

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

5137/82

P17-82-505

25/10-82

Й.М.Рангелов

ИЗМЕНЕНИЕ
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ
ОДНОМЕРНОГО МЕТАЛЛА
ВБЛИЗИ ТЕМПЕРАТУРЫ
ПАЙЕРЛСОВСКОГО СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА

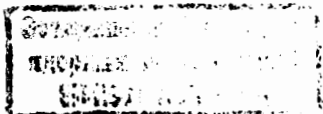
Направлено в журнал ФТТ

1982

Известно, что пайерлсовский структурный фазовый переход имеет место в квазиодномерных, сильно анизотропных одновалентных металлах. Часто для описания происходящих физических процессов в области температуры пайерлсовского перехода используются методы, описывающие структурные фазовые переходы в диэлектриках. Иногда для вычисления параметров перехода без доказательства используются приближенные формулы, хотя авторам должно быть известно, что для этого они не имеют ни малейшего основания. В ранних работах ^{1,2/} автор показал, как необходимо обращаться со знакомыми формулами, чтобы получить физически обоснованный правильный результат.

Всем известно, что существует универсальность поведения термодинамических величин при структурных фазовых переходах. Но чтобы понять физическую основу концепции универсальности, необходимо найти источники сингулярности термодинамических величин в критической области. Если при структурном фазовом переходе в диэлектриках параметр порядка непосредственно связан с искажением решетки, то наверняка это должно иметь место и при пайерлсовском структурном фазовом переходе в металлах. Если в диэлектриках нелинейные колебания параметра порядка отличаются от линейных колебаний решетки /обычных фононов/, то это должно происходить и в металле в области T_c . Если в диэлектриках потенциал для параметра порядка создается сильно поляризующимися ионами, то в металле этот потенциал создается коллективизированными электронами. Поэтому правильное физическое понимание пайерлсовского структурного фазового перехода приводит к выводу, что в критической области температуры постепенно начинают возбуждаться голдстоуновские нелинейные колебания параметра порядка, которые хотя и взаимодействуют с линейными колебаниями решетки /обычными фононами/, не имеют общей физической природы. Таким образом, в узкой области температуры вблизи T_c благодаря флуктуации температуры возникают сравнительно крупные фазовые неоднородности, изменение которых зависит от поведения нелинейных колебаний параметра порядка /голдстоуновской мягкой моды/.

Цель настоящей работы - обратить внимание на появление особенности в диэлектрической проницаемости электронов по частоте при появлении запрещенной щели на ферми-уровне в их энергетическом спектре. Такие щели появляются при периодическом искажении решетки, которое имеет место при пайерлсовском структурном переходе. Однако такие особенности должны наблюдаться и в диэлектрической проницаемости узкощелевых полупроводниках. Очень важно также изменение диэлектрической проницаемости в сильно



анизотропных квазиодномерных металлах в узкой области температуры $T \sim T_c$ при возникновении области с отличным от нуля параметром порядка. В этих областях искажение решетки приводит к появлению запрещенной щели на ферми-уровне в энергетическом спектре электронов. Таким образом, возбуждение флуктуации параметра порядка температурными флуктуациями в узкой температурной области вблизи T_c обеспечивает существование флуктуации диэлектрической проницаемости электронов. Четверть века тому назад Яковлевым, Михеевой и Величкиной^{/3/} экспериментально наблюдалось аномальное рассеяние пучка лазера на таких флуктуациях диэлектрической проницаемости при $\alpha \rightarrow \beta$ переходе кварца. В настоящей работе исследованы флуктуации диэлектрической проницаемости в рамках простой одномерной модели одновалентного металла.

Начнем с записи известной формулы Линдхарда^{/4-6/}:

$$\kappa(q, \omega) = 1 - V_0(q) \chi_0(q, \omega), \quad /1/$$

где

$$V_0(q) = \frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}; \quad /2a/$$

$$\chi_0(q, \omega) = \sum \frac{f(k+q) - f(k)}{\epsilon(k+q) - \epsilon(k) - \hbar\omega - i\hbar\epsilon}. \quad /2b/$$

В приближении сильной связи существуют спектры электронов, для которых можно подобрать такой волновой вектор q , для которого имеет место равенство $\epsilon(k+q) - \epsilon(\frac{q}{2}) = \epsilon(\frac{q}{2}) - \epsilon(k)$. Всегда можно подобрать такую плотность электронов, чтобы выполнялось равенство $\epsilon(\frac{q}{2}) = \mu$. В этом случае поверхность Ферми электронов совпадает с поверхностью вырождения их энергетического спектра в искаженной решетке, которое снимается электрон-решеточным взаимодействием. Действительно, если в симметричной решетке электроны имеют энергетический спектр $\epsilon(k)$, то в искаженной решетке в двухзонном приближении их энергетический спектр описывается формулой^{/7/}:

$$E(k) = \frac{[\epsilon(k+q) + \epsilon(k)]}{2} \pm \sqrt{\frac{[\epsilon(k+q) - \epsilon(k)]^2}{4} + \eta^2 |W|^2}. \quad /3/$$

Здесь $\eta = \Delta a$ описывает искажение решетки, а ηW - полуширину новой щели в энергетическом спектре электронов. В одномерном металле энергетический спектр электронов в симметричной решетке в приближении сильной связи описывается выражением

$$\epsilon(k) = -J \cos(ka). \quad /4/$$

Тогда в искаженной удвоением периода решетке, когда $q = \frac{\pi}{a}$ и поэтому $\epsilon(k + \frac{\pi}{a}) = -\epsilon(k)$, согласно формуле /3/ энергетический спектр электронов должен описываться выражением

$$E(k) = \pm \sqrt{\epsilon^2(k) + \eta^2 |W|^2}. \quad /5/$$

Мы нарочно выбрали начало отсчета энергии $\epsilon(k)$ от уровня Ферми в одновалентном металле, чтобы имело место равенство $\epsilon(k + \frac{\pi}{a}) = -\epsilon(k)$ при $\epsilon(\frac{\pi}{2a}) = \mu = 0$. При этом выборе имеет место следующее равенство:

$$f(k+q) = [\exp(\frac{\epsilon(k+q)}{k_0 T}) + 1]^{-1} = [\exp(\frac{-\epsilon(k)}{k_0 T}) + 1]^{-1}, \quad /6a/$$

т.е.

$$f(k+q) = f(k) \exp(\frac{\epsilon(k)}{k_0 T}). \quad /6b/$$

Тогда вместо /2b/ можно записать выражение

$$\chi_0(\frac{\pi}{a}, \omega) = - \sum \text{th}(\frac{\epsilon(k)}{2k_0 T}) \{ 2\epsilon(k) + \hbar\omega + i\hbar\epsilon \}^{-1}. \quad /7/$$

Если учесть, что при сделанном выборе начала отсчета энергии электронов $\epsilon(k)$ может менять знак, то из /7/ можно получить

$$\chi_0(\frac{\pi}{a}, \omega) = \sum 4\epsilon(k) \text{th}(\frac{\epsilon(k)}{2k_0 T}) \{ (\hbar\omega)^2 - 4\epsilon^2(k) \}^{-1}. \quad /8/$$

Чтобы более наглядно представить вывод формулы /8/, мы вернемся к самому началу получения формулы Линдхарда. Итак, если введем в металле электрическое поле

$$E = E_0 (e^{i(qr - \omega t)} + e^{-i(qr - \omega t)}), \quad /9/$$

то вместо обычной плоской волны электрона

$$\Psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(ikr) \quad /10/$$

для описания его поведения в электрическом поле /9/ мы должны использовать новую волновую функцию:

$$\tilde{\Psi}_k(r) = \Psi_k(r) (a_0(k) + a_q(k) e^{iqr} + a_{-q}(k) e^{-iqr}) \quad /11/$$

При этом

$$a_q(k) = \frac{\tilde{W}(q)}{\epsilon(k+q) - \epsilon(k) - \hbar\omega - i\hbar\epsilon} \quad \text{и} \quad a_{-q}^*(k) = \frac{\tilde{W}^*(q)}{\epsilon(k-q) - \epsilon(k) + \hbar\omega + i\hbar\epsilon} \quad /12/$$

Это означает, что электрическое поле /9/ вызвало модуляцию /5,8/ в плотности гомогенного электронного газа /10/. При этом имеем

$$n(q) = \tilde{W}(q) \sum f(k) [a_q(k) + a_{-q}^*(k)] = \quad /13a/$$

$$= \tilde{W}(q) \sum 2f(k) (\epsilon(k+q) - \epsilon(k)) [(\epsilon(k+q) - \epsilon(k))^2 - (\hbar\omega)^2]^{-1} \quad /13b/$$

При получении формулы /13b/ мы воспользовались равенствами: $\epsilon(k-q) = \epsilon(q-k) = \epsilon(q+k)$. Далее необходимо вычислить кулоновский потенциал, созданный модуляцией плотности электронов /13/:

$$V(q) = \frac{4\pi e^2 n(q)}{\Omega q^2} = \tilde{W}(q) V_0(q) \sum \frac{2f(k) [\epsilon(k+q) - \epsilon(k)]}{(\epsilon(k+q) - \epsilon(k))^2 - (\hbar\omega)^2} \quad /14/$$

А теперь с помощью равенства самосогласованного поля

$$\tilde{W}(q) = -eE_0 + V_{эд}(q) \quad /15/$$

и равенства /14/ можно получить

$$X_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right) = \sum 2f(k) (\epsilon(k+q) - \epsilon(k)) [(\epsilon(k+q) - \epsilon(k))^2 - (\hbar\omega)^2]^{-1} \quad /16/$$

Формула /16/ более правильная, чем формула /8/. Она общая и физически обоснованная. Однако, если учесть сделанный нами выбор начала отсчета энергии $\epsilon(k) / \epsilon(\frac{q}{2}) = \epsilon(\frac{\pi}{2a}) = \mu = 0$ и вспомнить о возможности замены знака у $\epsilon(k)$, тогда из /16/ сразу получается формула /8/.

После получения общей формулы /8/ можем приступить к исследованию поведения диэлектрической проницаемости электронов при появлении диэлектрической щели на ферми-уровне в их энергетическом спектре. Хотя все пайерлсовские структурные фазовые переходы происходят при $T \neq 0$ K, ради простоты мы сначала не будем

учитывать влияния температуры, заменяя при этом $\text{th}\left(\frac{\epsilon(k)}{2k_0 T}\right)$ единицей. Поэтому при $T=0$ K подстановкой /4/ в /8/ получаем

$$X_0\left(\frac{\pi}{q}, \omega\right) = \frac{2N}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{4J \cos(ka) d(ka)}{(\hbar\omega)^2 - 4J^2 \cos^2(ka)} = \frac{2N}{\pi J} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin x dx}{a^2 - \sin^2 x} \quad /17/$$

где $a = \frac{\hbar\omega}{2J}$. Интеграл /17/ берется точно, и в результате получаем

$$X_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right) = \frac{2N}{\pi J \sqrt{1-a^2}} \ln\left(\frac{a}{1+\sqrt{1-a^2}}\right) \quad /18/$$

В приближении $\sin x \approx x$ из /17/ получаем

$$X_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right) = \frac{2N}{\pi J} \int_0^{\pi/2} \frac{x dx}{a^2 - x^2} = \frac{2N}{\pi J} \ln\left(\frac{2a}{\sqrt{\pi^2 - 4a^2}}\right) \quad /19/$$

Нетрудно сообразить, что, интегрируя по x от 0 до 2, можно получить результат, отличающийся от выражения /18/ членами, пропорциональными $a^2 \ll 1$.

Как уже было сказано, после искажения в результате удвоения периода решетки энергетический спектр электронов описывается формулой /5/. Поэтому в искаженной решетке для функции отклика электронов вместо /17/ имеем

$$X_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right) = \frac{2N}{\pi J} \int_0^{\pi/2} \frac{\sqrt{\nu^2 + \sin^2 x} dx}{a^2 - \nu^2 - \sin^2 x} = \frac{2N}{\pi J} \int_0^{\pi/2} \frac{\sqrt{\nu^2 + x^2}}{a^2 - \nu^2 - x^2} \cdot \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \quad /20a/$$

$$= \frac{2N\nu^2}{\pi J a^2} (1+\nu^2) \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{(1+\nu^2)(1-\frac{\nu^2}{a^2}) - \sin^2 x} \cdot \frac{1}{\sqrt{1+\nu^2 - \sin^2 x}} \quad /20b/$$

где $\nu = \eta W/J$. Результат интегрирования в /20/ можно записать с помощью полных эллиптических функций первого и третьего порядков, однако это громоздкий и трудно обозримый ответ. Так как из /20/ видно, что знаменатель аннулируется при $x^2 = a^2 - \nu^2$, то мы воспользуемся приближением $\sin x \approx x$, так как самый большой вклад в интеграле дают $x \approx \sqrt{|a^2 - \nu^2|} \ll 1$. В этом приближении вместо /20/ получаем

$$\tilde{\chi}_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right) = \frac{2N}{\pi J} \int_0^2 \frac{\sqrt{x^2 + \nu^2} dx}{a^2 - \nu^2 - x^2} = \frac{2N}{\pi J} \int_0^{\phi_1} \frac{\nu^2 \cos \phi d\phi}{\cos^2 \phi (a^2 \cos^2 \phi - \nu^2)} = \quad /21a/$$

$$= \frac{2N}{\pi J} \left\{ \int_0^{z_1} \frac{dz}{(1 - \frac{\nu^2}{a^2}) - z^2} - \int_0^{z_1} \frac{dz}{1 - z^2} \right\}. \quad /21b/$$

Верхние границы интегрирования в /21/ следующие: $\phi_1 = \text{arctg}(\frac{2}{\nu})$, $z_1 = \frac{2}{\sqrt{4 + \nu^2}}$. После простых преобразований из /21/ можно получить

$$\tilde{\chi}_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right) = \frac{2N}{\pi J} \left\{ \frac{a}{\sqrt{a^2 - \nu^2}} \ln \left(\frac{2a + \sqrt{4 + \nu^2} \sqrt{a^2 - \nu^2}}{\nu \sqrt{1 + \nu^2 - a^2}} \right) + \ln \left(\frac{\nu}{2 + \sqrt{4 + \nu^2}} \right) \right\}. \quad /22a/$$

$$\tilde{\chi}_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right) = \frac{-2N}{\pi J} \left\{ \ln \left(\frac{2 + \sqrt{4 + \nu^2}}{\nu} \right) + \frac{a}{\sqrt{\nu^2 - a^2}} \text{arctg} \left(\frac{2a}{\sqrt{4 + \nu^2} \sqrt{\nu^2 - a^2}} \right) \right\}. \quad /22b/$$

Как видно из записи $\sqrt{a^2 - \nu^2}$ в /22a/ и $\sqrt{\nu^2 - a^2}$ в /22b/, формула /22a/ описывает $\tilde{\chi}_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right)$ при $a > \nu$, то есть при $\hbar\omega > 2\eta W$, а формула /22b/ описывает $\tilde{\chi}_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right)$ при $a < \nu$, то есть при $2\eta W > \hbar\omega$. Выражение /22a/ показывает, что при $a \rightarrow \nu$, но $a < \nu$ мы имеем следующий предел:

$$\begin{aligned} \lim_{a \rightarrow \nu} \tilde{\chi}_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right) &= \\ &= -\frac{2N}{\pi J} \ln \left(\frac{2 + \sqrt{4 + \nu^2}}{\nu} \right) + \frac{N}{\pi J} \lim_{a \rightarrow \nu} \frac{a}{\sqrt{a^2 - \nu^2}} \ln \left(\frac{2a + \sqrt{4 + \nu^2} \sqrt{a^2 - \nu^2}}{2a - \sqrt{4 + \nu^2} \sqrt{a^2 - \nu^2}} \right) = \\ &= -\frac{2N}{\pi J} \ln \left(\frac{2 + \sqrt{4 + \nu^2}}{\nu} \right) + \frac{N}{\pi J} \sqrt{4 + \nu^2}. \end{aligned} \quad /23a/$$

Однако при $a \rightarrow \nu$, но $a < \nu$ из /22b/ мы можем получить

$$\lim_{a \rightarrow \nu} \tilde{\chi}_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right) = -\frac{2N}{\pi J} \ln \left(\frac{2 + \sqrt{4 + \nu^2}}{\nu} \right) - \frac{2N}{\pi J} \lim_{a \rightarrow \nu} \frac{a}{\sqrt{\nu^2 - a^2}} \text{arctg} \left(\frac{2a}{\sqrt{4 + \nu^2} \sqrt{\nu^2 - a^2}} \right) /23b/$$

Известно^{/9/}, что при $x^2 \gg 1$ имеет место разложение

$$x \text{ arctg}(x) = \frac{\pi x}{2} - \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{(2l+1)x^{2l}}. \quad /24/$$

Поэтому из /23b/ следует, что при $a \rightarrow \nu$, но $a < \nu$ функция отклика электронов $\tilde{\chi}_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right)$ стремится к $-\infty$, и поэтому их диэлектрическая проницаемость $\kappa\left(\frac{\pi}{a}, \omega\right)$ /1/ растет неограниченно. Ограничение можно получить с помощью времени свободного пробега. Можно сообразить, что учет приводит к конечному значению κ . Однако мы этим заниматься не будем, а перейдем к учету влияния температуры на поведение диэлектрической проницаемости электронов. Для этой цели в /17/ необходимо подставить опущенный ранее $\text{th}\left(\frac{\epsilon(k)}{2k_0 T}\right)$. Действительно, подстановка /4/ в /8/ дает следующее выражение для функции отклика $\chi_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega, T\right)$:

$$\chi_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega, T\right) = \frac{2N}{\pi J} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin x dx}{a^2 - \sin^2 x} \text{th}\left(\frac{\sin x}{\delta}\right), \quad /25/$$

где $\delta = 2k_0 T / J$. Как видно из /25/, здесь также самый большой вклад в интеграл дают значения $x = a \ll 1$. Поэтому мы и здесь воспользуемся приближением $\sin x \approx x$. После этого вместо /25/ имеем

$$\tilde{\chi}_0\left(\frac{\pi}{a}, \omega, T\right) = \frac{2N}{\pi J} \int_0^2 \frac{x dx}{a^2 - x^2} \text{th}\left(\frac{x}{\delta}\right). \quad /26/$$

Однако в /26/ остался $\text{th}\left(\frac{x}{\delta}\right)$, который мешает получению простого ответа. Чтобы найти хорошую интерполяционную формулу для $\text{th}\left(\frac{x}{\delta}\right)$, мы положим в /26/ $a = 0$ и вычислим полученный интеграл:

$$\int_0^2 \frac{dx}{x} \text{th}\left(\frac{x}{\delta}\right) = \ln\left(\frac{8\gamma_0}{\pi\delta}\right) = \ln\left(\frac{9,08}{2\delta}\right). \quad /27/$$

В /27/ использовалось обозначение γ_0 , где $\ln \gamma_0 = C_0 = 0,577$ - постоянная Эйлера. После замены $\text{th}\left(\frac{x}{\delta}\right)$ на $x / \sqrt{x^2 + \delta^2}$ вместо /27/ имеем

$$\int_0^2 \frac{dx}{x} \frac{x}{\sqrt{x^2 + \delta^2}} = \ln \left(\frac{2 + \sqrt{4 + \delta^2}}{\delta} \right) = \ln \left(\frac{4}{\delta} \right). \quad /28/$$

Сравнивая результаты /27/ и /28/, видим, что различие между ними очень мало и его можно устранить с помощью множителя 17/15, на который необходимо умножить температуру в наших результатах, чтобы найти значения, полученные с использованием $\text{th} \left(\frac{x}{\delta} \right)$. Разумеется, при этом остается различие между ними и по степеням малого параметра δ^2 , которое пренебрежимо мало, так как $\delta \ll 1$.

После обоснования правомерности сделанных приближений, мы переходим к вычислению следующего интеграла:

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_0 \left(\frac{\pi}{a}, \omega, T \right) &= \frac{2N}{\pi J} \int_0^2 \frac{x^2}{a^2 - x^2} \cdot \frac{dx}{\sqrt{x^2 + \delta^2}} = \\ &= -\frac{2N}{\pi J} \left[\ln \left(\frac{2 + \sqrt{4 + \delta^2}}{\delta} \right) - \frac{a}{\sqrt{a^2 + \delta^2}} \ln \left(\frac{2\sqrt{a^2 + \delta^2} + a\sqrt{4 + \delta^2}}{\delta\sqrt{4 - a^2}} \right) \right]. \end{aligned} \quad /29a/$$

Сравнивая /29б/ с /18/, видим, что при $\delta \rightarrow 0$ результат выражения /29б/ точно переходит в результат выражения /18/. При этом переходе не должны наблюдаться никакие особенности. Проведенное исследование показывает, что в металлическом состоянии повышение температуры приводит только к слабому уменьшению динамической диэлектрической проницаемости электронов.

Остается вычислить изменение диэлектрической проницаемости электронов при пайерлсовском структурном фазовом переходе, то есть при появлении запрещенной щели в их энергетическом спектре и при отличной от нуля температуре. В искаженной решетке функция отклика $\chi_0 \left(\frac{\pi}{a}, \omega, T \right)$ электронов в одновалентном одномерном металле определяется выражением

$$\chi_0 \left(\frac{\pi}{a}, \omega, T \right) = \frac{2N}{\pi J} \int_0^{\pi/2} \frac{\sqrt{\nu^2 + \sin^2 x} dx}{a^2 - \nu^2 - \sin^2 x} \text{th} \left(\frac{\sqrt{\nu^2 + \sin^2 x}}{\delta} \right). \quad /30/$$

И здесь мы воспользуемся сделанными ранее приближениями. Тогда получаем

$$\tilde{\chi}_0 \left(\frac{\pi}{a}, \omega, T \right) = \frac{2N}{\pi J} \int_0^2 \frac{(x^2 + \nu^2)}{(a^2 - \nu^2 - x^2)} \cdot \frac{dx}{\sqrt{x^2 + \nu^2}} = \quad /31a/$$

$$= \frac{2N}{\pi J} \left[a^2 \int_0^2 \frac{dx}{(a^2 + \delta^2 - \nu^2 - \delta^2 - x^2) \sqrt{x^2 + \delta^2 + \nu^2}} - \int_0^2 \frac{dx}{\sqrt{x^2 + \nu^2 + \delta^2}} \right]. \quad /31б/$$

/21а/ легко привести к следующему виду:

$$\tilde{\chi}_0 \left(\frac{\pi}{a}, \omega \right) = \frac{2N}{\pi J} \left[a^2 \int_0^2 \frac{dx}{(a^2 - \nu^2 - x^2) \sqrt{x^2 + \nu^2}} - \int_0^2 \frac{dx}{\sqrt{x^2 + \delta^2}} \right]. \quad /21в/$$

Сравнивая /21в/ с /31б/, видим, что интегралы в обоих выражениях совпадают после замены a на $\sqrt{a^2 + \delta^2}$ и ν на $\sqrt{\nu^2 + \delta^2}$.

Действительно, после простых преобразований, аналогичных сделанным в /21/, из /31б/ можно получить

$$\tilde{\chi}_0 \left(\frac{\pi}{a}, \omega, T \right) = \frac{2N}{\pi J} \left[\frac{a^2}{a^2 + \delta^2} \int_0^{z_2} \frac{dz}{\left(1 - \frac{\nu^2 + \delta^2}{a^2 + \delta^2} z^2\right) - z^2} - \int_0^{z_2} \frac{dz}{1 - z^2} \right], \quad /32/$$

где $z_2 = 2/\sqrt{4 + \nu^2 + \delta^2}$. После несложных вычислений из /32/ получаем выражения

$$\begin{aligned} \chi_0 \left(\frac{\pi}{a}, \omega, T \right) &= -\frac{2N}{\pi J} \ln \left(\frac{2 + \sqrt{4 + \delta^2 + \nu^2}}{\sqrt{\nu^2 + \delta^2}} \right) + \\ &+ \frac{2N}{\pi J} \frac{a^2}{\sqrt{a^2 + \delta^2} \sqrt{a^2 - \nu^2}} \ln \left(\frac{2\sqrt{a^2 + \delta^2} + \sqrt{4 + \nu^2 + \delta^2} \sqrt{a^2 - \nu^2}}{\sqrt{\nu^2 + \delta^2} \sqrt{4 + \nu^2 - a^2}} \right), \end{aligned} \quad /33a/$$

$$\tilde{\chi}_0 \left(\frac{\pi}{a}, \omega, T \right) = -\frac{2N}{\pi J} \left\{ \ln \left(\frac{2 + \sqrt{4 + \nu^2 + \delta^2}}{\sqrt{\nu^2 + \delta^2}} \right) + \frac{a^2}{\sqrt{a^2 + \delta^2} \sqrt{\nu^2 - a^2}} \text{arctg} \left(\frac{2\sqrt{a^2 + \delta^2}}{\sqrt{\nu^2 - a^2} \sqrt{4 + \nu^2 + \delta^2}} \right) \right\}. \quad /33б/$$

Сравнение /22/ с /33/ показывает, что температура хотя не много и уменьшает влияние запрещенной щели в энергетическом спектре электронов на их диэлектрическую проницаемость вдали от критической области, все-таки не успевает устранить особенность в критической точке $\alpha = \nu$. Поэтому поведение функции отклика электронов $\chi_0(\frac{\pi}{a}, \omega, T)$ и их диэлектрической проницаемости $\kappa(\frac{\pi}{a}, \omega, T)$ в искаженной удвоением периода решетке при $T \neq 0$ К слабо отличается от их поведений ($\chi_0(\frac{\pi}{a}, \omega)$ и $\kappa(\frac{\pi}{a}, \omega)$) при $T = 0$ К.

Проведенное исследование показывает, что в сильно анизотропном квазиодномерном одновалентном металле появление запрещенной щели на ферми-уровне в энергетическом спектре электронов сразу сказывается на поведении их диэлектрической проницаемости. В критической области вблизи T_c , когда величина вводимой искажением решетки запрещенной щели в спектре электронов меньше или порядка фоновой частоты, возможно аномально сильное уменьшение частоты продольных колебаний. Результаты проведенных исследований дают нам право предположить, что такие аномалии в фоновых спектрах возможны и в сильно анизотропных узкощелевых полупроводниках. Экспериментальное выявление особенности в диэлектрической проницаемости с помощью изменения коэффициента преломления света дает нам возможность определить момент появления запрещенной щели в энергетическом спектре электронов при пайерлсовском структурном фазовом переходе. Как было отмечено в начале работы, до наступления пайерлсовского структурного перехода в решетке начинают возбуждаться голдстоуновские нелинейные колебания параметра порядка. Приближение к точке перехода T_c сильно уменьшает их частоту, что дает возможность увеличивать их число, амплитуду и размеры. Но с увеличением размера области возбуждения /радиуса корреляции/ с отличным от нуля параметром порядка /то есть с искаженной решеткой/ посягается щель в энергетическом спектре электронов, что должно вызвать сильное изменение поведения диэлектрической проницаемости электронов в этих областях. Таким образом, флуктуации параметра порядка вызывают незамедлительно флуктуации диэлектрической проницаемости. Поэтому экспериментальные исследования поведения диэлектрической проницаемости электронов в узкой области вблизи T_c могут пролить свет на образование зонной структуры и определить минимальный размер кластера искаженной решетки, при котором появляется запрещенная щель в энергетическом спектре электронов.

Необходимо отметить, что экспериментально наблюдался /10.11/ скачок рассеяния луча лазера на флуктуациях диэлектрической проницаемости при приближении к температуре T_c точки пайерлсовского структурного фазового перехода. В этих работах утверждается, что в узкой температурной области (0,5 К) вблизи T_c в эксперименте наблюдалось возникновение сравнительно крупных фазовых неоднородностей, приводящих к сильному рассеянию света, особенно

существенному при малых углах рассеяния. Фазовые неоднородности всегда выстроены вдоль оптической оси кристалла. При охлаждении кристаллов до 185 К (Hg_2Cl_2) и до 143 К (Hg_2Br_2) они испытывают структурные фазовые переходы типа смещения $D_{4h}^{17} \rightarrow D_{2h}^{17}$, сопровождающиеся удвоением элементарной ячейки. Было обнаружено, что в окрестности точки структурного фазового перехода возникает аномальная дифракция луча лазера, которая претерпевает качественные изменения в узком интервале температуры вблизи T_c . В области $T < T_c$, когда в кристалле устанавливается одна фаза, наблюдалось только рассеяние света на доменных стенках между областями с различными знаками параметра порядка. Это следует из факта, что в этой температурной области ($T < T_c$) только в доменных стенках существуют флуктуации диэлектрической проницаемости электронов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рангелов Й.М. ОИЯИ, Р17-10558, Дубна, 1977.
2. Рангелов Й.М. ОИЯИ, Р17-81-446, Дубна, 1981.
3. Яковлев И.А., Михеева Л.Ф., Величкина Т.С. Кристаллография, 1956, 1, № 1, с.123-132.
4. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. "Мир", М., 1974, с.170-176.
5. Харрисон У. Теория твердого тела. "Мир", М., 1972, с.330-333.
6. Ашкрофт Н., Мермин Н. Теория твердого тела. "Мир", М., 1979, т.1, с.342.
7. Рангелов Й.М. Годичник Софийского университета, Физ.фак., 1973/4, 66, с.69-80.
8. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. "Мир", М., 1968, с.64.
9. Рыжик И.М., Градштейн И.С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Физматгиз, М., 1963, с.65.
10. Шустин О.А. и др. Письма в ЖЭТФ, 1978, 27, № 6, с.349-352.
11. Борта Ч. и др. ФТТ, 1982, 24, № 3, с.875-878.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 июня 1982 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

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

D13-11182	Труды IX Международного симпозиума по ядерной электродинамике. Варна, 1977.	5 р. 00 к.
D17-11490	Труды Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1977.	6 р. 00 к.
D6-11574	Сборник аннотаций XV совещания по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1978.	2 р. 50 к.
D3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
D13-11807	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.
D1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
D1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
D11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D, 80 271	Труды международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
D4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
D1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.

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

Рангелов Я.М. P17-82-505
Изменение диэлектрической проницаемости одномерного металла вблизи температуры пайерлсовского структурного перехода

Исследована зависимость диэлектрической проницаемости $\kappa(q, \omega, T)$ и функции отклика Линдхарда $\chi_0(q, \omega, T)$ электронов от частоты и температуры в одномерном металле при температурах, близких к температуре пайерлсовского структурного перехода. Получено аномально сильное изменение диэлектрической проницаемости электронов при появлении запрещенной щели на ферми-уровне. Таким образом, изменение симметрии кристаллического потенциала в результате периодического искажения решетки при пайерлсовском структурном переходе, индуцирующее проявление запрещенной щели в энергетическом спектре электронов, вызывает аномально большое увеличение их диэлектрической проницаемости. Поэтому нелинейные колебания /флуктуации/ параметра порядка тесно связываются с флуктуациями диэлектрической проницаемости электронов в области температуры T_c структурного фазового перехода. Проведенное исследование математически просто описывает физическую основу экспериментов, в которых наблюдалась аномальная дифракция лазерного пучка.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Rangelov J.M. P17-82-505
Dielectric Permeability Change in One-Dimensional Metals near the Temperature of The Peierls Structure Transition

The dependence of dielectric permeability $\kappa(q, \omega, T)$ and Lindhard response function $\chi_0(q, \omega, T)$ of electrons on the frequency and temperature is investigated in area of the Peierls structure phase transition. The anomalous strong change of the dielectric permeability of electrons takes place when the forbidden gap appears in their energetic spectrum. So the appearance of the forbidden gap in the electron energy spectrum due to the asymmetry change of the crystalline potential in a one-dimensional metal at the Peierls structure phase transition induced anomalous strong increase of their dielectric permeability. Therefore the fluctuations of the ordering parameter near the critical point T of the Peierls structure phase transition are intimately connected with dielectric permeability fluctuations. Similarly the results of our research describe in a simple mathematical way the physical basis of the experiments, in which the anomalous diffraction of laser beam, suffering the quality change near T of the Peierls structure phase transition with the doubling of the elementary cell, is observed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.
Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.