

С 326

Ш-571

2/III-71

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4-5831

2572/2-71

5831



Т. Шиклош, В.Л. Аксенов

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ ЛИНЕЙНОЙ ЦЕПОЧКИ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1971

P4-5831

Т. Шиклош, В.Л. Аксенов

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ ЛИНЕЙНОЙ ЦЕПОЧКИ

1. В в е д е н и е

Развитый в работе ^{/1/} метод, позволяющий самосогласованным образом учесть вклад от всех ангармонических членов в низших порядках теории возмущений, был применен в ^{/2/} для исследования свойств ангармонической линейной цепочки с взаимодействием ближайших соседей при малом внешнем натяжении. В случае произвольного внешнего натяжения ангармоническая цепочка рассматривалась в псевдогармоническом приближении в ^{/3/}.

В настоящей работе мы рассматриваем одноатомную линейную цепочку с взаимодействием ближайших соседей при произвольном внешнем натяжении и с учётом затухания самосогласованных фононов. При этом ограничимся приближением высоких температур. В разделе 2 приводится самосогласованная система уравнений для исследования свойств линейной цепочки при произвольном внешнем натяжении. В разделе 3 обсуждается решение уравнения самосогласования этой системы и температура вибрационной неустойчивости цепочки.

2. Самосогласованная система уравнений

Рассмотрим линейную цепочку длиной L , состоящую из $N+1$ атомов, массой M . Для исследования свойств такой цепочки в ^{/2/} была получена следующая самосогласованная система уравнений.

Однофононная функция Грина имеет вид

$$G_k(\omega) = \langle\langle A_k | A_k^+ \rangle\rangle_\omega = \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2 - 2\omega_k \Pi_k(\omega)}, \quad (1)$$

где частоты ω_k определяются в псевдогармоническом приближении

$$\omega_k^2 = \frac{f(\theta, \ell)}{f} \omega_{0k}^2, \quad (2)$$

ω_{0k}^2 - гармонические частоты, соответствующие силовой постоянной f при внешнем натяжении $P=0$.

Ренормированные частоты фононов ϵ_k и затухание фононов Γ_k определяются следующими выражениями

$$\epsilon_k \approx \omega_k + \text{Re} \Pi_k(\epsilon_k); \quad \Gamma_k = -\text{Im} \Pi_k(\omega + i\delta). \quad (3)$$

Оператор собственной энергии в приближении эффективного кубического ангармонизма имеет вид:

$$\begin{aligned} \Pi_k(\omega) = \frac{1}{8N} \frac{g^2(\theta, \ell)}{f^3(\theta, \ell)} \sum_{pp'} \left\{ \frac{(n_p + n_{p'} + 1)(\omega_p + \omega_{p'})}{\omega^2 - (\omega_p + \omega_{p'})^2} - \right. \\ \left. - \frac{(n_p - n_{p'})(\omega_p - \omega_{p'})}{\omega^2 - (\omega_p - \omega_{p'})^2} \right\} \omega_k \omega_p \omega_{p'} \Delta(p + p' - k), \end{aligned} \quad (4)$$

где $n_p = [\exp(\omega_p / \theta) - 1]^{-1}$.

Псевдогармоническая $f(\theta, \ell)$ и эффективная кубическая $g(\theta, \ell)$ силовые постоянные определяются через самосогласованный потенциал $\tilde{\phi}(\ell)$

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

$$\tilde{\phi}(\ell) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\frac{1}{2} \overline{v^2(\ell)} \right]^n \phi^{(2n)}(\ell), \quad (6)$$

где $\phi(\ell)$ - межатомный парный потенциал. $\overline{v^2(\ell)}$ - средний квадрат относительных смещений соседних атомов может быть выражен через функцию Грина (1)

$$\overline{u^2}(\ell) = \frac{1}{2Nf(\theta, \ell)} \sum_k \frac{\omega_k}{\pi} \int_0^\infty d\omega \coth \frac{\omega}{2\theta} [-\text{Im } G_k(\omega + i\delta)]. \quad (7)$$

Помимо температуры $\theta = kT$ свойства цепочки определяются ее длиной $L = N\ell$ или внешним натяжением P . Эти параметры удовлетворяют следующему уравнению

$$P = -\frac{1}{2} \bar{\phi}'(\ell), \quad (8)$$

где ℓ - равновесное расстояние между атомами.

Тепловые свойства ангармонической цепочки определяются внутренней энергией E и свободной энергией F , которые, используя результаты работы [1,4], представим в виде

$$E = \langle H \rangle = \frac{N}{2} \{ \bar{\phi}(\ell) + f(\theta, \ell) \overline{u^2(\ell)} \} + 5\bar{F}_3(\theta) \quad (9)$$

$$F = \theta \sum_k \{ 2 \sinh(\omega_k / 2\theta) \} + \quad (10)$$

$$+ \frac{N}{2} \{ \bar{\phi}(\ell) - f(\theta, \ell) \overline{u^2(\ell)} \} + \bar{F}_3(\theta),$$

где эффективная кубическая поправка к свободной энергии имеет вид:

$$\bar{F}_3(\theta) = \frac{1}{6} \sum_k \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{e^{\frac{\omega}{\theta}} - 1} \frac{\omega^2 - \omega_k^2}{\omega_k} \times \quad (11)$$

$$\times [-\text{Im } G_k(\omega + i\delta)].$$

Заметим, что в [2] интегрирование в выражении (45) проведено в приближении $\text{Im } G_k(\omega + i\delta) \approx \delta(\omega^2 - \epsilon_k^2)$. При этом не учитывается зату-

хание фононов. В отличие от^{/2/} в выражении для внутренней энергии (9) проведен учёт затухания фононов в приближении эффективного кубического ангармонизма.

Таким образом, как динамические (3), так и термодинамические (9), (10) свойства ангармонической линейной цепочки определяются самосогласованной системой уравнений (1), (2), (4)-(8). Чтобы решить ее, необходимо ввести межатомный парный потенциал $\phi(\ell)$ в уравнение (7), который как в^{/2,3/} выберем в виде потенциала Морза.

Рассмотрим случай постоянного внешнего натяжения $P = \text{const}$, но в отличие от^{/2/} не будем полагать P малым. Удобно ввести приведенное натяжение $P^* = P(r_0/D)$, где D - глубина потенциальной ямы и r_0 - среднее расстояние между атомами в гармоническом приближении. Таким же путем, как в^{/3/}, получим выражение для безразмерной псевдогармонической перенормировки частот α безразмерного среднего квадрата относительных смещений соседних атомов γ , самосогласованного потенциала $\phi(\ell)$, равновесного расстояния между соседними атомами ℓ и эффективной кубической силовой постоянной $g(\theta, \ell)$:

$$\alpha^2 = \frac{f(\theta, \ell)}{f} = \frac{P^*}{3} + \frac{e^{-\gamma}}{2} \left\{ 1 + \sqrt{1 + \frac{2P^*}{3} e^{\gamma}} \right\},$$

$$\gamma = 36 \left[\frac{u^2(\ell)}{r_0^2} \right] = \ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3} \right)^2}, \quad (12)$$

$$\tilde{\phi}(\ell) = -D \left\{ \alpha^2 - \frac{P^*}{2} \right\},$$

$$\ell = r_0 \left\{ 1 + \frac{1}{12} \ln \frac{\alpha^2 - \frac{P^*}{6}}{\left(\alpha^2 - \frac{P^*}{3} \right)^4} \right\},$$

$$g(\theta, \ell) = g \left\{ \alpha^2 - \frac{P^*}{9} \right\},$$

где $f = D \alpha^2$, $g = -3D \alpha^3$. Как и в^{/3/}, положено $\alpha r_0 = 6$.

Интегрирование в выражении (7) при учёте затухания фононов не может быть проведено также просто, как в псевдогармоническом приближении^{/3/} и должно проводиться численным образом. Поэтому мы рассмотрим приближенное выражение (7) в предельном случае высоких температур.

3. Предел высоких температур ($\theta \gg \omega_D$)

В приближении $F(p, p', \epsilon_k) = F(p, p', \omega_k)$ мы можем провести суммирование в (4), как это сделано в^{/5/}, и в результате в высокотемпературном приближении получаем следующий результат для (3):

$$\epsilon_k^2 = \omega_{0k}^2 \frac{f(\theta, \ell)}{f} \left[1 - \theta \frac{g^2(\theta, \ell)}{2f^3(\theta, \ell)} \right] \equiv \omega_{0k}^2 a_1^2(\theta, \ell), \quad (13)$$

$$\Gamma_k(\epsilon_k) \approx \Gamma_k(\omega_k) = \theta \frac{g^2(\theta, \ell)}{16f^3(\theta, \ell)} \omega_L [1 + \theta(\pi - k\ell) \times \theta(\pi + k\ell)], \quad (14)$$

где $\omega_L = (4f(\theta, \ell)/M)^{1/2}$ - максимальная псевдогармоническая частота. Таким образом, ренормировка частот в этом приближении приводит только к изменению силовой постоянной, причем ренормировочный множитель не зависит от волнового вектора \bar{k} .

В случае высоких температур, используя (13), для уравнения самосогласования (7) получаем следующее выражение

$$a_1^2 \gamma(\alpha) = T^* \left\{ \left[1 - T^* D \frac{g^2(\theta, \ell)}{f^3(\theta, \ell)} \right]^{-1} + \frac{1}{24} \left(\frac{\alpha \pi}{\lambda T^*} \right)^2 \right\}, \quad (15)$$

где $T^* = \theta/D$ - приведенная температура, $\lambda = (\pi D / \omega_{0L})$ - безразмерная константа связи атомов.

Рассмотрим сильносвязанную цепочку $\lambda \gg 1$. Используя (12), уравнение самосогласования (15) приведем к более удобному для исследования виду

$$\begin{aligned}
 & \left[1 - \left(\frac{P^*}{3T^*} - B \right) \gamma \right]^2 e^\gamma - \frac{\gamma}{T^*} \left[1 - \left(\frac{P^*}{6T^*} - B \right) \gamma \right] = \\
 & = F_1(\gamma) - F_2(\gamma) = 0,
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

где $B = 0,5 \{ 2 + [1 + (2P^*/3) e^\gamma]^{-1/2} \}^2$ играет роль перенормировки давления за счёт учета затухания самосогласованных фононов.

Проанализируем поведение решений этого уравнения. Как легко видеть, в зависимости от соотношения P^* и T^* имеются три различных области поведения $F_1(\gamma)$ и $F_2(\gamma)$, а именно:

1. При $T^* \geq \frac{P^*}{3B}$ возможно только два пересечения $F_1(\gamma)$ и $F_2(\gamma)$, т.е. два действительных решения $0 < \gamma_1 < \gamma_2$. Из этих решений меньшее γ_1 переходит в гармоническое при устремлении ангармонических членов к нулю. Таким образом, оно соответствует обычному "кристаллическому" состоянию (обозначим его S_1). С ростом температуры T^* (при заданном внешнем натяжении P^*) решения γ_1 и γ_2 сближаются и при определенном значении $T^* = T_{*1}^*(P^*)$ они совпадают и при $T^* > T_{*1}^*$ γ_1 и γ_2 становятся комплексно сопряженными, и, следовательно, частоты колебаний тоже становятся комплексными. Температуру неустойчивости T_{*1}^* , при которой разрушается состояние S_1 и цепочка становится (абсолютно) неустойчивой, можно найти из решения системы уравнений

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

2. Как видно из уравнения (16), функции $F_1(\gamma)$ и $F_2(\gamma)$ при определенных P^* и T^* обращаются в нуль, что меняет характер поведения решений, а именно уравнение (16) имеет 4 действительных решения $0 < \gamma_1 < \gamma_2 < \gamma_3 < \gamma_4$ при $\frac{P^*}{3B} > T^* \geq \frac{P^*}{6B}$. Исходя из этого условия, можно оценить натяжение P_1^* , при котором возникает такая ситуация. Легко найти, исходя из предыдущего, что при $P^* = 0$, $T_{*1}^* \approx 0,1$, так что $P_1^* \approx 1,4$.

В этой области температур и давлений (т.е. при $P^* \geq P_1^*$) тоже наблюдается неустойчивость состояния S_1 однако так же, как и в псевдогармоническом приближении [3] при $P^* > 0$, при $T^* = T_{*1}^*$

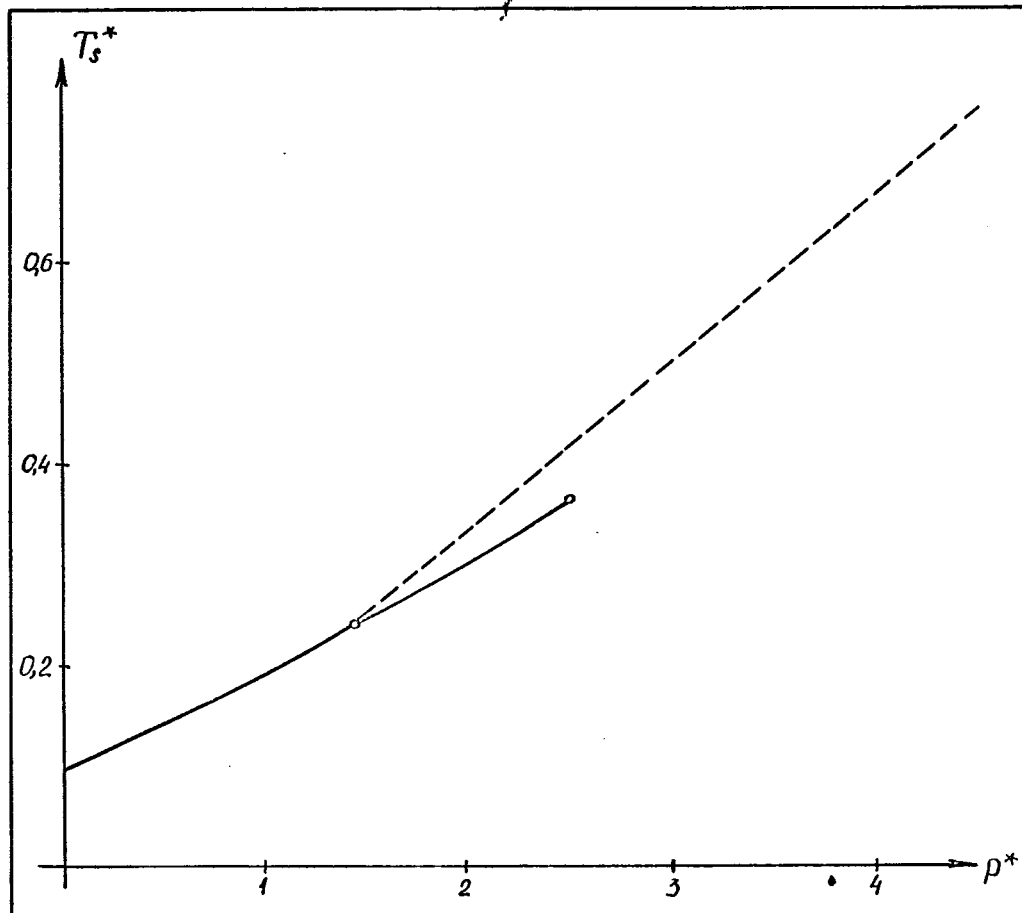
решения y_1 и y_2 становятся комплексными, но имеет место еще действительное решение y_3 , которое соответствует устойчивому состоянию S_2 . В отличие от псевдогармонического приближения с увеличением температуры до T_{s2}^* состояние S_2 разрушается, так как решение y_3 при этой температуре стремится к ∞ , при этом частоты колебаний становятся равными нулю, что соответствует разрушению цепочки как связанного состояния атомов.

3. Однако с увеличением натяжения картина может измениться, а именно, при условии $T^* < \frac{P^*}{6B}$ при $P^* = P_c^* (T_c^*)$, y_3 совпадает с $y_1 = y_2$, т.е. имеется непрерывно растущее действительное решение. Однако в отличие от псевдогармонического приближения/3/ при достижении температуры $T^* = T_{s2}^* > T_c^*$ состояние S_2 разрушается и цепочка становится абсолютно неустойчивой. Легко получить уравнение кривой $T_{s2}^* (P^*)$, а именно $T_{s2}^* = (\max \frac{1}{3B}) P^* \approx 0,17 P^*$.

Численное решение уравнения (16) подтверждает анализ, ранее проведенный. Зависимость температуры неустойчивости T_s^* от приведенного давления P^* представлена на рис. 1, где сплошной линией дана зависимость $T_{s1}^* (P^*)$, прерывистой $-T_{s2}^* (P^*)$. Расчёты показали, что $P_1^* \approx 1,5$, критическая температура и критическое натяжение $T_c^* \approx 0,37$, $P_c^* \approx 2,5$.

Итак, в зависимости от величины внешнего натяжения, цепочка по разному переходит в неустойчивое по отношению к коллективным возбуждениям состояние. При $P^* < P_1^*$ при температуре $T^* = T_{s1}^*$ цепочка становится абсолютно неустойчивой, при этом частоты фононов становятся комплексными. При $P_1^* \leq P^* < P_c^*$ цепочка при температуре T_{s1}^* из одного колебательного режима S_1 переходит в другой — S_2 со значительно большими значениями относительных смещений атомов по сравнению с S_1 . При температуре $T^* = T_{s2}^* > T_{s1}^*$ состояние S_2 разрушается, но при этом частоты равны нулю. В области $P^* > P_c^*$ цепочка устойчива до $T^* = T_{s2}^*$, когда частоты проходят через нуль.

Сравнение с псевдогармоническим приближением/3/ показывает, что учёт затухания фононов приводит к своеобразной перенормировке внешнего натяжения. Именно в псевдогармоническом приближении $P_1^* = 0$.



Приведенная температура неустойчивости T_s^* как функция приведенного натяжения ρ^* .

Еще одно отличие состоит в том, что в нашем случае при любом внешнем натяжении имеется температура, выше которой цепочка абсолютно неустойчива. Сравнение $c/6/$ показывает, что это свойство присуще только одномерному случаю.

Считаем своим приятным долгом выразить благодарность Н.М. Плакиде за полезные обсуждения и советы.

Л и т е р а т у р а

1. N.M. Plakida and T. Siklós. *phys. stat. sol.*, **33**, 103 (1969).
2. N.M. Plakida and T. Siklós. *phys. stat. sol.*, **33**, 113 (1969).
3. T. Siklós. *Acta Phys. Hung.*, **30**, N2, 3 (1971).

Report JINR E4-5389, E4-5521, Dubna, 1970.

4. N.M. Plakida and T. Siklós. *phys. stat. sol.*, **39**, 171 (1970).
5. K.N. Pathak. *Phys.Rev.*, **139**, A1569 (1965).
6. T. Siklós and V. L. Aksenov *phys. stat. sol.* (submitted).

Reports JINR E4-5772, E4-5773, E4-5774, Dubna, 1971.

Рукопись поступила в издательский отдел

24 мая 1971 года.