

П-371

Phys. stat. sol., 1969, 23/1-68
v. 33, N1, p. 113-124

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 4033



Н.М.Плакида, Т.Шиклош

ТЕОРИЯ АНГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ.

II. Одномерная решетка

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1968

P4 - 4033

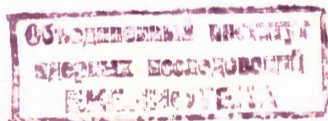
7522/2 мф.

Н.М.Плакида, Т.Шиклеш

ТЕОРИЯ АНГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ.

II. Одномерная решетка

Направлено в "Physica status solidi"



1. Введение

В настоящей работе на основе теории, развитой в /1/, исследуются свойства ангармонической линейной цепочки с взаимодействием между ближайшими соседями. Хотя эта система весьма далека от реальных трехмерных кристаллов, исследование ее позволяет качественно обсудить некоторые свойства реальных кристаллов, а также разобраться в некоторых вопросах теории благодаря возможности получить простое аналитическое решение. В связи с этим теория ангармонической линейной цепочки обсуждалась в рамках обычной теории возмущений в ряде работ (например, /2-5/) и в работе /6/ была рассмотрена теория в псевдогармоническом приближении, не учитывающем процессы распада фононных возбуждений. В настоящей работе обобщаются результаты псевдогармонического приближения /6/.

В разделе 2 на основе результатов работы /1/ выводится самосогласованная система уравнений для определения среднего расстояния между атомами цепочки, частоты колебаний цепочки и их затухания и внутренней энергии. В разделе 3 исследуются свойства линейной цепочки с закрепленными концами. Показано, что в этом случае цепочка устойчива во всей области температур. Определены ее свойства в случае малого ангармонизма и проведено сравнение с результатами обычной теории возмущений /2-4/. В разделе 4 исследуются свойства цепочки при фик-

сированном натяжении. Показано, что цепочка неустойчива при достаточно высокой температуре или достаточно большой энергии нулевых колебаний. Определены критические параметры и поведение термодинамических величин вблизи и вдали от критической точки.

2. Самосогласованная система уравнений для линейной цепочки

Рассмотрим линейную цепочку длиной L из $N + 1$ одинаковых атомов с массой M , гамильтониан которой при учете взаимодействия только между ближайшими соседями имеет вид:

$$H = H_0 + H_1 = \sum_{n=0}^N \frac{P_n^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \phi(R_n - R_{n-1}) + H_1, \quad (1)$$

где приняты те же обозначения, что и в /1/; $\phi(R_n - R_{n-1})$ - потенциал взаимодействия ближайших атомов. В одномерном случае действие внешних сил описывается внешним натяжением f , приложенным к концам цепочки:

$$H_1 = f(R_N - R_0) = f \sum_{n=1}^N (R_n - R_{n-1}). \quad (2)$$

При рассмотрении одномерной цепочки удобно ввести среднее расстояние между ближайшими атомами ℓ и относительное смещение соседних атомов, согласно определению:

$$R_n - R_{n-1} = \langle R_n - R_{n-1} \rangle + u_n - u_{n-1} \equiv \ell + u_n - u_{n-1}, \quad (3)$$

$$\omega_k^2 = \frac{2}{M} \left\langle \frac{1}{2} \phi'' (R_n - R_{n-1}) \right\rangle (1 - \cos k \ell) =$$

$$= \frac{4}{M} f(\theta, \ell) \sin^2 \frac{k \ell}{2} = \frac{f(\theta \ell)}{f} \omega_{ok}^2, \quad (7)$$

где ω_{ok} — частота колебаний в гармоническом приближении с силовой постоянной f . Массовый оператор, согласно (32)*, имеет вид:

$$\Pi_k(\omega) = \sum_{pp'} |\bar{V}_3(-k, p, p')|^2 F(p, p', \omega), \quad (8)$$

где функция $F(p, p', \omega)$ в приближении (35)*, (36)*

$$F(p, p', \omega) = \frac{N_p + N_{p'}}{2} \frac{\omega_p + \omega_{p'}}{\omega^2 - (\omega_p + \omega_{p'})^2} - \frac{N_p - N_{p'}}{2} \frac{\omega_p - \omega_{p'}}{\omega^2 - (\omega_p - \omega_{p'})^2} \quad (9)$$

и

$$N_p = \langle A_p^+ A_p \rangle = \frac{\omega_p}{\epsilon_p} \operatorname{cth} \frac{\epsilon_p}{2\theta}.$$

Функция $|\bar{V}_3|^2$ в случае парных сил и взаимодействия ближайших соседей в одномерном случае, согласно (21)*, имеет вид

$$|\bar{V}_3(-k, p, p')|^2 = \frac{\Delta(p+p'-k)}{N 8 \omega_k \omega_p \omega_{p'}} \left[\frac{1}{2} \langle \phi''' (R_n - R_{n-1}) \rangle \right]^2 \frac{4^8}{M^3} \sin^2 \frac{k \ell}{2}. \quad (10)$$

$$\cdot \sin^2 \frac{p \ell}{2} \sin^2 \frac{p' \ell}{2} = \frac{\Delta(p+p'-k)}{N 8 f^3(\theta, \ell)} g^2(\theta, \ell) \omega_k \omega_p \omega_{p'}.$$

Здесь было использовано определение (7).

где статистическое среднее $\langle \dots \rangle$ берется по равновесному состоянию системы с гамильтонианом ^{/1/} (см. (4)*).

Равновесное расстояние ℓ между атомами, согласно ^{/1/}, в одномерном случае определяется из уравнения

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

которое показывает, что средняя сила, действующая на атом в положении равновесия, равна нулю (см. (5)*).

Для определения частоты колебаний цепочки и их затухания воспользуемся методом двухвременных функций Грина. Следуя ^{/1/}, рассмотрим однофононную функцию Грина:

$$\begin{aligned} G_{nn'}(t-t') &= \langle\langle u_n(t); u_{n'}(t') \rangle\rangle = \\ &= \frac{1}{NM} \sum_k \frac{1}{2\omega_k} e^{ik(n-n')\ell} \langle\langle A_k(t); A_k^+(t') \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Для фурье-образа функции Грина, согласно результатам работы ^{/1/}, получаем выражение:

$$\langle\langle A_k | A_k^+ \rangle\rangle_{\omega} = \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2 - 2\omega_k \Pi_k(\omega)}, \quad (6)$$

где ω_k - частота в псевдогармоническом приближении, определяемая в нашем случае уравнением (см. (23)*):

Здесь и далее ()* обозначает формулу из работы ^{/1/}.

Частота колебаний одномерной цепочки ϵ_k , определяемая полюсами функции Грина (6), и затухание колебаний, определяемое мнимой частью массового оператора (8), равны

$$\epsilon_k^2 = \omega_k^2 + 2\omega_k^2 \frac{g^2(\theta, \ell)}{8f^3(\theta, \ell)} \frac{1}{N} \sum_{pp'} \Delta(p + p' - k) \omega_p \omega_{p'}, \operatorname{Re} F(p, p', \epsilon_k),$$

$$\Gamma_k(\epsilon_k) = -\operatorname{Im} \Pi_k(\epsilon_k + i\delta) = \quad (11)$$

$$= -\omega_k \frac{g^2(\theta, \ell)}{8f^3(\theta, \ell)} \frac{1}{N} \sum_{pp'} \Delta(p + p' - k) \omega_p \omega_{p'}, \operatorname{Im} F(p, p', \epsilon_k + i\delta). \quad (12)$$

Как видно, полученные выражения (11), (12) имеют тот же вид, что и в обычной теории возмущения^{/4/}, но благодаря учету вкладов от высших порядков ангармонизма в нашем приближении силовые постоянные $f(\theta, \ell)$ и $g(\theta, \ell)$ зависят от температуры θ и расстояния между ближайшими соседями ℓ .

Следуя^{/4/}, рассмотрим случай высоких и низких температур отдельно. Полагая в функции $F(p, p', \epsilon_k) \approx F(p, p', \omega_k)$, выполняем суммирование по p и p' в (11), (12) тем же методом, что и в^{/4/}. В результате получаем:

а) в случае высоких температур: $\theta \gg \omega_L$

$$\epsilon_k^2 = \omega_{ok}^2 \frac{f(\theta, \ell)}{f} \left[1 - \theta \frac{g^2(\theta, \ell)}{2f^3(\theta, \ell)} \right] \approx \omega_{ok}^2 \alpha_1^2(\theta, \ell) \quad (11a)$$

$$\Gamma_k(\epsilon_k) \approx \Gamma_k(\omega_k) = \theta \frac{g^2(\theta, \ell)}{16f^3(\theta, \ell)} \omega_L [1 + \mathfrak{F}(\pi - k\ell) \mathfrak{F}(\pi + k\ell)]; \quad (12a)$$

в) в случае низких температур: $\theta \ll \omega_L$

$$\epsilon_k^2 = \omega_{ok}^2 \frac{f(\theta, l)}{f} \left[1 - \frac{g^2(\theta, l)}{2f^2(\theta, l)} \frac{\omega_L}{\pi} \left(1 + \frac{\pi^2}{3} \frac{\theta^2}{\omega_L^2} \right) \right] \equiv \omega_{ok}^2 \alpha_2^2(\theta, l), \quad (11b)$$

где $\omega_L^2 = 4f(\theta, l)/M = \omega_{0L}^2 f(\theta, l)/f$ — максимальная частота колебаний цепочки в псевдогармоническом приближении (7). Таким образом, перенормировка частоты в данном приближении сводится только к изменению силовой постоянной (не зависит от k).

Силовые постоянные $f(\theta, l)$, $g(\theta, l)$ определяются производными самосогласованного парного потенциала. При вычислении его воспользуемся приближением (44)*, согласно которому

$$\langle \phi(R_n - R_{n-1}) \rangle \approx \tilde{\phi}(l) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \langle \frac{\langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle^s}{2^s} \phi^{(2s)}(l) \rangle. \quad (13)$$

Это выражение может быть записано в более удобной интегральной форме:

$$\tilde{\phi}(l) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} \phi(l + x\sqrt{u^2}), \quad (13a)$$

(Потенциалы с твердой сердцевиной требуют отдельного рассмотрения).

Корреляционная функция ближайших соседей может быть найдена по функции Грина (6):

$$\overline{u^2} \equiv \langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle = \frac{1}{f(\theta, l)N} \sum_k \frac{\omega_k^2}{2\epsilon_k} \operatorname{cth} \frac{\epsilon_k}{2\theta}. \quad (14)$$

В случае высоких и низких температур приближенное интегрирование в (14) с учетом (11а), (11в) дает

$$a_1^2 \overline{f u^2} = \theta \left(1 + \frac{1}{24} \frac{a_1 \omega_{0L}^2}{\theta^2} \right), \quad (\theta \gg \omega_L), \quad (14a)$$

$$a_2^2 \overline{f u^2} = \frac{\omega_{qL}}{\pi} \left(1 + \frac{\pi^2}{3} \frac{\theta^2}{(a_2 \omega_{0L})^2} \right), \quad (\theta \ll \omega_L). \quad (14b)$$

Выражение для внутренней энергии, определяющей тепловые свойства системы, согласно ^{1/1}, полностью определяется перенормированной частотой ϵ_k . В случае парных сил выражение для нее (48)* имеет вид

$$E = \frac{N}{2} \overline{\phi}(\ell) + \frac{1}{12} \sum_k \frac{5\epsilon_k^2 - 2\omega_k^2}{\epsilon_k} \operatorname{cth} \frac{\epsilon_k}{2\theta}. \quad (15)$$

Учитывая выражение (14) и (11а), (11в), внутреннюю энергию удобно записать в виде

$$\frac{1}{N} E = \frac{1}{2} \overline{\phi}(\ell) + \frac{1}{2} \overline{f(\theta, \ell) u^2} + \frac{5}{6} \overline{f u^2} (a^2(\theta, \ell) - \frac{f(\theta, \ell)}{f}), \quad (15a)$$

где $a = a_1$ из (11а) при $\theta \gg \omega_L$ и $a = a_2$ из (11в) при $\theta \ll \omega_L$.

Таким образом, мы получили самосогласованную систему уравнений (11), (13)-(15) и (4) для изучения свойств ангармонической линейной цепочки.

3. Свойства линейной цепочки при фиксированной длине

Полученная самосогласованная система уравнений может быть решена в явном виде, если известен вид парного потенциала взаимодействия (13). Выберем в качестве модельного потенциала потенциал Морзе:

$$\phi(R) = D \left[\left(e^{-a(R-r_0)} - 1 \right)^2 - 1 \right], \quad (16)$$

где D — глубина потенциальной ямы, r_0 — среднее расстояние между ближайшими атомами в гармоническом приближении. Силовая постоянная в гармоническом приближении $f = \frac{1}{2} \phi''(r_0) = Da^2$. Пользуясь разложением (13) или интегрируя в (13а), получаем следующее выражение для парного самосогласованного потенциала;

$$\phi(\ell) = D \left\{ e^{-2a(\ell-r_0)} e^{2y} - 2e^{-a(\ell-r_0)} e^{y/2} \right\}, \quad (17)$$

где $y = a^2 \overline{u^2}(\ell)$.

В этом разделе мы рассмотрим случай, когда длина цепочки фиксирована, например, $\ell = r_0 = \text{const}$. Заметим, что обычно рассматривается этот случай при вычислениях по теории возмущений (см. ^{2,3,4}). Дифференцируя (17) по ℓ и полагая $\ell = r_0$, получим

$$\begin{aligned} f(\theta, \ell) &= \frac{1}{2} \phi''(\ell) = f(2e^{2y} - e^{y/2}), \\ g(\theta, \ell) &= \frac{1}{2} \phi'''(\ell) = -fa(4e^{2y} - e^{y/2}), \end{aligned} \quad (18)$$

$$r(\theta, \ell) = \frac{1}{a} \phi'(\ell) = \frac{f}{a} (e^{2y} - e^{y/2}). \quad (19)$$

Рассмотрим далее отдельно случай высоких и низких температур.

3а. Высокие температуры: $\theta \gg \omega_L$. Подставляя (18) в (14а) с учетом (11а), получаем следующее уравнение для y

$$\lambda_1(y - \lambda_1 \eta) (2e^{2y} - e^{y/2}) \left[1 - \frac{1}{2\lambda_1} e^{-2y} \frac{(4 - e^{-3y/2})^2}{(2 - e^{-3y/2})^3} \right] = 1,$$

где $\lambda_1 = D/\theta$, $\eta = \omega_{0L}^2 / 24 D^2 \ll 1$. Легко убедиться, что это уравнение всегда имеет вещественные решения для $y > 0$ во всей области температур, что совпадает с результатами псевдогармонического приближения^{/6/}. Результатам обычной теории возмущений соответствует случай $\theta \ll D$, когда $y \ll 1$ и равен

$$y = \frac{\theta}{D} \left[1 + \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \left(1 - \frac{7}{2} \frac{\theta}{D} \right) \right]. \quad (20a)$$

Частота колебаний цепочки (11а) и их затухание (12а), вычисленные при помощи (20а), очевидно, совпадают с полученными в работе^{/4/}:

$$\epsilon_k^2 = \omega_{ok}^2 \left\{ 1 - \frac{\theta}{D} \left[1 - \frac{5}{8} \frac{\theta}{D} - \frac{7}{2} \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \right] \right\} \quad (21a)$$

$$\frac{\Gamma_k}{\epsilon_L} = \frac{9}{8} \frac{\theta}{D} \left\{ 1 + \frac{\theta}{4D} - \frac{2}{D} \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \right\} \quad (|k\ell| < \pi). \quad (22)$$

Выражения для внутренней энергии (15) для $y \ll 1$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \theta \left(1 + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \right) - \frac{1}{8} \frac{\theta^2}{D} \left(1 + \frac{2}{3} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \right) \quad (23a)$$

x) Введенные в работах^{/2,4/} параметры γ, δ, ϵ для потенциала Морзе (16) равны $\gamma = f = D a^2$, $\delta^2/\gamma^3 = 9/D$, $\epsilon/\gamma^2 = 7/D$.

и теплоемкости $\epsilon_v = (k/N)(\partial E / \partial \theta)_v$ совпадают с первыми членами разложения в ^{/2,4/}. Мы можем, кроме того, получить выражение для натяжения из (19):

$$r(\theta) = \frac{3f}{2a} \frac{\theta}{D} \left[1 + \frac{7\theta}{4D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \left(1 - \frac{\theta}{D} \right) \right]. \quad (24a)$$

Зв. Низкие температуры: $\theta \ll \omega_L$. Подставляя (18) в (14в) и учитывая (11в), получаем следующее уравнение для y

$$\begin{aligned} \lambda^2 y^2 (2e^{2y} - e^{y/2}) \left[1 - \frac{1}{2\lambda} e^{-y} \frac{(4 - e^{-8y/2})^2}{(2 - e^{-8y/2})^{5/2}} \left(1 + \gamma \frac{e^{-2y}}{2 - e^{-8y/2}} \right) \right] = \\ = 1 + 2\gamma \left\{ (2e^{2y} - e^{y/2}) \left[1 - \frac{1}{2\lambda} e^{-y} \frac{(4 - e^{-8y/2})^2}{(2 - e^{-8y/2})^{5/2}} \right] \right\}^{-1}, \end{aligned}$$

где $\lambda = \pi D / \omega_{0L}$, $\gamma = \pi^2 \theta^2 / 3 \omega_{0L}^2 \ll 1$. Как и в случае высоких температур, полученное уравнение имеет решение для $y > 0$ во всей области температуры, что совпадает с результатами псевдогармонического приближения ^{/6/}. Результатам обычной теории возмущений соответствует случай $\lambda = \pi D / \omega_{0L} \gg 1$, когда $y \ll 1$ и имеет вид

$$y \approx \frac{1}{\lambda} \left[1 + \frac{1}{2\lambda} + \gamma \left(1 + \frac{2}{\lambda} \right) \right]. \quad (20в)$$

В этом случае выражение для частоты колебаний (11в)

$$\epsilon_k^2 \approx \omega_{ok}^2 \left\{ 1 - \frac{1}{\lambda} \left[1 + \frac{45}{8} \frac{1}{\lambda} + \gamma \left(1 - \frac{8}{\lambda} \right) \right] \right\} \quad (21в)$$

совпадает с результатами работы /4/. Выражение для внутренней энергии (15) для $\gamma \ll 1$,

$$\frac{1}{N} E \approx -\frac{D}{2} + \frac{\omega_{0L}}{\pi} \left[1 - \frac{5}{8} \frac{1}{\lambda} + \gamma \left(1 - \frac{1}{4\lambda} \right) \right], \quad (23в)$$

и выражение для теплоемкости c_V имеют тот же вид, что в работе /4/, но отличаются от выражений, полученных в /2/ (см. обсуждение в /4/). Выражение для натяжения (19) имеет вид:

$$r(\theta) = \frac{3f}{2a} \frac{1}{\lambda} \left[1 + \frac{7}{4} \frac{1}{\lambda} + \gamma \left(1 + \frac{9}{2} \frac{1}{\lambda} \right) \right]. \quad (24в)$$

Заметим, что натяжение (24в) за счет нулевых колебаний атомов отлично от нуля и при $\theta = 0$.

4. Свойства линейной цепочки при фиксированном натяжении

В случае фиксированного внешнего натяжения $r = \text{const}$ длина L цепочки зависит от температуры системы. Рассмотрим случай достаточно малого натяжения, когда расстояние между атомами l мало отличается от равновесного расстояния l_0 при $r = 0$. Согласно (4), l_0 определяется из условия $\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial l} (l_0) = 0$ и при учете (17) равно

$$l_0 = r_0 + \frac{3}{2a} \gamma. \quad (25)$$

При этом силовые постоянные могут быть записаны в виде

$$f(\theta, l) = f e^{-\gamma} (1 + \rho e^{\gamma})$$

$$g(\theta, \ell) = -3af e^{-y} \left(1 + \frac{7}{9} p e^y\right) \quad (26)$$

и длина цепочки при заданном r равна

$$L = N \ell = N \left(\ell_0 - \frac{r}{f} e^y\right), \quad (27)$$

где $p = 3ar / f$ — малое безразмерное натяжение: $p \ll 1$.

4а. Высокие температуры: $\theta \gg \omega_L$, Самосогласованное уравнение для y получается из выражения (14а) при учете (11а) и (26):

$$\lambda_1 (y - \lambda_1 \eta) \left[1 - \frac{9}{2\lambda_1} e^y + p e^y \left(1 + \frac{2}{\lambda_1} e^y\right)\right] = e^y, \quad (28a)$$

где $\lambda_1 = D/\theta$, $\eta = \omega_{0L}^2 / 24D^2 \ll 1$. Это уравнение имеет действительные решения лишь в области температуры $\theta \leq \theta_0$ — критической температуры. Критическое решение $y_0 = y(\theta_0)$ определяется из совместного решения уравнения (28а) и уравнения, получаемого при дифференцировании (28а) по y . Вычисления дают

$$\theta_0 = \frac{D}{10} (1 + 1,9p - 10\eta), \quad (29a)$$

$$y(\theta \leq \theta_0) = 0,37 + 0,5p + 10\eta - 0,7 \sqrt{1 - \frac{\theta}{\theta_0}}. \quad (30a)$$

Частота колебаний ϵ_k при $\theta \leq \theta_0$

$$\epsilon_k^2 \approx \frac{\omega_{0k}^2}{4} \left[1 + 0,4p - 10\eta + 1,8 \sqrt{1 - \frac{\theta}{\theta_0}} + 2,3 \left(1 - \frac{\theta}{\theta_0}\right)\right], \quad (31a)$$

т.е. при $\theta > \theta_0$ становится комплексной, что означает неустойчивость системы. Подобный же вывод был сделан в псевдогармоническом приближении /6/.

Затухание колебаний, согласно (12а), вблизи критической температуры становится значительным

$$\frac{\Gamma_k}{\epsilon_L} \approx \frac{9}{8} \frac{\theta}{D} e^y \left[1 - \frac{9\theta}{2D} e^y \right]^{-\frac{1}{2}} \approx 0,27, \quad (|k \ell| < \pi), \quad (32)$$

где $\epsilon_L = \epsilon(k \ell = \pi)$ из (31а).

Длина цепочки, согласно (25), (27), и внутренняя энергия (15) при $\theta \leq \theta_0$.

$$\frac{1}{N} E \approx -\frac{D}{2} + \theta_0 \left[1,6(1-p) + \frac{1}{48} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta_0^2} - 1,4 \sqrt{1 - \frac{\theta}{\theta_0}} - 0,8 \left(1 - \frac{\theta}{\theta_0} \right) \right] \quad (33a)$$

остаются конечными. Но коэффициент линейного расширения

$$\alpha = \frac{k}{L} \frac{\partial L}{\partial \theta} \approx \frac{k}{\ell} \frac{3}{2aD} \frac{3}{\sqrt{1 - \theta/\theta_0}} \quad (34a)$$

и теплоемкость при постоянном давлении

$$c_P = \frac{k}{N} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} (E + rL) \right]_r \approx k 0,8 \left(1 + \frac{0,9}{\sqrt{1 - \theta/\theta_0}} \right) \quad (35a)$$

неограниченно возрастают при $\theta \rightarrow \theta_0$.

В области температуры $\theta \ll D$ решение уравнения (28а) для $y \ll 1$ имеет вид

$$y \approx \frac{\theta}{D} \left[1 + \frac{11}{2} \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \left(1 + \frac{\theta}{D} \right)^{-p} \right]. \quad (36a)$$

В этом случае перенормированная частота, затухание и внутренняя энергия равны

$$\epsilon_k^2 = \omega_{0k}^2 \left[1 + p - \frac{\theta}{D} \left(\frac{11}{2} + 5 \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} - 3p \right) \right] \quad (37a)$$

$$\frac{\Gamma_k}{\epsilon_L} = \frac{9}{8} \frac{\theta}{D} \left[1 - \frac{13}{9} p + \frac{13}{4} \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\theta}{D} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} \right] \ll (k \ell \ll \pi), \quad (38a)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \theta \left[1 + \frac{\theta}{D} + \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} - \frac{1}{2} p \left(1 + \frac{26}{3} \frac{\theta}{D} \right) \right]. \quad (39a)$$

Заметим, что при $\vartheta = \theta_0$ эти выражения дают значения, близкие к значениям, полученным выше для критической области. Выражение для теплоемкости

$$c_p \approx k \left(1 - \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} + 2 \frac{\theta}{D} - \frac{19}{6} p \frac{\theta}{D} \right), \quad (40a)$$

коэффициента линейного расширения

$$\alpha = \frac{k}{\ell} \frac{3}{2aD} \left(1 + 11 \frac{\theta}{D} - \frac{1}{24} \frac{\omega_{0L}^2}{\theta^2} - \frac{11}{9} p \right), \quad (41a)$$

а также среднего квадрата смещения $\frac{u^2}{a^2} = \gamma / a^2$ (36a) совпадают с первыми членами разложения, полученного в работе /5/.

4в. Низкие температуры: $\theta \ll \omega_L$. Самосогла́сованное уравнение для y получается из выражения (14в) при учете выражений (26), (11в):

$$\lambda^2 y^2 \left(1 - \frac{9}{2\lambda} e^{y/2}\right) = e^y \left\{ 1 + \lambda^2 y^2 \left[\gamma \left(2 + \frac{9}{2\lambda} e^{y/2}\right) - \rho \left(1 - \frac{1}{4\lambda} e^{y/2}\right) \right] \right\}, \quad (28в)$$

где $\lambda = \pi D / \omega_{0L}$ — безразмерный параметр связи атомов в цепочке, $\gamma = \pi^2 \theta^2 / 3\omega_{0L}^2 \ll 1$. Это уравнение имеет действительные решения для y в области $\lambda > \lambda_0$ и $\theta < \theta_0$. Критические параметры определяются как и в случае высоких температур и имеют значения

$$\theta_0 = \frac{\omega_{0L}}{1,6\pi} \sqrt{\lambda - \lambda_0}, \quad \lambda_0 \approx 6,8(1 - 0,4\rho). \quad (29в)$$

Решение при $\theta \leq \theta_0$ имеет вид:

$$y = 0,5 \left\{ 1 + 2,5\rho - (\lambda - \lambda_0) - 1,6 \sqrt{(\lambda - \lambda_0) \left(1 - \frac{\theta^2}{\theta_0^2}\right)} [1 - (\lambda - \lambda_0)] + \right. \\ \left. + 2,6 (\lambda - \lambda_0) \left(1 - \frac{\theta^2}{\theta_0^2}\right) \right\}. \quad (30в)$$

Частота колебаний ϵ_k вблизи критической точки имеет вид

$$\epsilon_k^2 \approx (0,3 \omega_{\bullet k})^2 \left\{ 1 + 2,7\rho + 1,3(\lambda - \lambda_0) + \right. \\ \left. + 3 \sqrt{(\lambda - \lambda_0) \left(1 - \frac{\theta^2}{\theta_0^2}\right)} - 2(\lambda - \lambda_0) \left(1 - \frac{\theta^2}{\theta_0^2}\right) \right\}, \quad (31в)$$

т.е. при $\lambda < \lambda_0$ или $\theta > \theta_0$ становится комплексной, что означает неустойчивость системы. При этом внутренняя энергия

$$\frac{1}{N} E \approx -\frac{D}{2} + \frac{\omega_{0L}}{\pi} \left\{ 0,9 + 1,7p - 0,4(\lambda - \lambda_0) - \right. \\ \left. - 0,7 \left[1 + 1,9(\lambda - \lambda_0) \right] \sqrt{(\lambda - \lambda_0) \left(1 - \frac{\theta^2}{\theta_0^2} \right)} - 0,4(\lambda - \lambda_0) \left(1 - \frac{\theta^2}{\theta_0^2} \right) \right\} \quad (33B)$$

и длина цепочки (27) при $\theta \leq \theta_0$ остаются конечными. Коэффициент линейного расширения

$$\alpha \approx \frac{k}{a \ell} \frac{\theta}{\omega_{0L}^2} \frac{3\pi^2}{\sqrt{(\lambda - \lambda_0) \left(1 - \frac{\theta^2}{\theta_0^2} \right)}} \quad (34B)$$

и теплоемкость

$$c_p \approx k \frac{2\pi}{3} \frac{3\theta}{\omega_{0L}} \left(1 + \frac{0,9}{\sqrt{(\lambda - \lambda_0) \left(1 - \frac{\theta^2}{\theta_0^2} \right)}} \right) \quad (35B)$$

неограниченно возрастают при $\lambda \rightarrow \lambda_0$ или $\theta \rightarrow \theta_0$.

При $\lambda \gg 1$ $y \ll 1$ и решение уравнения (28B) имеет вид

$$y \approx \frac{1}{\lambda} \left\{ 1 + \frac{11}{4\lambda} + y \left(1 + \frac{11}{\lambda} \right) - \frac{p}{2} \left(1 + \frac{17}{2\lambda} \right) \right\}. \quad (36B)$$

Полученные с помощью этого решения перенормированная частота и внутренняя энергия имеют вид:

$$\epsilon_k^2 \approx \omega_{ok}^2 \left\{ 1 + p - \frac{11}{2\lambda} \left(1 + y - \frac{1}{22} p \right) \right\} \quad (37B)$$

$$\frac{1}{N} E = -\frac{D}{2} + \frac{\omega_{0L}}{\pi} \left[1 - \frac{7}{4\lambda} + \gamma \left(1 + \frac{2}{\lambda} \right) - p \frac{11}{24\lambda} \right]. \quad (39B)$$

Заметим, что эти выражения при $\theta = \theta_0$ хуже согласуются с критическими значениями, чем в случае высоких температур, т.к. в случае низких температур $\gamma_0 \approx 0,5$ не мало. Теплоемкость и коэффициент линейного расширения равны

$$c_p \approx k \frac{2\pi}{3} \frac{\theta}{\omega_{0L}} \left(1 + \frac{2}{\lambda} \right), \quad (40B)$$

$$\alpha \approx \frac{k}{a\ell} \frac{\theta}{\omega_{0L}} \frac{\pi}{D} \left(1 + \frac{11}{\lambda} \right). \quad (41B)$$

Выражения (36B)-(41B) могут быть использованы для сравнения с результатами обычной теории возмущений при фиксированном натяжении в области низких температур.

Заметим, в заключение этого раздела, что относительное смещение атомов в критической точке как и в случае высоких, так и в случае низких температур оказывается малым:

$$\frac{\sqrt{u_0^2}}{\ell_0} = \frac{\sqrt{\gamma_0}}{a\ell_0} \approx 0,2.$$

5. Обсуждение

Таким образом, развитая в ^{1/} теория ангармонического кристалла позволяет относительно просто исследовать свойства одномерной ре-

шетки в широком интервале температуры с учетом внешнего давления. Полученные при этом результаты с точностью до численных коэффициентов совпадают с выводами псевдогармонического приближения ^{/6/}. При фиксированной длине цепочка устойчива, и в случае малого ангармонизма результаты расчета хорошо согласуются с результатами обычной теории возмущения ^{/2-4/}. При фиксированном натяжении цепочка неустойчива при достаточно высокой температуре $\theta > \theta_0 \approx D/10$ (см. (29а)) или достаточно большой энергии нулевых колебаний, когда безразмерный параметр связи становится меньше критического $\lambda < \lambda_0 \approx 6,8$ (см. (29в)). В псевдогармоническом приближении было получено: $\theta_0^{(ph)} \approx D/e > \theta_0$ и $\lambda_0^{(ph)} \approx e/2 < \lambda_0$ ^{/6/}, т.е. учет процессов распада фононов приводит к уменьшению критической температуры и увеличению критического значения безразмерного параметра связи.

Интересно отметить, что выражение для критической температуры (29а) с учетом (30а) может быть записано в виде соотношения

$$\omega_{0L}^2 \approx \frac{15}{u_0^2 / \ell^2} \frac{\theta_0}{M \ell^2} \approx 3,7 \cdot 10^2 \frac{\theta_0}{M \ell^2}, \quad (42)$$

которое имеет вид критерия Линдемана для температуры плавления ^{/7/}. При этом θ_0 оказывается примерно в 1,5 раза выше температуры плавления для ряда кристаллов (см. ^{/7/}). Это, по-видимому, указывает на то, что область неустойчивости ангармонических кристаллов лежит весьма близко к точке плавления. Поэтому критическую температуру (29а) или (29в) можно рассматривать как верхнюю оценку для температуры плавления. Более строгие выводы, однако, можно будет сделать, рассмотрев трехмерную решетку. Обобщение на трехмерный случай предполагается рассмотреть в следующей работе.

В заключение нам хотелось бы поблагодарить Г.Конвента за обсуждения.

Л и т е р а т у р а

1. Н.М.Плакида, Т.Шиклош. Препринт ОИЯИ Р4-4032, Дубна 1968.
2. A.A. Maradudin, P.A. Flinn, R.A. Coldwell-Horsfall. *Ann. Phys.*, (N.Y.) 15, 337 (1961).
3. Г.Лейбфрид, В.Людвиг. Теория ангармонических эффектов в кристаллах, ИЛ, Москва, 1963.
4. K.N. Pathak. *Phys. Rev.*, 139, A1569 (1965).
5. J.S. Dugdale, D.K. Mac Donald. *Phys. Rev.*, 96, 57 (1954).
6. Н.М.Плакида, Т.Шиклош. Препринт ОИЯИ Р4-3706, Дубна 1968; *Phys. Lett.*, 26A, 342 (1968).
7. Г.Лейбфрид. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов, ФМ, ИМ-Л., 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
8 августа 1968 года.