

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P17-86-62

В.Шиллер, Э.Чилла, В.Л.Аксенов

**ЭФФЕКТЫ АНГАРМОНИЗМА
И ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ
В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ МЕТАЛЛАХ**

1986

ВВЕДЕНИЕ

Транспортные свойства квазиодномерных металлов привлекают в последние годы все большее внимание как теоретиков, так и экспериментаторов. В частности, было обнаружено^{/1/} аномальное температурное поведение электрического сопротивления выше температуры пайерлсовского перехода T_p , а именно: для систем типа тетратиофульвален-тетрацианхинодиметана (TTF-TCNQ), для которого $T_p = 58$ К, электрическое сопротивление зависит от температуры T квадратично в области $100 \text{ К} < T < 250 \text{ К}$ при атмосферном давлении^{/2,3/}. Физические причины такого поведения широко обсуждались в литературе^{/4-8/}.

В "либронной теории"^{/4/} необычное поведение сопротивления объясняется с помощью механизма рассеяния электронов молекулярными модами, которые связаны квадратично с движением электронов вдоль цепочек. Необходимо заметить, что квадратичная электрон-фононная связь в солях типа TTF-TCNQ приводит к рассеянию электронов как на либронах /вращательных степенях свободы/, так и на транслонах /трансляционных степенях свободы/^{/6,9/}. При этом было показано, что обычная линейная электрон-фононная связь не дает вклада в электрическое сопротивление из-за особенностей фононного спектра^{10-12/}. В модели квадратичной электрон-фононной связи^{/8/} помимо электрического сопротивления ρ вычислялись термсэдс S и коэффициент Холла R_H и было получено хорошее качественное /в интервале $100 \text{ К} < T < 250 \text{ К}$ / и количественное /при $T = 200 \text{ К}$ / согласие с данными для солей TTF-TCNQ.

Другой интересный вопрос, не получивший пока решения, состоит в поведении сопротивления в TTF-TCNQ при температурах выше 250 К . В этом случае оказывается, что при атмосферном давлении $\rho \sim T^{2,3}$, однако это отклонение от квадратичного поведения снимается при увеличении давления^{/1,3/}. Если же образец находится при постоянном объеме, то сопротивление меняется при изменении температуры почти по линейному закону^{/13/}. Ранее^{/1,10,14/} высказывалось предположение, что причиной такого разного поведения сопротивления должны служить ангармонические эффекты колебаний кристаллической решетки.

В настоящей работе предложено микроскопическое объяснение различного температурного поведения сопротивления при фиксированном давлении или объеме в квазиодномерных металлах. В разд.1 введена модель с учетом ангармонических эффектов. В разд.2 на основе теории ангармонических кристаллов вычислено

сопротивление, температурное поведение которого при постоянном давлении и объеме исследовано в разд.3. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными для солей TTF-TCNQ.

1. МОДЕЛЬ И НЕКОТОРЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Рассмотрим гамильтониан двухзонной модели:

$$H = H_e + H_{e-ph} + H_{ah} + H_{ext}, \quad /1a/$$

$$H_e = \sum_{k,\nu} \epsilon_{k\nu} a_{k\nu}^+ a_{k\nu}, \quad /1б/$$

$$H_{e-ph} = \sum_{k,\nu} g_{k,k+q_1+q_2,\nu} a_{k+q_1+q_2,\nu}^+ a_{k\nu} A_{q_1} A_{q_2}, \quad /1в/$$

$$H_{ah} = \sum_{n=0}^N T_n + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \phi(R_n - R_{n-1}), \quad /1г/$$

$$H_{ext} = \tau (R_N - R_0) = \tau \sum_{n=1}^N (R_n - R_{n-1}), \quad /1д/$$

где $A_q = b_q + b_q^+$. Операторы $a_{k\nu}^+$ ($a_{k\nu}$) и b_q^+ (b_q) - операторы рождения /уничтожения/ невзаимодействующих электронов в зоне ν и фононов с волновыми векторами k и q . Спин σ и поляризация либронных или транслонных мод μ включены в индексы k и q соответственно.

Для TTF-TCNQ электронный спектр в приближении сильной связи можно представить в виде /15/

$$\nu = Q: \quad \epsilon_{kQ} = - (W_Q/2) \cos kb \quad \text{для цепочек TCNQ} \quad /2a/$$

$$\nu = F: \quad \epsilon_{kF} = (W_F/2) \cos kb + \Delta_0 \quad \text{для цепочек TTF}, \quad /2б/$$

где b - постоянная решетки вдоль проводящих цепочек, W_Q, W_F - ширины электронных зон, Δ_0 - энергетический сдвиг, определяемый условием пересечения двух зон при энергии Ферми ϵ_F с $k_{FQ} = k_{FF} = k_F$ /16/

H_{e-ph} /1в/ описывает взаимодействие между электронами и фононами /либронами и транслонами/, где константа связи имеет вид /4/

$$g_{k,k+q_1+q_2,\nu} = \frac{\hbar G_\nu}{N(\omega_{q_1} \omega_{q_2})^{1/2}} \kappa(k, q_1, q_2), \quad /3a/$$

где

$$\kappa(k, q_1, q_2) = \cos kb - \cos(k+q_1)b - \cos(k+q_2)b + \cos(k+q_1+q_2)b, \quad /3б/$$

$$G_\nu = \begin{cases} J_{\nu,T}/M_\nu & \text{для транслонов} \\ J_{\nu,L}/I_\nu & \text{для либронных.} \end{cases} \quad /3в/$$

$J_{\nu,T}(J_{\nu,L})$ - константы взаимодействия электронов из зоны ν с транслонами /либронами/, $M_\nu(I_\nu)$ - масса /момент инерции/ молекул, число которых в системе равно N , и предполагается, что в каждой элементарной ячейке находится одна молекула /6/.

Гамильтониан /1г/ описывает ангармонические колебания линейной цепочки длиной L , содержащей $N+1$ одинаковых жестких молекул массой M_ν и моментом инерции I_ν . Первый член в /1г/ описывает кинетическую энергию, второй - потенциальную с потенциалом взаимодействия между ближайшими соседями $\phi(R_n - R_{n-1})$. Введем смещения относительно равновесных положений молекул в цепочке: $u_n - u_{n-1} = (R_n - R_{n-1}) - (R_n^0 - R_{n-1}^0) \equiv R_n - R_{n-1} - b$. Оператор H_{ah} с помощью преобразования Фурье можно представить через операторы рождения и уничтожения фононов b_q^+, b_q .

Гамильтониан /1д/ описывает действие внешних сил, где τ - натяжение, действующее на концы цепочки. При фиксированном натяжении постоянную решетки b можно вычислить с помощью уравнения /17,18/:

$$\tau = - \frac{1}{2} \langle \partial \phi(R_n - R_{n-1}) / \partial R_n \rangle, \quad /4/$$

где

$$\langle \dots \rangle_{ph} = \text{Sp}(\rho_{ph} \dots), \quad \rho_{ph} = \frac{e^{-\beta(H_{ah} + H_{ext})}}{\text{Sp}[e^{-\beta(H_{ah} + H_{ext})}]}$$

Гамильтониан /1в/ в отличие от гамильтониана, введенного в /4/, содержит две зоны и ангармонизм колебаний. Мы здесь не учитываем межзонное взаимодействие, т.е. рассматриваем не взаимодействующие цепочки. Для TTF-TCNQ это предположение вполне применимо /15,19/. Далее, поскольку мы интересуемся температурным интервалом от 100 до 300 К, то вполне оправдано приближение одночастичного рассеяния в модели /1/, в котором не рассматриваются эффекты коллективного рассеяния /20,21/ и локализации /22/.

Для вычисления сопротивления в модели /1/ мы воспользуемся следующей формулой /23/:

$$R = \frac{R_Q R_F}{R_Q + R_F}, \quad R_\nu = \frac{\Omega}{e^2 N_{eff,\nu}^2} \langle F_\nu ; F_\nu \rangle, \quad /5a/$$

$\langle F_\nu ; F_\nu \rangle$ - корреляционная функция:

$$\langle F_\nu ; F_\nu \rangle = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\eta t} \int_0^\beta d\lambda \text{Sp}(\rho F_\nu(t - i\hbar\lambda) \cdot F_\nu),$$

$$\rho = \exp(-\beta H) / \text{Sp}[\exp(-\beta H)], \quad /5б/$$

где $F_\nu(t - i\hbar\lambda)$ - оператор силы в представлении Гейзенберга, $\beta = (k_B T)^{-1}$, Ω - объем системы. Эффективное число электронов /TCNQ цепочки/ или дырок /TTF цепочки/ определяется как

$$N_{eff,\nu} = m^{-1} \int_0^\beta d\lambda \text{Sp}(\rho P_\nu(-i\hbar\lambda) P_\nu). \quad /6/$$

В /6/ P_ν - оператор полного импульса носителей заряда в зоне ν :

$$P_\nu = m \sum_k v_{k\nu} a_{k\nu}^+ a_{k\nu}, \quad v_{k\nu} = \hbar^{-1} \partial \epsilon_{k\nu} / \partial k, \quad /7/$$

где m - масса носителя заряда. Для оператора силы $F_\nu = i[H, P_\nu] / \hbar$ получаем

$$F_\nu = -\frac{i}{\hbar} m \sum_{k, q_1, q_2} g_{k, k+q_1+q_2, \nu} (v_{k+q_1+q_2, \nu} - v_{k\nu}) a_{k+q_1+q_2, \nu}^+ \times a_{k\nu} A_{q_1} A_{q_2}. \quad /8/$$

В формуле /5/ мы пренебрегли корреляционными функциями, описывающими эффект перемешивания зон, что соответствует пренебрежению межцепочечного, или межзонного, взаимодействия в гамильтониане /1/. Тем не менее формула /5а/ применима в случае слабого взаимодействия.

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ СОПРОТИВЛЕНИЯ ДЛЯ АНГАРМОНИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Чтобы получить электрическое сопротивление /5а/, нам надо найти корреляционную функцию /5б/ и эффективное число носителей заряда /6/ в пределе слабого рассеяния. В этом случае корреляционные функции /5б/ и /6/ могут быть вычислены в низшем порядке по теории возмущений относительно H_{e-ph} . В результате мы получаем

$$\langle F_\nu; F_\nu \rangle = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 dt e^{\eta t} \int_0^\beta d\lambda \left[\frac{4m^2}{\hbar} \sum_{k, q_1, q_2} |g_{k, k+q_1+q_2, \nu}|^2 \times \right. \quad /9а/$$

$$\left. \times E_{k, k+q_1+q_2} e^{i\alpha(\epsilon_{k+q_1+q_2} - \epsilon_k)} \langle A_{q_1}(\alpha) A_{-q_1} \rangle_{ph} \langle A_{q_2}(\alpha) A_{-q_2} \rangle_{ph} \right.$$

где

$$E_{k, k+q_1+q_2} = (v_{k+q_1+q_2} - v_k)^2 f_{k+q_1+q_2} (1 - f_k) \quad /9б/$$

и $\alpha = i(t - i\hbar\lambda) / \hbar$; f_k - функция распределения Ферми. При выводе /9/ было использовано следующее приближение:

$$\langle A_{q_1}(\alpha) A_{q_2}(\alpha) A_{q_1} A_{-q_1 - q_2} \rangle_{ph} \approx$$

$$\approx \langle A_{q_1}(\alpha) A_{-q_1} \rangle_{ph} \langle A_{q_2}(\alpha) A_{-q_2} \rangle (\delta_{q, -q_1} + \delta_{q, -q_2}). \quad /10/$$

Это приближение здесь, подобно другим системам /24/, вполне оправдано, поскольку оно касается фоновой подсистемы, слабо связанной с электронной подсистемой. Приближения в обеих подсистемах можно выбирать независимо.

Таким образом, необходимо вычислить фоновую корреляционную функцию $\langle A_q(\alpha) A_{-q} \rangle_{ph}$, для чего мы воспользуемся теорией самосогласованных фононов /17, 18/. Согласно спектральным теоремам /25/

$$\langle A_q(\alpha) A_{-q} \rangle_{ph} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega e^{-i\omega\alpha}}{1 - e^{-\beta\omega}} \lim_{\delta \rightarrow 0} [G_q(\omega + i\delta) - G_q(\omega - i\delta)]. \quad /11/$$

Функция Грина $G_q(\omega)$ в теории самосогласованных фононов /18/ имеет вид

$$G_q(\omega) = \langle\langle A_q | A_{-q} \rangle\rangle_\omega = \frac{2\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2 - 2\omega_q \Sigma_q(\omega)}, \quad /12/$$

где $\Sigma_q(\omega)$ - собственно-энергетический оператор, который можно представить в виде суммы действительной и мнимой частей:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \Sigma_q(\omega + i\delta) = \Delta_q(\omega) + i\Gamma_q(\omega). \quad /13/$$

Для одномерной решетки частота колебаний определяется уравнениями /17/:

$$\epsilon_q^2 = \omega_q^2 + 2\omega_q \Delta_q(\epsilon_q), \quad /14а/$$

$$\omega_q^2 = f(T, b) \omega_{0q}^2 / f, \quad /14б/$$

$$\Delta_q(\omega) = \frac{g^2(T, b)}{8f^2(T, b)} \frac{1}{N} \sum_{pp'} \delta_{p+p'-q, 0} \omega_q \omega_p \omega_{p'} [B^{(+)}(p, p', \omega) - B^{(-)}(p, p', \omega)], \quad /14в/$$

$$B^{(\pm)}(p, p', \omega) = \frac{N_p \pm N_{p'}}{2} \frac{\omega_p \pm \omega_{p'}}{\omega^2 - (\omega_p \pm \omega_{p'})^2}, \quad /14г/$$

$$N_p = \frac{\omega_p}{\epsilon_p} \text{cth} \frac{\epsilon_p}{2k_B T}, \quad /14д/$$

где ω_{0q} и f - частота колебаний и силовая постоянная в гармоническом приближении. Величины $f(T, b)$, $g(T, b)$ - ангармонические силовые постоянные:

$$f(T, b) = \frac{1}{2} \langle \partial^2 \phi(R_n - R_{n-1}) / \partial R_n^2 \rangle_{ph} \quad /15a/$$

$$g(T, b) = \frac{1}{2} \langle \partial^3 \phi(R_n - R_{n-1}) / \partial R_n^3 \rangle_{ph} \quad /15b/$$

Затухание фононов определяется мнимой частью собственно-энергетического оператора:

$$\Gamma_{q_1}(\omega) = \omega_{q_1} \frac{\pi g^2(T, b)}{8 N f^3(T, b)} \sum_{pp'} \delta_{p+p'-q_1, 0} \omega_p \omega_{p'} \times \\ \times \left[\frac{N_p + N_{p'}}{2} (\omega_p + \omega_{p'}) \delta(\omega^2 - (\omega_p + \omega_{p'})^2) - \frac{N_p - N_{p'}}{2} (\omega_p - \omega_{p'}) \times \right. \\ \left. \times \delta(\omega^2 - (\omega_p - \omega_{p'})^2) \right] \quad /16/$$

Для вычисления корреляционных функций /11/ с помощью уравнений /12/-/16/ воспользуемся свойствами симметрии: действительная часть собственно-энергетического оператора симметрична по ω , мнимая часть - антисимметрична. В результате получаем

$$\langle A_{q_1}(a) A_{-q_1} \rangle_{ph} = \frac{2\omega_{q_1}}{\pi} \int_0^\infty d\omega L(\omega, \epsilon_{q_1}(\omega), \Gamma_{q_1}(\omega)) \left[\frac{e^{i\omega a}}{1 - e^{-\beta\omega}} + \frac{e^{-i\omega a}}{e^{\beta\omega} - 1} \right], \quad /17a/$$

где

$$L(\omega, \epsilon_{q_1}(\omega), \Gamma_{q_1}(\omega)) = \frac{2\omega_{q_1} \Gamma_{q_1}(\omega)}{(\omega^2 - \epsilon_{q_1}^2(\omega))^2 + 4\omega_{q_1}^2 \Gamma_{q_1}^2(\omega)} \quad /17b/$$

Функцию /17b/ представим в виде разложения /26/:

$$L \approx \pi \delta(\omega^2 - \epsilon_{q_1}^2(\omega_{q_1})) + \frac{2\omega_{q_1} \Gamma_{q_1}(\omega)}{[\omega^2 - \epsilon_{q_1}^2(\omega_{q_1})]^2} + \dots \quad /18/$$

Выполняя интегрирование по λ и t в /9/ и применяя процедуру вычислений, предложенную в /8, 27/, получаем для корреляционной функции $\langle F_\nu; F_\nu \rangle$ выражение:

$$\langle F_\nu; F_\nu \rangle = F_{\nu R} + F_{\nu D} \quad /19a/$$

где первое слагаемое связано с эффектами перенормировки:

$$F_{\nu R} \approx 8\pi\beta \frac{m^2}{\hbar} \sum_{kq_1q_2} |g_{k, k+q_1+q_2, \nu}|^2 E_{k, k+q_1+q_2} \times \frac{\omega_{q_1} \omega_{q_2}}{\epsilon_{q_1} \epsilon_{q_2}} \times \\ \times [n_{q_1} n_{q_2} \delta(\epsilon_{+,+}) + n_{q_1} (n_{q_2} + 1) \delta(\epsilon_{+,-})], \quad /19b/$$

а второе слагаемое обусловлено эффектами затухания в низшем порядке по Γ_{q_1} :

$$F_{\nu D} = 2\pi\beta \frac{m^2}{\hbar} \frac{g^2(T, b)}{N f^3(T, b)} \sum_{kq_1q_2} |g_{k, k+q_1+q_2, \nu}|^2 E_{k, k+q_1+q_2} \times \\ \times \frac{\omega_{q_1} \omega_{k_1} \omega_{k_2} \omega_{q_2}^3}{\epsilon_{q_1}^3} n_{q_1} \delta_{k_1+k_2-q_2, 0} \{ D^+ [H^+(k_1, k_2) \delta(\epsilon_{+,+}^{(+)}) + \\ + [H^{(+)}(k_1, k_2) + 1] \delta(\epsilon_{+,-}^{(+)})] + D^- [H^-(k_1, k_2) \delta(\epsilon_{+,+}^{(-)}) + \\ + [H^{(-)}(k_1, k_2) + 1] \delta(\epsilon_{+,-}^{(-)})] \}, \quad /19в/$$

$$D^\pm(k_1, k_2, \epsilon_q) = (N_{k_2} \pm N_{k_1}) / [(\omega_{k_1} - \omega_{k_2})^2 - \epsilon_q^2], \quad /19г/$$

$$\epsilon_{\pm, \pm} = \epsilon_{k+q_1+q_2} - \epsilon_{k \pm \epsilon_{q_1} \pm \epsilon_{q_2}}, \quad /19д/$$

$$\epsilon_{\pm, \pm}^{(\pm)} = \epsilon_{k+q_1+q_2} - \epsilon_{k \pm \epsilon_{q_1} \pm (\omega_{k_1} \pm \omega_{k_2})}, \quad /19е/$$

$$n_q = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_q} - 1}, \quad H^\pm(k_1, k_2) = \frac{1}{e^{\beta\hbar(\omega_{k_1} \pm \omega_{k_2})} - 1} \quad /19ж/$$

В своем рассмотрении мы ограничимся классическим пределом высоких температур, когда $N_p \approx 2(\beta\hbar\omega_p)^{-1}$, $H^\pm(k_1, k_2) \approx \beta\hbar(\omega_{k_1} \pm \omega_{k_2})$ и $1 + n_q \approx (\beta\hbar\omega_q)^{-1}$. В этом приближении ренормированные частоты колебаний молекул принимают вид

$$\epsilon_q^2 = \gamma^2(T, b) \omega_{0q}^2, \quad /20a/$$

где

$$\gamma^2(T, b) = \frac{f(T, b)}{f} \left[1 - k_B T \frac{g^2(T, b)}{2f^3(T, b)} \right]. \quad /20б/$$

Пренебрегая температурной зависимостью распределения Ферми /8/, получаем из /19б/, /19в/:

$$F_{\nu R} = \frac{2^5 \pi m^2 \Omega^3}{(\pi a c)^3 \hbar^3 N^2} \frac{(k_B T)^2}{\gamma^4(T, b)} G_\nu^2 \cdot (I_1 + I_2), \quad /21a/$$

$$F_{\nu D} = \frac{2^4 \pi m^2 \Omega^3}{9(\pi a c)^3 \hbar^3 N^3} (k_B T)^3 \frac{g^2(T, b)}{f^3(T, b)} G_\nu^2 \cdot (I_1 + I_2), \quad /21б/$$

где

$$I_1 = \frac{\pi/b - 2k_F}{-\pi/b} \int_{-2k_F - q_1}^{k_F + q_1} dq_1 \frac{\kappa^2 (k_F + q_1 - 2k_F - q_1)}{\omega_{0q_1}^2 \omega_{0, -2k_F - q_1}^2}, \quad /21в/$$

$$I_2 = \frac{\pi/b}{-\pi/b + 2k_F} \int_{-2k_F - q_1}^{k_F + q_1} dq_1 \frac{\kappa^2 (-k_F + q_1, 2k_F - q_1)}{\omega_{0q_1}^2 \omega_{0, 2k_F - q_1}^2}.$$

Для $N_{eff, \nu}$ используем справедливое в случае слабого взаимодействия соотношение /8/

$$N_{eff, \nu} = \frac{mW_\nu \Omega b}{\hbar^2 (\pi a c)} |\sin k_F b|. \quad /22/$$

Чтобы получить явные выражения, воспользуемся следующими приближениями: $\epsilon_q = \omega_q$ и $\omega_{k_1 + \omega \pm 2k_F - q_1 - k_1} \approx 2\omega \pm 2k_F + q_1$. Заметим, что для вычисления интегралов в /21в/ нет необходимости использовать предположение о плоском спектре ($\omega_{0q} \approx \omega_L$), как это было сделано в работах /4,6,8/. Интегралы вычисляются и для дисперсионного соотношения вида $\omega_{0q} = \omega_m \sin(qb/2)$ /см. приложение/.

В результате мы получаем для электрического сопротивления следующее выражение:

$$R = R_0 \left[\frac{(k_B T)^2}{\gamma^4(T, b)} + \frac{g^2(T, b)}{18 f^2(T, b)} (k_B T)^3 \right], \quad /23а/$$

где

$$R_0 = \frac{2^9 \Omega_E^2}{a c b^3} \cdot \frac{\hbar}{e^2} \cdot \frac{1}{W_F^2 + W_Q^2} \cdot \left(\frac{G}{\omega_m^2} \right)^2 \frac{\pi - k_F b}{\sin^2 k_F b}, \quad /23б/$$

Ω_E - объем элементарной ячейки, a, b, c - постоянные решетки. Как и в /8/, мы полагали $G_F = G_Q = G$. Как видно из /23/, учет ангармонизма меняет температурную зависимость электрического сопротивления. От температуры зависят силовые постоянные $\gamma(T, b)$, $f(T, b)$ и $g(T, b)$, а также постоянная решетки b . Первый член в /23/ представляет собой псевдогармоническое приближение /18,29/, второй член, пропорциональный $(k_B T)^3$, появляется в результате учета эффектов затухания.

3. ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОВЕДЕНИЕ СОПРОТИВЛЕНИЯ

Чтобы получить температурную зависимость сопротивления /23/, необходимо вычислить силовые постоянные $f(T, b)$ и $g(T, b)$ /15/

для заданного потенциала взаимодействия. Термодинамическая перенормировка последнего в теории самосогласованных фоонов /17,18/ имеет вид

$$\langle \phi (R_n - R_{n-1}) \rangle = \bar{\phi}(b, T) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/2} \phi(b + x \sqrt{\bar{u}^2(T, b)}), \quad /24а/$$

где корреляционные функции смещений ближайших соседей

$$\bar{u}^2(T, b) = \langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle = \frac{1}{f(b, T)} \sum_q \frac{\omega_q}{2} N_q. \quad /24б/$$

Воспользуемся модельным потенциалом Морзе

$$\phi(b) = D [(e^{-a(b-r_0)})^2 - 1], \quad /25/$$

где D - глубина потенциала, r_0 - среднее расстояние между соседними молекулами в гармоническом приближении. Гармоническая силовая постоянная $f = Da^2$. Подставляя /25/ в /24а/, получаем самосогласованный потенциал в виде

$$\bar{\phi}(b, T) = D \{ e^{-2a(b-r_0)} e^{2y} - 2e^{-a(b-r_0)} e^{y/2} \}, \quad /26/$$

где $y = a^2 \bar{u}^2(b, T)$.

3.1. Сопротивление при постоянном давлении

Рассмотрим систему при постоянном внешнем натяжении $\tau = \text{const}$. При этом ее длина может меняться в зависимости от температуры. При нулевом натяжении равновесная постоянная решетки b_0 определяется из условия $\bar{\phi}'(b_0) = 0$ и имеет вид

$$b_0 = r_0 + 3y / 2a. \quad /27/$$

В случае ненулевого натяжения, или давления $p = 3a\tau/f$, будем полагать, что $k_B T \ll D$. Тогда $y \ll 1$ и

$$b = b_0 - p(1 + y) / 3a. \quad /28/$$

Силовые постоянные принимают вид

$$f(T, p) = f(1 - y + p), \quad /29а/$$

$$g(T, p) = -3af(1 + y + 7p/9). \quad /29б/$$

В выражении для сопротивления /23а/ первое слагаемое есть результат псевдогармонического приближения, а второе слагаемое

возникает с учетом эффектов затухания. Для самосогласованности вычислений среднеквадратичное смещение y также вычислим в этих двух приближениях. В результате в высокотемпературном пределе $k_B T \gg \hbar \omega$ получаем^{/17,29/}

$$y_1 = (k_B T / D)(1 + k_B T / D - p), \quad /30a/$$

$$y_2 = (k_B T / D)(1 + 11 k_B T / 2D - p). \quad /30b/$$

Используя /23/, /30/, получаем выражение для сопротивления при постоянном давлении:

$$R_p = R_0 \left[\frac{1}{(1 - y_1 + p)^2} + \frac{(1 + y_2 + 7p/9)^2 (k_B T / D)}{2(1 - y_2 + p)^3} \right]. \quad /31/$$

3.2. Сопротивление при постоянном объеме

Рассмотрим цепочку с фиксированными концами. В этом случае длина цепочки /объем/ фиксирована: $L = \text{const}$, например $b = r_0$. Силовые постоянные теперь определяются выражениями

$$f(T, b = r_0) = f(1 + 7\tilde{y}/2), \quad /32a/$$

$$g(T, b = r_0) = -3af(1 + 15\tilde{y}/6). \quad /32b/$$

Среднеквадратичные смещения имеют вид^{/17,29/}

$$\tilde{y}_1 = (k_B T / D)(1 - 7k_B T / 2D), \quad /33a/$$

$$\tilde{y}_2 = (k_B T / D)(1 + k_B T / D). \quad /33b/$$

В результате с помощью /23/, /33/ получаем выражение для сопротивления при постоянном объеме:

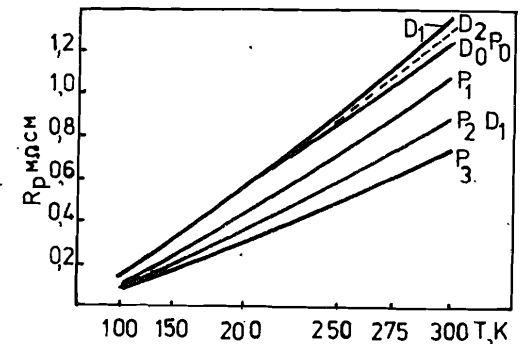
$$R_v = R_0 (k_B T)^2 \left[\frac{1}{(1 + 7\tilde{y}_1/2)^2} + \frac{(1 + 15\tilde{y}_2/6)^2 (k_B T / D)}{2(1 + 7\tilde{y}_2/2)^3} \right]. \quad /34/$$

3.3. Транспортные свойства TTF-TCNQ

Обсудим транспортные свойства TTF-TCNQ с помощью полученных формул для сопротивления /31/, /34/ и корреляционной функции /19a/, /21/.

На рис.1 показана температурная зависимость сопротивления при постоянном давлении, вычисленная по формуле /31/ при различных значениях параметра D , определяющего силу ангармонизма. Другие параметры, содержащиеся в R_0 /23b/, оценены из экспери-

Рис.1. Температурная зависимость сопротивления при постоянном давлении: $p_0 = 0$, $p_1 = 0,1$, $p_2 = 0,2$, $p_3 = 0,3$. $D_1 = 0,29$ эВ, $D_2 = 0,43$ эВ, $D_3 = 0,43$ эВ, D_0 - гармоническое приближение^{/8/}. Точки - экспериментальные значения^{/1/}.



ментальных данных для TTF-TCNQ /см. работу^{/8/}. В нашей теории имеется только один свободный параметр - константа электрон-фононного взаимодействия G , которая определялась из данных по сопротивлению: $R_p = 550$ мкОм·см при $T = 200$ К.

При атмосферном давлении ($p \approx 0$) температурная зависимость сопротивления R_p отклоняется от квадратичной /получаемой в гармонической теории^{/8/} с ростом температуры: при $T < 220$ К это отклонение практически незаметно, что и наблюдается в экспериментах^{/1,3/}. Для значения глубины потенциала $D_1 = 0,29$ эВ, как видно из рис.1, получается весьма удовлетворительное согласие. Поэтому это значение D_1 использовалось в дальнейших расчетах.

Приложение внешнего давления $p > 0$ к системе вдоль направления наивысшей проводимости, как видно из рис.1, приводит к уменьшению сопротивления. Кроме того, с ростом давления уменьшается и отклонение от квадратичного закона, что также хорошо согласуется с экспериментами^{/1,3/}.

Заметим, что применение внешнего давления оказывает воздействие не только на решетку, но и на электронную подсистему^{/30/}. Принимая во внимание зависимость ширины электронных зон от давления, можно показать^{/27/}, что эти эффекты не меняют полученных здесь результатов.

На рис.2 представлена температурная зависимость сопротивления при постоянном объеме R_v при различных значениях D . Видно, что для температур, больших 200 К, R_v заметно уменьшается по сравнению с R_p , показанным на рис.2 пунктирной линией. Видно также, что R_v имеет явную тенденцию к линейной зависимости от T , что согласуется с экспериментальными данными для TTF-TCNQ^{/13/}.

На рис.3 показана температурная зависимость R_p и R_v , нормированных на значение R_p при $T = 300$ К^{/3/}. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными для TTF-TCNQ, показанными на рисунке точками.

Таким образом, развитая в данной работе теория ангармонических эффектов в квазиодномерных металлах позволяет объяснить

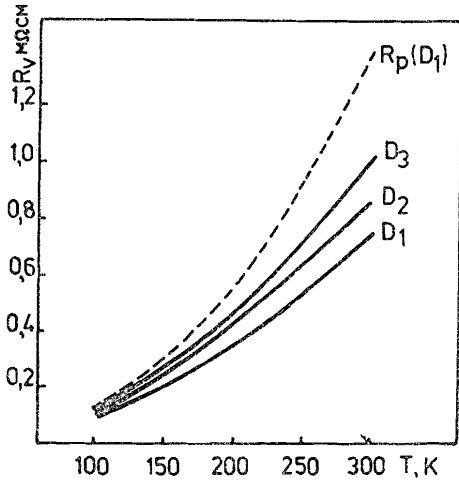
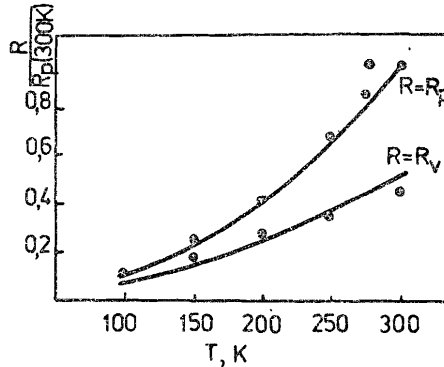


Рис.3. Нормированное сопротивление в зависимости от температуры. Точки - экспериментальные данные /1,3,13/.

Рис.2. Температурная зависимость сопротивления при постоянном объеме. $D_1 = 0,29$ эВ, $D_2 = 0,43$ эВ, $D_3 = 0,72$ эВ. Пунктирная кривая - R_p при $p=p_0$ и $D=D_1$.



с единой точки зрения поведения сопротивления при постоянном давлении и объеме в широком интервале температур.

Авторы выражают благодарность Ю.Шрайберу, Р.Цише, Г.Вонн, Н.М.Плакиде и А.Л.Куземскому за полезные обсуждения и замечания.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Рассмотрим вычисление интегралов в /21в/. Используя соотношение $\omega_{0q} = \omega_m \sin(qb/2)$ и выражение /36/, получаем

$$I_1 = \omega_m^{-4} \int_{-\pi}^{\pi-2a} (dz/b) \frac{[\cos a - \cos(a+z)]^2}{\sin^2(z/2) \sin^2(a+z/2)} \quad /A1/$$

$$I_2 = \omega_m^{-4} \int_{-\pi+2a}^{\pi} (dz/b) \frac{[\cos a - \cos(a-z)]^2}{\sin^2(z/2) \sin^2(a+z/2)} \quad /A2/$$

где $z = qb$, $a = kb$. Заметим, что при замене $z \rightarrow -z$ получаем $I_1 = I_2 = I$. Используя соотношение $\cos(\alpha - \beta) = \cos(\alpha + \beta) + 2 \sin \alpha \sin \beta$, получаем

$$I = \omega_m^{-4} \int_{-\pi}^{\pi-2a} (dz/b) \frac{\sin^2(a+z/2) \sin^2(z/2)}{\sin^2(z/2) \sin^2(a+z/2)} = \frac{8(\pi-a)}{\omega_m^4 b} \quad /A3/$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Weger M. Recent Development in Condensed Matter Physics. (Ed. by I.T.Devreese). Plenum Press, New York., 1981, vol.1, p.311.
2. Bloch A.N. Lect.Notes in Phys., 1977, vol.65, p.317.
3. Cooper J.R. et al. J.Phys.Lett., 1975, vol.36, p.L219.
4. Gutfreund H., Weger M. Phys.Rev.B, 1977, vol.16, p.1753.
5. Kaveh M., Gutfreund M., Weger M. Phys.Rev. B, 1978, vol.18, p.7171.
6. Conwell E.M. Phys.Rev. B, 1980, vol.22, p.1761.
7. Marianer S. et al. J.Phys.C, 1982, vol.15, p.3877.
8. Schiller W., Chilla E. J.Phys.C, 1983, vol.16, p.L747.
9. Gutfreund H., Harzstein C., Weger M. Sol.St.Comm., 1960, vol.36, p.647.
10. Gutfreund H., Kaveh M., Weger M. Lect.Notes in Phys., 1979, vol.96, p.105.
11. Kaveh M. Phys.Rev. B, 1981, vol.24, p.619.
12. Горьков Л.П., Долгов Е.Н., Лебедь А.Г. ЖЭТФ, 1982, т.82, с.613.
13. Friend R.R. et al. J.Phys., 1978, vol.39, p.L134.
14. Gutfreund H., Weger M., Kaveh M. Solid State Comm., 1978, vol.27, p.53.
15. Berlinsky A.J., Carolan J.F., Weiler F. Solid State Comm., 1974, vol.15, p.795.
16. Ellenson W.D. et al. Phys.Rev. B, 1977, vol.16, p.3244.
17. Plakida N.M., Siklos T. phys.stat.sol., 1969, vol.33, p.113.
18. Plakida N.M., Siklos T. phys.stat.sol., 1969, vol.33, p.103; Plakida N.M. J.Phys.C, 1971, vol.4, p.1680.
19. Conwell E. Phys.Rev. B, 1980, vol.22, p.3107.
20. Conwell E. Phys.Rev. B, 1979, vol.19, p.2409.
21. Dietrich K., Wagner M. phys.stat.sol.(b), 1985, vol.127, p.715.
22. Гоголин А.А., Мельников В.И., Рашба Е.И. ЖЭТФ, 1975, т.69, с.327.
23. Christoph V., Schiller W. phys.stat.sol.(b), 1978, vol.86, p.231; Christoph V., Röpke G. phys.stat.sol.(b), 1985, vol.131, p.11.

24. Aksenov V.L., Didyk A.Yu., Plakida N.M. phys.stat.sol.(b), 1984, vol.124, p.45.
25. Elk K., Gasser W. Die Methode der Greenschen Funktionen in der Festkörperphysik. Akademie-Verlag, Berlin, 1979.
26. Shukla R.C., Muller R.E. Phys.Rev. B, 1980, vol.21, p.544.
27. Chilla E. Dissertation A, TU Dresden, 1985.
28. Etemad S. et al. Phys.Rev. B, 1978, vol.17, p.513.
29. Plakida N.M., Siklos T. Acta Phys.Hung., 1969, vol.26, p.387.
30. Bandyopadhyay A.K. et al. J.Phys.C, 1980, vol.13, p.L803.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

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

Д17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
Р18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
Д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
Д3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
Д11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
Д7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
Д2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
Д2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
Д1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
Д17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р. 75 к.
Д10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983	3 р. 50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984 /2 тома/	13 р. 50 к.
Д4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985.	3 р. 75 к.

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

Рукопись поступила в издательский отдел
3 февраля 1986 года.

**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

Шиллер В., Чилла Э., Аксенов В.Л. P17-86-62
Эффекты ангармонизма и электрическое сопротивление
в квазиодномерных металлах

С учетом ангармоничности колебаний решетки вычислено электрическое сопротивление в модели квазиодномерного металла выше температуры пайерлсовского перехода. Установлено температурное поведение сопротивления при постоянном давлении и объеме. Результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными для солей TTF-TCNQ.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Schiller W., Chilla E., Aksenov V.L. P17-86-62
Anharmonic Effects and Electric Resistivity
in Quasi-One-Dimensional Metals

The electric resistivity in the model of quasi-one-dimensional metal above Peierls-transition temperature is calculated with taking into account anharmonicity of lattice vibrations. The temperature behaviour of resistivity is obtained at fixed pressure and volume. The obtained results are in good agreement with experiments on TTF-TCNQ.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986