

6/11-70

С 326

Ш-517

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 4921



Т. Шиклош

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ ЛИНЕЙНОЙ ЦЕПОЧКИ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1970

P4 - 4921

Т. Шиклош

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ ЛИНЕЙНОЙ ЦЕПочки

8246/2 чр.

Областни институт
за научно изследване
в Београд

1. В в е д е н и е

В последнее время развита теория ангармонических кристаллов, позволяющая самосогласованным образом учесть вклад от всех ангармонических членов в низших порядках теории возмущений (см. /1-3/ и литературу, цитированную в/3/). При этом оказалось возможным исследовать область устойчивости ангармонического кристалла. В работах/4-6/ исследована простейшая модель - линейная цепочка с взаимодействием ближайших соседей, как в случае фиксированной длины, так и при постоянном внешнем натяжении. Было показано, что в случае "малого натяжения" цепочка неустойчива при достаточно высокой температуре или при достаточно большой энергии нулевых колебаний. При этом оказалось, что затухание самосогласованных фононов не столь велико вблизи температуры неустойчивости цепочки/4/ и для качественных исследований его можно не учитывать, т.е. ограничиться только псевдогармоническим приближением. Это позволяет значительно упростить расчёты и исследовать свойства ангармонической цепочки в широком интервале температур и значений параметров связи атомов цепочки, что было проделано в работе/6/ в случае достаточно малого натяжения.

В настоящей работе приводятся результаты исследования зависимости температуры неустойчивости линейной цепочки от произвольного внешнего натяжения в псевдогармоническом приближении. В разделе 2 получена самосогласованная система уравнений в псевдогармоническом приближении. В разделе 3 вводятся понятия температуры неустойчивости и критической температуры и вычисляются эти величины. В разделе 4 обсуждаются полученные результаты.

2. Самосогласованная система уравнений в псевдогармоническом приближении

Рассмотрим линейную цепочку длиной L из $N+1$ одинаковых атомов массой M при учёте взаимодействия только ближайших соседей, которое будем описывать потенциалом $\Phi(R_n - R_{n-1})$. Введем среднее расстояние между ближайшими атомами ℓ и их относительное смещение согласно определению:

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

Равновесное расстояние ℓ между атомами определяется из условий равновесия цепочки при заданном внешнем натяжении P , согласно которым средняя сила, действующая на атом в положении равновесия, равна нулю:

$$P = -\frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial}{\partial R_n} \Phi(R_n - R_{n-1}) \right\rangle. \quad (2)$$

Применяя развитый в работе /2/ метод к исследованию линейной цепочки, в работе /6/ получили самосогласованную систему уравнений, определяющую свойства линейной цепочки в псевдогармоническом приближении. Был определен квадрат относительного смещения

$$u^{-2} = \langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle = \frac{1}{Nf} \sum_k \frac{\omega_{0k}^2}{2\omega_k} \coth \frac{\omega_k}{2\theta} \quad (3)$$

и перенормированная частота колебаний

$$\omega_k^2 = \frac{4f(\theta, \ell)}{M} \sin^2 \frac{k\ell}{2} = \frac{f(\theta, \ell)}{f} \omega_{0k}^2 \equiv a^2 \omega_{0k}^2, \quad (4)$$

где ω_{0k} - гармоническая частота колебаний цепочки, f - гармоническая силовая постоянная, $\theta = kT$. Псевдогармоническая силовая постоянная $f(\theta, \ell)$, согласно /6/, имеет вид:

$$f(\theta, \ell) = \frac{1}{2} \tilde{\Phi}''(\ell). \quad (5)$$

где мы ввели самосогласованный потенциал взаимодействия между ближайшими соседями:

$$\tilde{\Phi}(\ell) = \langle \Phi(R_n - R_{n-1}) \rangle = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} \left(\frac{\overline{u^2}}{2} \right)^s \Phi^{(2s)}(\ell). \quad (6)$$

Помимо температуры θ состояние цепочки определяется еще ее длиной $L = N\ell$ или внешним натяжением P . Связь этих параметров (термическое уравнение состояния цепочки), согласно (2), (6), определяется условием:

$$P = - \frac{1}{2} \tilde{\Phi}'(\ell). \quad (7)$$

Калорическое уравнение состояния определяется внутренней энергией цепочки, которая в нашем приближении равна/6/:

$$\frac{1}{N} E = \frac{1}{2} \tilde{\Phi}(\ell) + \frac{1}{2} f(\theta, \ell) \overline{u^2}. \quad (8)$$

Как видно, уравнения (3)-(8) образуют самосогласованную систему уравнений, определяющую свойства линейной цепочки в псевдогармоническом приближении. Полученная система уравнений определяется видом самосогласованного потенциала, который может быть вычислен, если задан явный вид потенциала взаимодействия $\Phi(R)$. В качестве модельного потенциала выберем потенциал Морза:

$$\Phi(R) = D \{ [e^{-a(R-r_0)} - 1]^2 - 1 \}, \quad (9)$$

где r_0 - среднее расстояние между атомами в гармоническом приближении $\Phi'(r_0) = 0$; D - глубина потенциальной ямы $\Phi(r_0) = -D$. Силовая постоянная в гармоническом приближении равна $f = (1/2)\Phi''(r_0) = Da^2$. Тогда, используя (6), (9), получаем следующее выражение для самосогласованного потенциала:

$$\tilde{\Phi}(\ell, y) = D \{ e^{-2ay} - 2e^{-a(\ell-r_0)} e^{y/2} \}, \quad (10)$$

где $y = a^2 \overline{u^2}$.

Рассмотрим случай постоянного внешнего натяжения $P = \text{const}$, но в отличие от работы/5,6/ не будем предполагать малости P . Если внешнее натяжение постоянно, то длина L цепочки зависит от температуры системы. Среднее расстояние между атомами удобно записать в виде:

$$l(\theta) = l_0 + \delta l = r_0 \left(1 + \frac{3}{2ar_0} y + \frac{\delta l}{r_0} \right), \quad (11)$$

где l_0 - равновесное расстояние между атомами при $P = 0$, которое определяется из уравнений (7), (10).

Выберем далее параметр $ar_0 = 6$ так, чтобы потенциал Морза (9) мало отличался от потенциала Ленарда-Джонса (12-6) в области $|l - r_0| \ll \ll r_0/1/$. Введем для удобства приведенного натяжения $P^* = P(r_0/D)$. (Заметим, что в работе/4-6/ использовано безразмерное натяжение $p = P^*/2$).

Тогда соотношение (7) с учётом (10), (11) принимает вид:

$$P^* = 6 e^{-6 \frac{\delta l}{r_0}} e^y \left\{ e^{-6 \frac{\delta l}{r_0}} - 1 \right\}. \quad (12)$$

При помощи (11), (12) самосогласованный потенциал (10) и псевдогармоническая силовая постоянная (4), (5) могут быть записаны в виде:

$$\Phi(l) = -D e^{-6 \frac{\delta l}{r_0}} e^{-y} \left\{ 2 - e^{-6 \frac{\delta l}{r_0}} \right\} = \quad (13)$$

$$= -\frac{D}{2} e^{-y} \left\{ 1 - \frac{1}{3} P^* e^y + \sqrt{1 + \frac{2}{3} P^* e^y} \right\}$$

$$\alpha^2 = \frac{f(\theta, l)}{f} = e^{-6 \frac{\delta l}{r_0}} e^{-y} \left\{ 2 e^{-6 \frac{\delta l}{r_0}} - 1 \right\} = \quad (14)$$

$$= \frac{1}{2} e^{-y} \left\{ 1 + \frac{2}{3} P^* e^y + \sqrt{1 + \frac{2}{3} P^* e^y} \right\}.$$

Разрешая последнее уравнение относительно y , получим:

$$y = \ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3}\right)^2}. \quad (15)$$

При этом выражение для среднего расстояния между атомами (11) может быть записано в виде:

$$\begin{aligned} l(\theta, y) &= r_0 \left\{ 1 + \frac{1}{4} y - \frac{1}{6} \ln \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{2}{3} P^* e^y} \right) \right\} = \\ &= r_0 \left\{ 1 + \frac{1}{12} \ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3}\right)^4} \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

Перейдем далее в соотношении (3) от суммирования по k к интегрированию по $\phi = (k\ell/2)$. Учитывая (15), запишем (3) в виде уравнения для α :

$$\lambda \alpha \ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3}\right)^2} = \int_0^{\pi/2} d\phi \sin \phi \coth \frac{\alpha \sin \phi}{2r}, \quad (17)$$

где мы ввели $\omega_{0L} = (4f/M)^{1/2}$ - максимальную частоту колебаний цепочки в гармоническом приближении, $\lambda = (\pi D / \omega_{0L})$ - безразмерный параметр связи атомов в цепочке, $r = (\theta / \omega_{0L})$ - безразмерную температуру.

Следует отметить, что уравнение самосогласования (17) определяет свойства линейной цепочки, так как при заданном λ, r и P^* оно позволяет найти перенормировку частоты α , которая, согласно формулам (8), (13), (15), (16), определяет внутреннюю энергию и длину цепочки. Легко убедиться в том, что для $P^* \ll 1$ все полученные здесь формулы переходят в соответствующие выражения работы/6/.

3. Температура неустойчивости и критическая температура

Исследуем теперь уравнение самосогласования (17). Как было показано в работах^{5,6/}, для случая малого натяжения, $P^* \ll 1$ решения уравнения (17) при определенных значениях температуры становятся комплексными, что приводит к комплексной частоте, то есть неустойчивости решетки. В работах^{5,6/} были получены выражения для температуры неустойчивости^{x/} в предельных случаях высоких ($\tau \gg 1$) и низких ($\tau \ll 1$) температур:

$$\tau_s = \frac{\lambda}{\pi e} \left\{ 1 + \frac{e}{2} P^* - \frac{e}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 \right\} \quad (\tau \gg 1, P^* \ll 1), \quad (18)$$

$$\tau_s = \frac{1}{\pi e} \sqrt{\frac{6}{e} (\lambda - \lambda_0)}; \quad \lambda_0 = \frac{e}{2} \left[1 - \left(\frac{e}{2} \right)^2 P^* \right] \quad (\tau \ll 1, P^* \ll 1) \quad (19)$$

Исследовалась также зависимость температуры неустойчивости от параметра связи λ в случае $P^* = 0$ для всего интервала температур.

Проанализируем теперь уравнение (17) в пределе высоких температур ($\tau \gg 1$) для произвольного значения P^* . Нетрудно убедиться в том, что в этом случае уравнение (17) с учётом (15) может быть записано в виде:

$$F(y) = f_1(y) - f_2(y) = \left(1 - \frac{P^*}{3T^*} y \right)^2 e^y - \frac{1}{T^*} y \left(1 - \frac{P^*}{6T^*} y \right) = 0, \quad (20)$$

где $T^* = (\theta/D) = \tau(\pi/\lambda)$ - приведенная температура. Графическое решение уравнения (20) показывает, что в области $P^* \ll T^*$ и $T^* \ll 1$ уравнение имеет 4 действительных решения $0 < y_1 < y_2 < y_3 < y_4$, из которых физический смысл имеет наименьшее. С ростом температуры T^* решения y_1 и y_2 сближаются и при определенном значении $T^* = T_s^*(P^*)$ они совпадают:

^{x/} В работе^{4-6/} температура неустойчивости τ_s называлась критической температурой и обозначалась τ_c .

$$y_1(T_s^*) = y_2(T_s^*).$$

Это условие определяет максимальную температуру, при которой цепочка может быть устойчива, так как при $T^* > T_s^*$ решения y_1 и y_2 становятся комплексно сопряженными, что приводит к комплексно сопряженным значениям перенормированной частоты. Следовательно, температура неустойчивости, определяемая этим условием, находится из решения системы уравнений:

$$F(y) = 0; \quad F'(y) = 0.$$

Однако в случае не очень малых давлений $P^* \approx T^*$ картина может качественно измениться, а именно, в этом случае третье решение y_3 , лежащее близко к y_1 и y_2 , при некоторой температуре $T_c^*(P_c^*)$ (или давлении $P_c^*(T_c^*)$) может совпасть с $y_1 = y_2$:

$$y_1(T_c^*) = y_2(T_c^*) = y_3(T_c^*).$$

В этом случае при температуре $T^* > T_c^*$ ($P^* > P_c^*$) уравнение (20) будет иметь только действительные решения, т.е. цепочка всегда будет устойчивой. Температуру $T_c^*(P_c^*)$ назовем критической температурой, а P_c^* — критическим давлением. Как видно, критическая температура, определяемая совпадением трех корней $y_1 = y_2 = y_3$ уравнения (20), может быть определена из решения системы уравнений:

$$F(y) = 0; \quad F'(y) = 0; \quad F''(y) = 0.$$

Таким образом, качественный анализ поведения решений уравнения (20) указывает на удобный метод определения температуры неустойчивости τ_s и критической температуры τ_c . Температура неустойчивости определяется совместным решением уравнения (20) и его производной:

$$\lambda \left\{ \frac{2a^4}{\left(a^2 - \frac{P^*}{6}\right)\left(a^2 - \frac{P^*}{3}\right)} - \ln \frac{a^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(a^2 - \frac{P^*}{3}\right)^2} \right\} = \frac{1}{2\tau_0} \int_0^{\pi/2} d\phi \sin^2 \phi \frac{1}{\text{sh}^2 \frac{a \sin \phi}{2\tau}}, \quad (21)$$

а критическая температура – совместным решением (20) (21) и второй производной уравнения (20):

$$\lambda \frac{a^3 \left\{ a^4 - \frac{3}{2} a^2 P^* + \frac{5}{18} (P^*)^2 \right\}}{\left(a^2 - \frac{P^*}{6} \right)^2 \left(a^2 - \frac{P^*}{3} \right)^2} = - \frac{1}{(2r)^2} \int_0^{\pi/2} d\phi \sin^3 \phi \frac{\operatorname{ch} \frac{a \sin \phi}{2r}}{\operatorname{sh}^3 \frac{a \sin \phi}{2r}}. \quad (22)$$

Решение указанных систем уравнений было проведено на ЭВМ и результаты представлены на рис. 1–4. На рис. 1 представлена зависимость температуры неустойчивости $\tau_s = (\theta_s / \omega_{0L})$ от параметра связи атомов λ для различных значений приведенного натяжения P^* , на рис. 2 – зависимость температуры неустойчивости от P^* для некоторых значений λ . На рис. 3 приведена длина цепочки ℓ_s при температуре неустойчивости в зависимости от параметра λ , а на рис. 4 – в зависимости от натяжения P^* . На всех рисунках критические кривые указаны пунктиром.

Отметим особенность в поведении $\tau_s(\lambda)$ и $\ell_s(\lambda)$ при малых значениях λ . При $P^* > 0$ предельное значение параметра связи λ , согласно (19), уменьшается, что приводит к смещению кривых в область меньших значений λ , которые, однако, ограничиваются кривой критических точек, возникающих также при $P^* > 0$.

Нетрудно получить асимптотическое выражение для критической температуры для высоких температур $\tau \gg 1$. В этом случае уравнение (17), (21), (22):

$$a^2 \ln \frac{a^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(a^2 - \frac{P^*}{3} \right)^2} = T^* + \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 \frac{a^2}{T^*} \quad (17a)$$

$$\ln \frac{a^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(a^2 - \frac{P^*}{3} \right)^2} - \frac{a^4}{\left(a^2 - \frac{P^*}{6} \right) \left(a^2 - \frac{P^*}{3} \right)} = \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 \frac{1}{T^*}. \quad (21a)$$

$$a^4 - a^2 P^* + \frac{(P^*)^2}{6} = 0. \quad (22a)$$

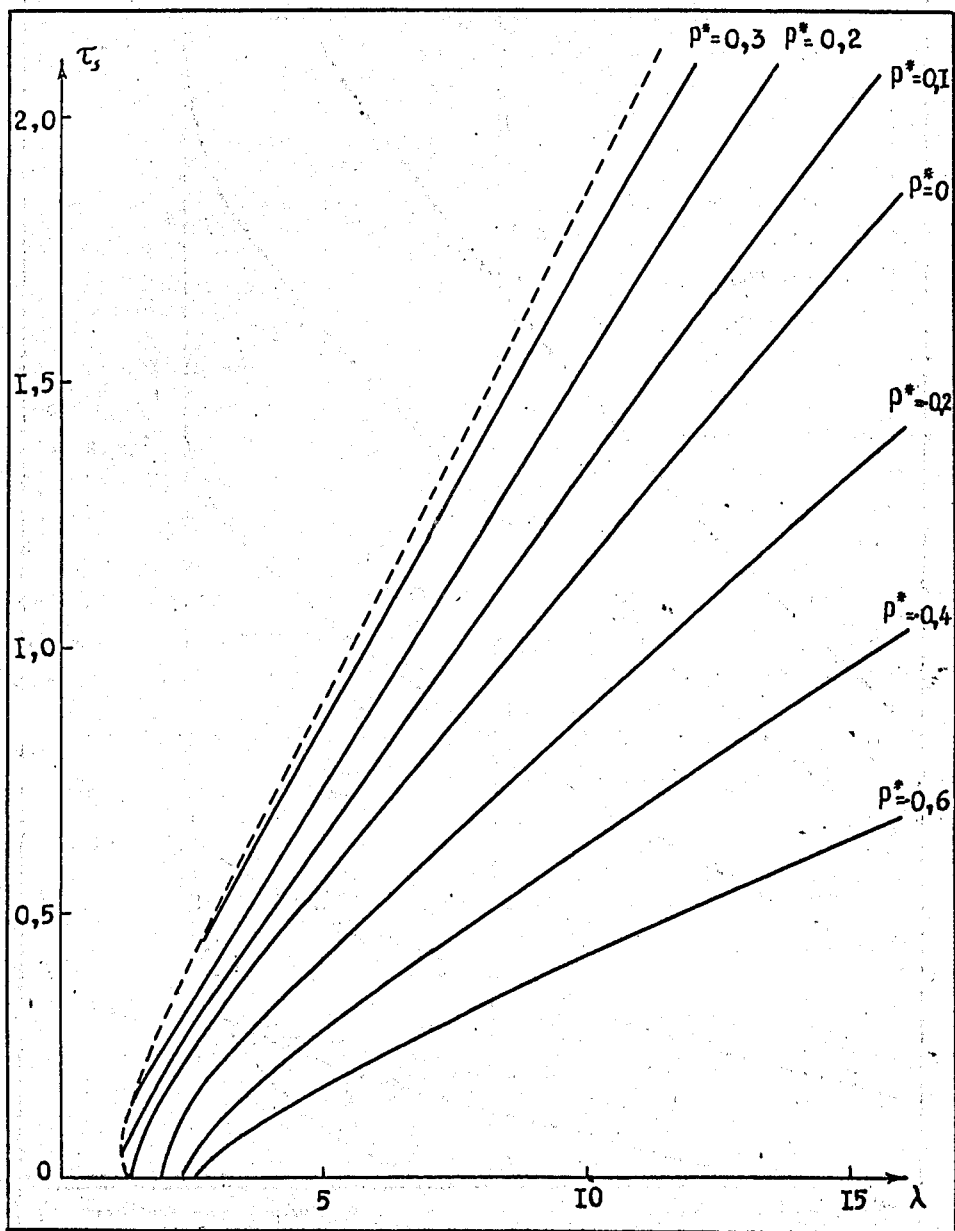


Рис. 1. Зависимость температуры неустойчивости $\tau_s = (\theta_s / \omega_{0L})$ от параметра связи атомов λ .

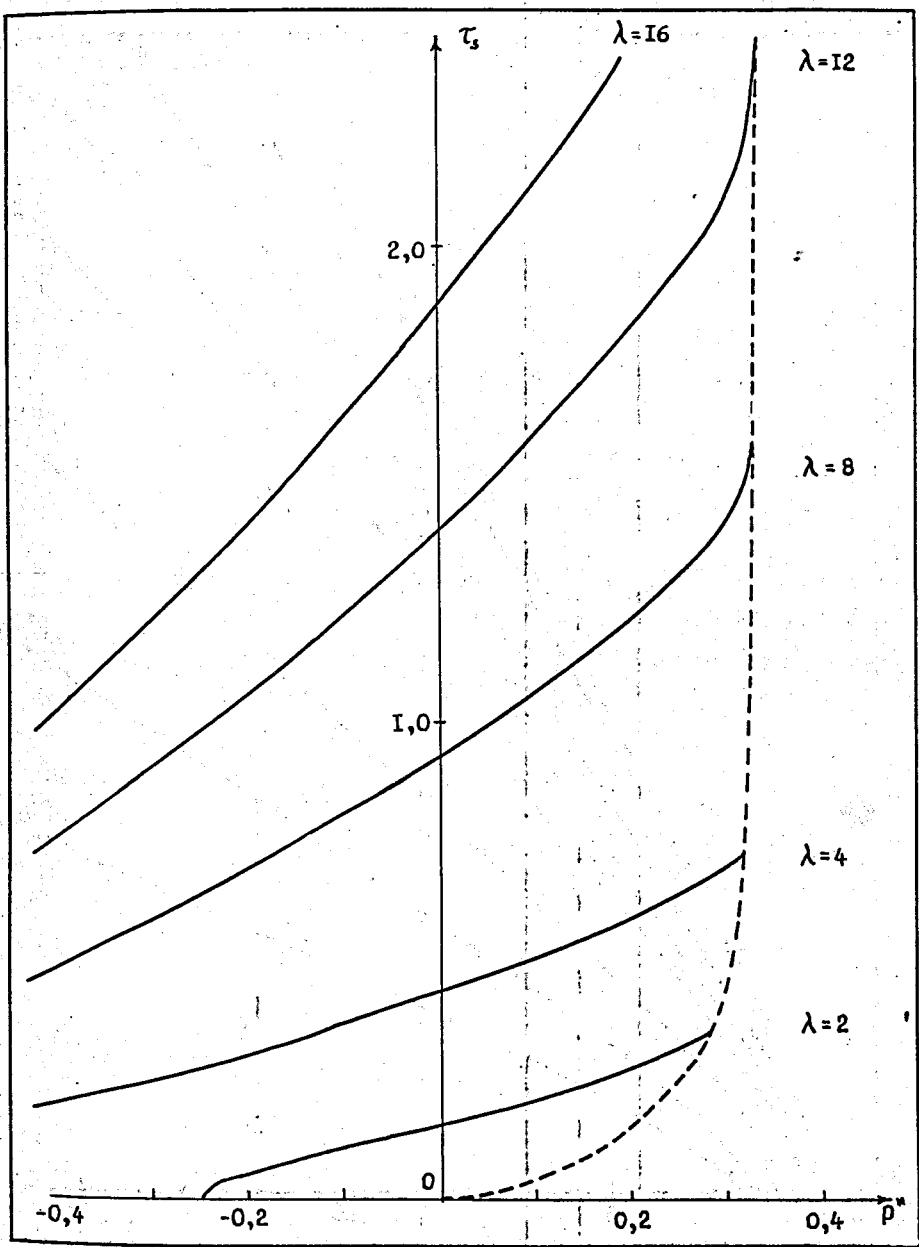


Рис. 2. Зависимость температуры неустойчивости τ_s от приведенного натяжения p^* .

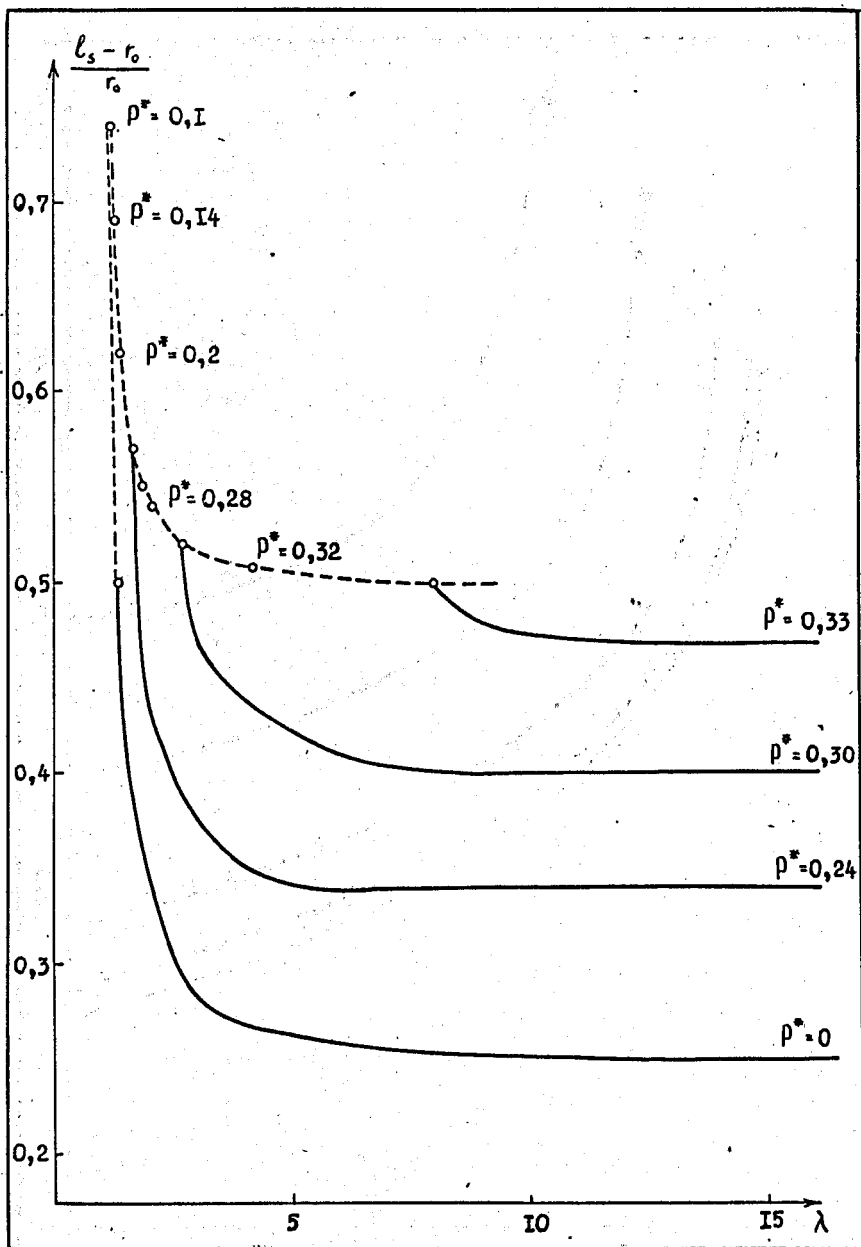


Рис. 3. Длина цепочки l_s при температуре неустойчивости r_0 в зависимости от параметра связи λ .

Из (17а) и (21а) определяем температуру неустойчивости:

$$T_s^* = \frac{a_s^6}{(a_s^2 - \frac{P_c^*}{6})(a_s^2 - \frac{P_c^*}{3})} \quad (23)$$

Решая (22а), получим выражение для критического значения коэффициента перенормировки частоты:

$$a_c^2 = \frac{P_c^*}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \quad (24)$$

Учитывая теперь (24), из (17) и (23) приближенно находим выражения для критического натяжения и критической температуры:

$$P_c^* \approx 0,334 \left\{ 1 - \sqrt{3} \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 \right\}, \quad (25)$$

$$T_c^* = \sqrt{3} P_c^* \approx 0,576 \left\{ 1 - \sqrt{3} \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 \right\} \quad (26)$$

С помощью (24), (25), используя (15), (16), (13), (8), получим:

$$a_c^2 = 0,236 \left\{ 1 - \sqrt{3} \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 \right\},$$

$$y_c = \ln \frac{3}{P_c^*} \approx 2,2 \left\{ 1 + 0,785 \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 \right\}, \quad (27)$$

$$\frac{\ell_c - r_0}{r_0} \approx 0,5 \left\{ 1 + 0,85 \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 \right\},$$

$$\frac{\hat{\Phi}_c(\ell_c)}{D} = - \frac{1}{2} \frac{\sqrt{3}}{3} P_c^* \approx -0,1 \left\{ 1 - \sqrt{3} \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 \right\},$$

$$\frac{1}{N} \frac{E}{D} = \frac{1}{4} P_c^* \left\{ \left(1 + \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \ln \frac{3}{P_c^*} - \frac{\sqrt{3}}{3} \right\} \approx 0,25 \left\{ 1 - 0,8 \frac{1}{24} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 \right\}.$$

Следует заметить, что результаты расчётов на ЭВМ очень хорошо согласуются с асимптотическими формулами (25)–(27), начиная с $\lambda \geq 2$.

Отметим при этом, что уравнение (22а) не может быть удовлетворено для $P^* < 0$, следовательно, в случае $P^* < 0$ нет положительной критической температуры.

4. Обсуждение

В настоящей работе была исследована область устойчивости линейной цепочки при произвольном внешнем натяжении P в широкой области температуры. При этом в отличие от работы/6/ было обнаружено, что явление неустойчивости пропадает при достижении некоторого критического натяжения P_c^* или температуры T_c (см. (25), (26)). Критическое значение P_c^* , однако, мало и поэтому свойства линейной цепочки достаточно хорошо описываются формулами, полученными ранее для случая малого натяжения/6/. Учёт затухания колебаний решетки, согласно/4/, не должен, по-видимому, внести качественных изменений в полученные результаты.

Сделаем несколько замечаний о физическом смысле температуры неустойчивости T_s и критической температуры T_c . Хорошо известно, что в линейной цепочке флуктуации абсолютных положений атомов велики, относительные смещения соседних атомов малы $[\langle (u_n - u_{n+1})^2 \rangle]^{1/2} / l \ll 1$, что свидетельствует о наличии ближнего порядка в линейной цепочке, и в этом смысле линейная цепочка является системой связанных атомов, в которой возможно распространение коллективных возбуждений – фононов/7/. С ростом температуры происходит увеличение числа фононов, т.е. увеличение амплитуды относительных смещений соседних атомов, и при температурах $T > T_s$ в уравнении самосогласования (17) возникают комплексно-сопряженные решения, которые приводят к комплексно-сопряженным значениям частоты колебаний. При этом относительное смещение соседних атомов неограниченно возрастает со временем $t: [\langle (u_n - u_{n+1})^2 \rangle]^{1/2} \approx e^{\gamma t}$, $\gamma > 0$, то есть линейная цепочка становится неустойчивой относительно коллективных возбуждений, которые разрушают ближний порядок.

На основании этого мы можем рассматривать внешнее натяжение P как некоторое внешнее поле, при значениях которого $P > P_c$ обеспечивается ограниченное движение атомов цепочки и тем самым ближний порядок в расположении атомов.

Отметим также, что устойчивость цепочки в случае фиксированной длины, полученная в [6], основана на том факте, что внешнее натяжение, необходимое для удержания постоянной длины, быстро растет с температурой и становится больше P_c при $T \approx T_s$. Обнаруженная в работе [1] неустойчивость решетки при фиксированном объеме связана, по-видимому, с учётом возможности обмена атомов между соседними узлами решетки, который нами не принимается во внимание. Для последовательного рассмотрения этого вопроса необходимо учесть наличие твердой сердцевинки в межатомном потенциале.

В заключение мне бы хотелось поблагодарить Н.М.Плакиду за ценное обсуждение и В.Б.Приезжева за помощь при проведении численных расчётов.

Л и т е р а т у р а

1. Ph.F. Choquard. *The Anharmonic Crystals*, Benjamin, New York, 1967.
2. N.M. Plakida, T. Siklós. *Acta Phys. Hung.* 25, 17 (1968).
3. N.M. Plakida, T. Siklós. *phys. stat. sol.* 33 103 (1969).
4. N.M. Plakida, T. Siklós. *phys. stat. sol.* 33 113 (1969).
5. N.M. Plakida, T. Siklós. *Phys. Lett.* 26A, 342 (1968).
6. N.M. Plakida, T. Siklós. *Acta Phys. Hung.* 26, 387 (1969).
7. G. Leibfried. *Handbuch der Physik, Band VII, Teil 2*. Springer Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg, 1955.

(Имеется перевод: Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов ГИФМЛ, Москва-Ленинград, 1963).

Рукопись поступила в издательский отдел

6 февраля 1970 года.