполне независимые. При более низкой температуре, порядка энергии кулоновского взаимодействия между ВЗП в соседних цепочках, должно наблюдаться трехмерное упорядочение<sup>/31/</sup>. При этом фазы ВЗП в ближайших цепочках отличаются на  $\pi$ , что вполне соответствует случаю максимального энергетического выигрыша ПСП как для КВЭ /полное совпадение ПФ КВЭ одновалентного металла при  $\epsilon(k+q_0) = -\epsilon(k)$  /, так и для максимальной энергии кулоновского притяжения между противоположно заряженными ВЗП. Следовательно, такое противофазное трехмерное упорядочение обеспечивается максимальной ДП КВЭ /максимум следует из /9//, а это объясняет, почему кроме продольного искажения решетки, приводящего к максимально эффективному изменению ЭС КВЭ, происходит и поперечное искажение.

Чтобы привести в полное соответствие вывод настоящей работы с ранними работами автора<sup>/26,27/</sup>, необходимо объяснить, почему тогда утверждалось, что в квазиодномерном или квазидвухмерном одновалентных металлах ПСП удваивает период неискаженной решетки вдоль оси максимального перекрытия волновых функций КВЭ. Получалось, что искажение решетки при ПСП приводит к образованию электронных и дырочных карманов, как это следует из рис. 1-4. Это является следствием того, что влияние "квази" учитывалось как возмущение. Кроме того, предполагалось<sup>/26/</sup>, что грани новых зон Бриллюэна искаженной решетки должны быть плоскостями. Позднее<sup>/27/</sup> было учтено, что совокупность точек разрыва энергии /то есть грани новых зон Бриллюэна искаженной решетки/, вызванного понижением симметрии кристаллического потенциала, не всегда лежит в плоскости. Но опять, рассматривая влияние гофрировки ПФ КВЭ как возмущение, не предполагали, что учет слабой гофрировки может помочь, а не только помешать

Рис. 1. ПФ КВЭ сильно анизотропного одновалентного металла с ПК решеткой с усиленной связью вдоль оси Z.

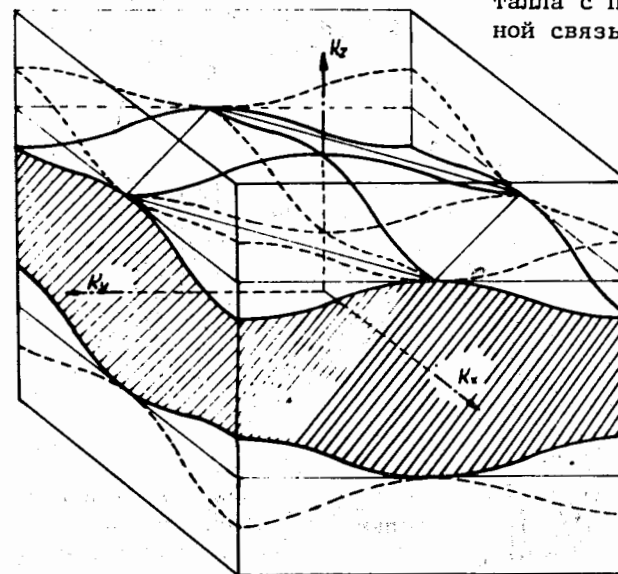


Рис. 2. Электронные и дырочные карманы в зонах полуметалла, когда ПК решетка деформирована вдоль оси Z.

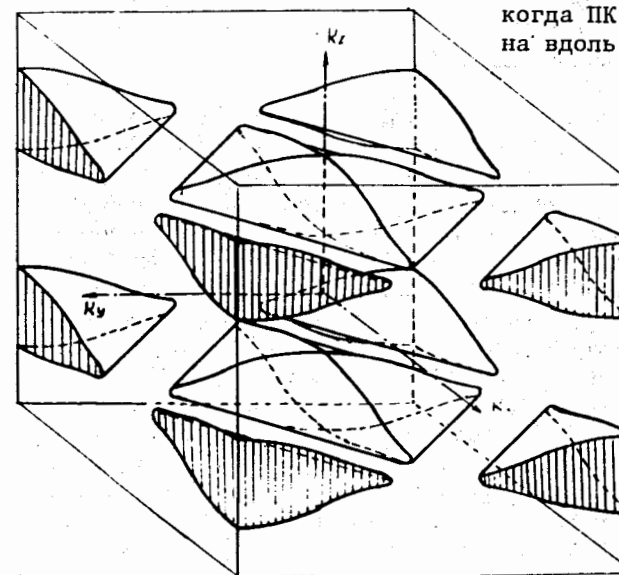


Рис.3. ПФ КВЭ сильно анизотропного одновалентного металла с ПК решеткой с усиленной связью вдоль плоскости XY.

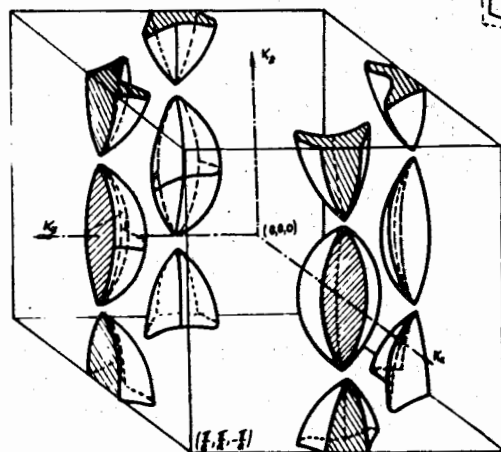
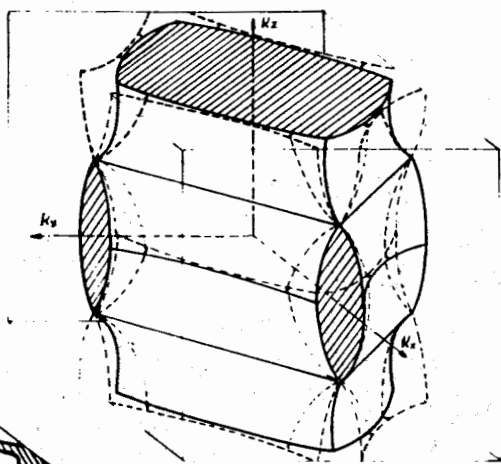
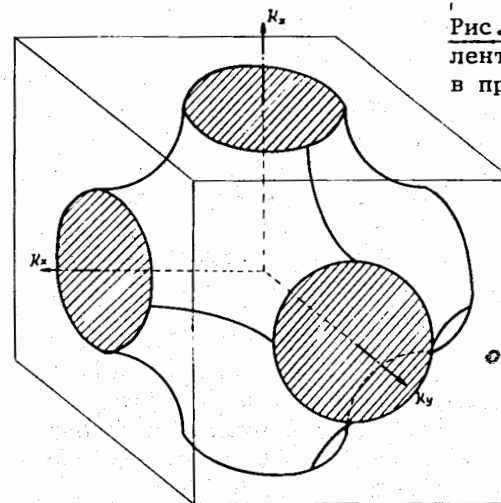


Рис.4. Электронные и дырочные карманы в зонах полуметалла, когда ПК решетка деформирована вдоль плоскости XY.

ПСП. Действительно, если в изотропном одновалентном металле с ПК решеткой ПФ КВЭ в приближении сильной связи /рис.5/ обеспечивает энергетическую выгодность ПСП, приводящего к образованию двух смещенных ГЦК подрешеток, и переход в состояние диэлектрика, то что мешает такому же искажению в одновалентном металле с ПК решеткой, с сильной анизотропией в пространственном распределении и ЭС КВЭ? Такое же искажение должно обеспечить полное совпадение ПФ КВЭ с гранями новой зоны Бриллюэна искаженной решетки в приближении сильной связи, с сильно анизотропным ЭС КВЭ. Оно должно обеспечить большую ДП КВЭ и энергетическую выгодность ГЦК решетки с четырьмя атомами в элементарной ячейке. При температуре  $T$  порядка гофрировки  $u\epsilon_0$ , которая приблизительно равна энергии кулоновского взаимодействия между ближайшими ВЗП, решетка соединений получает трехмерное упорядочение, электронные и дырочные карманы исчезают и соединение переходит в диэлектрическое состояние. Таким обра-

Рис.5. ПФ КВЭ изотропного одновалентного металла с ПК решеткой в приближении сильной связи.



зом, можно утверждать, что трехмерность /т.е. квази/ не мешает ПСП, а наоборот, подавлением флуктуаций она обеспечивает его энергетическую выгодность. Изотропизация ЭС КВЭ обычно связана со сферической симметрией их волновых функций, что почти всегда обеспечивает применимость приближения слабой связи. А известно, что переход ЭС КВЭ

из формы сильной связи в форму слабой сильно уменьшает энергетическую выгодность ПСП. Именно поэтому ПСП наблюдается обычно только в металлах с сильно анизотропным ЭС КВЭ, который лучше описывается в приближении сильной связи, что обеспечивает одновременное выполнение /сосуществование/ обоих равенств:  $\epsilon(k+q_0) = -\epsilon(k)$  и  $\epsilon_F = \epsilon(q/2)$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Рангелов Й.М. ОИЯИ, Р17-10558, Дубна, 1977.
2. Афанасьев А.М., Каган Ю. ЖЭТФ, 1962, 43, №4, с.1456-1463.
3. Овчинников А.А. ФТТ, 1965, 7, №3, с.832-838.
4. Булаевский Л.П. УФН, 1975, 115, №2, с.263-300.
5. Walker M.B. Canad. Journ.Phys., 1978, 56, No.1, p.127-138.
6. Schulz H.J. Phys.Rev., 1978, B18, No.10, p.5756-5767.
7. Лукин В.П. ЖЭТФ, 1978, 74, №3, с.1093-1101.
8. Giuliani G., Tosatti E. Nuovo Cim., 1978, 47B, No.2, p.135-148.
9. Vjelic A., Saub K., Barisic S. Nuovo Cim., 1974, 23B, No.1, p.101-123.
10. Berlinsky A.J. Report Progress Physics, 1979, No.42, p.1243-1283.
11. Tombs G.A. Phys.Rep., 1978, 40, No.3, p.181-240.
12. Friend R.H., Jerome J. Journ.Phys., 1979, C12, p.1441-1477.
13. Дорнер Б., Комер Р. В сб.: Динамические свойства твердых тел и жидкостей /под ред. С.Лавси и Т.Шпрингера/. "Мир", М., 1980, с.163-257, с.242.



14. Ventzel G. Phys.Rev., 1951, 83, No.1, p.168-169.
15. Тябликов С.В., Толмачев В.В. ЖЭТФ, 1958, 34, №5, с.1254-1257.
16. Пайнс Д., Проблема многих тел. ИЛ, М., 1965, с.82-85.
17. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах. "Мир", М., 1965, с.184-194.
18. Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. "Мир", М., 1967, с.405-412.
19. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. "Наука", М., 1967, с.141-149.
20. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. "Мир", М., 1974, с.170-175.
21. Doniach S., Sondheimer E.H. Green's Functions for Solid State Physicists. Benjamin, London-Amsterdam, 1974.
22. Максимов Е.Г., Хомский Д.И. В сб.: Проблема высокотемпературной сверхпроводимости /под ред. В.Л.Гинзбурга, Д.А.Киржница/. "Наука", М., 1977, с.110-155, 126.
23. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. "Мир", М., 1979, т.1, с.317-352.
24. Рангелов Й.М., Стоянова И.С. ФНТ, 1980, 6, №4, с.519-526.
25. Рыжик И.М., Градштейн И.С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Физматгиз, М., 1963, с.402.
26. Архипов Р.Г., Рангелов Й.М. ФТТ, 1970, 12, №12, с.3414-3424.
27. Рангелов Й.М. ФТТ, 1972, 14, №2, с.364-373.
28. Маделунг О. Теория твердого тела. "Наука", М., 1980, с.200.
29. Мон К.К., Ashcroft N.W., Chester G.V. Phys.Rev., 1979, B19, No.10, p.5103-5122.
30. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. "Наука", М., 1978, с.721.
31. Булаевский Л.Н., Хомский Д.И. ЖЭТФ, 1977, 73, №3, с.1148-1161.

Рукопись поступила в издательский отдел  
3 июля 1981 года.