

с 36

П-371

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна.

911/2-73

5/ш. 73

P4 - 6862



Н.М.Плакида, В.Л.Аксенов

МОДУЛИ УПРУГОСТИ
И УСТОЙЧИВОСТЬ
АНГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

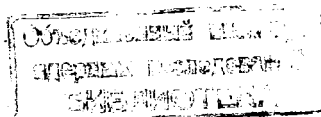
1972

P4 - 6862

Н.М.Плакида, В.Л.Аксенов

**МОДУЛИ УПРУГОСТИ
И УСТОЙЧИВОСТЬ
АНГАРМОНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ**

Направлено в журнал
"Физика твердого тела"



Температурная зависимость модулей упругости кристаллов, обусловленная ангармоническими эффектами колебаний решетки, обычно исследуется в квазиангармоническом приближении ^{/1,2/}, в котором свободная энергия кристаллической решетки вычисляется в гармоническом приближении, но частоты гармонических фононов считаются зависящими от объема кристалла. В этом приближении температурная зависимость модулей упругости - вторых производных от свободной энергии по деформации - определяется ангармоническим взаимодействием третьего и четвертого порядков, которое считается малым и рассматривается по теории возмущений. Однако, как показали недавние расчеты, квазиангармоническое приближение становится неприменимым при исследовании кристаллов с большим ангармонизмом, таких как кристаллы твердого гелия ^{/3/} или кристаллы инертных газов при высоких температурах ($T \geq 0,5 T_{пл}$ - температуры плавления ^{/4/}). В этом случае более последовательной оказывается самосогласованная теория ангармонических кристаллов, в которой сильный ангармонизм колебаний атомов учитывается с самого начала в приближении самосогласованного фононного поля /см., например, ^{5-12/} /.

В приближении первого порядка самосогласованной теории вычисление модулей упругости было рассмотрено в работах ^{/5,6,8,9,13,14/}, причем численные расчеты ^{/14/} показали разумное согласие теоретических значений с экспериментальными и расчетами методом Монте-Карло ^{/15/} в широком интервале температур. Тем не менее вопросы о точности вычислений в самосогласованной теории и о роли членов второго и высших порядков теории остаются недостаточно выясненными ^{/16/}.

В настоящей работе мы рассмотрим температурную зависимость модулей упругости с учетом членов второго порядка самосогла-

сованной теории в приближении, развитом в работе /11/. При этом мы сможем учесть весьма существенный вклад нечетных ангармонических членов в перенормировку частот самосогласованных фононов и рассмотреть вопрос о связи динамических критериев устойчивости ангармонического кристалла /условия существования самосогласованных фононов/ с термодинамическими критериями /условия устойчивости кристалла при деформации/. Последние согласно /17/ определяются из условия положительной определенности квадратичной формы при вариации свободной энергии и, помимо общих условий устойчивости термодинамических систем

$$c_p > 0, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T < 0, \quad /1/$$

содержат условия положительной определенности для модулей упругости, которые в случае кубической решетки имеют вид

$$c_{11}(T) > 0, \quad c_{44}(T) > 0, \quad c_{11}(T) - c_{12}(T) > 0. \quad /2/$$

Термодинамические критерии устойчивости обсуждаются в работах /16/, где авторы приходят к выводу о возможности нарушения соотношений /2/ и возникновения "мягкой моды" при расчетах в первом порядке самосогласованной теории для одномерной решетки. В настоящей работе на примере модели ГЦК решетки с взаимодействием ближайших соседей будет показано, что условия динамической устойчивости вместе с условиями /1/ нарушаются первыми при должном учете членов второго порядка самосогласованной теории и "мягкая мода" не возникает.

В разделе 1 выводится общее выражение для изотермических модулей упругости в методе длинных волн /13/, температурная зависимость которых для модели ГЦК решетки рассмотрена в разделе 2. В заключение обсуждается точность полученных результатов и дается сравнение с результатами других работ.

1. Модули упругости в самосогласованной теории ангармонических кристаллов

Рассмотрим ангармонический кристалл, гамильтониан которого запишем в общем виде:

$$H = \sum_s \frac{\vec{p}_s^2}{2M_k} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{1, \dots, n} \Phi_{1, \dots, n} u_1 \dots u_n + U_0(x_i), \quad /3/$$

где \vec{p}_s - импульс атома с массой M_k в узле решетки $s=(\ell, k)$, положение которого x_s определяется при усреднении по равновесному состоянию кристалла $\langle \dots \rangle$ координаты атома \vec{R}_s :

$$\vec{x}_s = \langle \vec{R}_s \rangle = \vec{x}_{\ell k} = \vec{\ell} + \vec{x}_k. \quad /4/$$

Здесь ℓ - координата элементарной ячейки и x_k - координата атома сорта $k=1, \dots, r$. $\Phi_{1, \dots, n}$ - коэффициенты разложения потенциальной энергии кристалла $U(x_i + u_i)$ в ряд по тепловым смещениям $u_i = R_i - x_i$.

$$\Phi_{1, \dots, n} = \nabla_1 \dots \nabla_n U_0(x_i) = \frac{\partial}{\partial x_{\ell_1 k_1}^{a_1}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{\ell_n k_n}^{a_n}} U_0(\{\vec{x}_{\ell k}\}). \quad /5/$$

Следуя работам^{/12/}, определим однофононную запаздывающую функцию Грина от операторов смещений в виде

$$G_{ss}^{a\beta}(\omega) = \langle \langle u_s^a | u_s^\beta \rangle \rangle_\omega = [\omega^2 M_k \delta_{a\beta} \delta_{ss} - M_{ss}^{a\beta}(\omega)]^{-1}, \quad /6/$$

полюса которой /или максимумы при учете затухания/ определяют энергию однофононных возбуждений в кристалле. Массовый оператор $M_{ss}^{a\beta}$, состоит из двух частей:

$$M_{ss}^{a\beta}(\omega) = \tilde{\Phi}_{ss}^{a\beta} + \Pi_{ss}^{a\beta}(\omega), \quad /7/$$

определяющих соответственно энергию возбуждений в среднем фононном поле:

$$\tilde{\Phi}_{ss}^{a\beta} = \nabla_s^a \nabla_s^\beta \langle U(x_i + u_i) \rangle = \nabla_s^a \nabla_s^\beta \langle e^{\sum_i u_i \nabla_i} \rangle U_0(x_i), \quad /7a/$$

а также поправку к энергии и затухание за счет неупругих процессов рассеяния фононов:

$$\Pi_{ii'}(\omega) = \sum_{n, n'=2}^{\infty} \frac{1}{n! n'!} \sum_{\substack{1, \dots, n \\ 1', \dots, n'}} \tilde{\Phi}_{i1 \dots n} \tilde{\Phi}_{i'1' \dots n'} K_{1 \dots n, 1' \dots n'}(\omega) \tilde{\Phi}_{1' \dots n' i'} / 76/$$

Перенормированные в среднем фононном поле ангармонические вершины $\tilde{\Phi}_{1 \dots n} (n \geq 3)$ определяются подобно /7а/; неприводимая многофононная функция Грина $K_{1 \dots n, 1' \dots n'}(\omega) = \langle\langle u_1 \dots u_n | u_{1'} \dots u_{n'} \rangle\rangle_{\omega}^{tr, c}$ не содержит слабосвязанных частей, соединенных одной линией $G_{\alpha\beta}^{0, ss}$, и не может быть упрощена спариванием операторов $\{u_1 \dots u_n\}$ или $\{u_{1'} \dots u_{n'}\}$, относящихся к одному моменту времени.

Изотермические модули упругости ангармонического кристалла согласно /13/ могут быть определены по статическому ($\omega=0$) длинноволновому пределу ($\vec{q} \rightarrow 0$) массового оператора /7/:

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} M_{kk}^{\alpha\beta}(\vec{q}) = \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \frac{1}{N \sqrt{M_k M_{k'}}} \sum_{\ell \ell'} \text{Re} M_{\ell k, \ell' k'}^{\alpha\beta}(\omega=0) e^{i\vec{q}(\vec{x}_{\ell k} - \vec{x}_{\ell' k'})} / 8/$$

Вводя нормированные вектора e_{η}^a длинноволновых ($\vec{q} \rightarrow 0$) смещений для акустических мод $\eta = 1, 2, 3$, не зависящих от сорта атома k , частоту акустических колебаний решетки запишем в пределе длинных волн /8/ в виде /13/:

$$\rho e_{\eta}^a \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \frac{\tilde{\omega}^2}{\vec{q}\eta} = \sum_{\beta\gamma\delta} (z_{\alpha\beta, \gamma\delta} + z'_{\alpha\gamma, \beta\delta}) q^{\gamma} q^{\delta} e_{\eta}^{\beta} / 9/$$

где $\rho = \sum_k (M_k / v)$ - плотность, $v = V/N$ - объем элементарной ячейки.

Тензор $z_{\alpha\beta, \gamma\delta}$ имеет вид

$$z_{\alpha\beta, \gamma\delta} = - \frac{1}{2V} \sum_{ss'} \{ \tilde{\Phi}_{ss'}^{\alpha\beta} + \text{Re} \Pi_{ss'}^{\alpha\beta}(\omega=0) \} (\vec{x}_s - \vec{x}_{s'})^{\gamma} (\vec{x}_s - \vec{x}_{s'})^{\delta} / 10/$$

Тензор $z'_{\alpha\gamma, \beta\delta}$, описывающий вклад в модули упругости от относительного сдвига атомов разных сортов в элементарной ячейке, имеет более сложный вид /13/, который мы не будем приводить, для простой решетки Бравэ он обращается в нуль. Сравнивая теперь уравнение /9/ с уравнением колебаний упругой среды, для изотермических модулей упругости получаем обычное выражение /1, 13, 17/:

$$c_{\alpha\beta, \gamma\delta}^{is} = (z_{\alpha\gamma, \beta\delta} + z_{\beta\gamma, \alpha\delta} - z_{\beta\alpha, \gamma\delta}) + z'_{\alpha\beta, \gamma\delta} / 11/$$

Полученные в длинноволновом пределе модули упругости /10/ совпадают с вычисленными непосредственным дифференцированием по деформации свободной энергии ангармонического кристалла /13/.

Для вычисления модулей упругости согласно /10/, /11/ в рамках самосогласованной теории необходимо определить массовый оператор /7/ функции Грина. При этом точность вычислений определяется как точностью полученных замкнутых выражений для средней потенциальной энергии в /7а/ и многофононной функции Грина в /7б/, так и точностью решения самосогласованной системы уравнений для определения частот пробных фононов. При решении самосогласованной системы уравнений обычно пользуются приближением первого порядка, или псевдогармоническим приближением /8-10,14/, в котором пренебрегается затуханием пробных фононов и, как следствие этого, учитывается самосогласованным образом лишь ангармоническое взаимодействие четных порядков. Частоты пробных фононов и корреляционные функции вычисляются по динамической матрице первого порядка:

$$\tilde{\Phi}_{sp}^{(\alpha)\beta} = \nabla_s^{\alpha} \nabla_p^{\beta} \exp\left\{ \frac{1}{2} \sum_{12} \langle u_1 u_2 \rangle \nabla_1 \nabla_2 \right\} U_0(x_i) = \nabla_s^{\alpha} \nabla_p^{\beta} \tilde{U}(x_i). \quad /12/$$

При этом для получения выражений для модулей упругости /10/, /11/, совпадающих с вычисленными прямым дифференцированием свободной энергии первого порядка, необходимо учесть не только вклад /7а/ в приближении /12/, но также и вклад /7б/, где сохраняется лишь первый член ряда - двухфононная функция Грина, удовлетворяющая интегральному уравнению /13/:

$$K_{12,1'2'}(\omega) = F_{12,1'2'}^0(\omega) + \frac{1}{2} \sum_{3456} F_{12,34}^0(\omega) \tilde{\Phi}_{3456} K_{56,1'2'}(\omega), \quad /13/$$

где $F_{12,1'2'}^0$ - двухфононная функция Грина в псевдогармоническом приближении. Таким образом, при определении модулей упругости /10/, /11/ в приближении первого порядка самосогласованной теории, по существу, приходится учитывать члены второго порядка самосогласованной теории в /7б/, обусловленные ренормированным ангармоническим взаимодействием третьего и четвертого /в /13// порядков.

В самосогласованной теории второго порядка частоты пробных фононов и корреляционные функции вычисляются с помощью функции Грина /6/ второго порядка с массовым оператором в виде

$$\tilde{\Phi}_{sp}^{(2)\alpha\beta} = \nabla_s^{\alpha} \nabla_p^{\beta} (\tilde{U}(x_i) + \Delta_2 U(x_i)), \quad /14a/$$

$$\begin{aligned} \Pi_{sp'}^{(2)\alpha\beta}(\omega) = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (e^{\frac{\omega'}{\theta}} - 1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega't} \times \\ & \times \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} (\sum_{jj'} \langle u_j(t) u_{j'} \rangle \nabla_j \nabla_{j'})^n \nabla_s^{\alpha} \nabla_{p'}^{\beta} \tilde{U}(x_i) \tilde{U}(x_{i'}), \end{aligned} \quad /14б/$$

где поправка второго порядка к потенциальной энергии

$$\begin{aligned} \Delta_2 U(x_i) = & -\text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} (e^{\frac{\omega}{\theta}} - 1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega t} \times \\ & \times \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} (\sum_{jj'} \langle u_j(t) u_{j'} \rangle \nabla_j \nabla_{j'})^n \tilde{U}(x_i) \tilde{U}(x_{i'}). \end{aligned} \quad /14в/$$

При этом для вычисления модулей упругости во втором порядке самосогласованной теории в выражении /10/ естественно использовать результаты /14/, где статическое значение ($\omega=0$) массового оператора в случае классической области температур $\theta = kT \gg \omega_D$ можно записать в виде

$$\text{Re} \Pi_{sp'}^{\alpha\beta}(\omega=0) = -\frac{1}{\theta} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} (\sum_{jj'} \langle u_j u_{j'} \rangle \nabla_j \nabla_{j'})^n \nabla_s^{\alpha} \tilde{U}(x_i) \nabla_{p'}^{\beta} \tilde{U}(x_{i'}), \quad /15a/$$

$$\Delta_2 U(x_i) = -\frac{1}{\theta} \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!} (\sum_{jj'} \langle u_j u_{j'} \rangle \nabla_j \nabla_{j'})^n \tilde{U}(x_i) \tilde{U}(x_{i'}). \quad /15б/$$

Полный учет членов второго порядка в /14/ при решении самосогласованной системы уравнений представляет значительные трудности, и поэтому ограничиваются обычно учетом первых членов, пропорциональных ренормированному кубическому ангармонизму. В еще более простом приближении, так называемом улучшенном самосогласованном приближении (ISC) /18/, члены второго порядка с кубическим ангармонизмом учитываются по теории возмущений, где

в качестве нулевого приближения используются самосогласованные фононы первого порядка в /12/.

2. Модули упругости модели ГЦК решетки

Исследуем температурную зависимость модулей упругости для модели ГЦК решетки с парным центральным взаимодействием ближайших соседей. Эта модель рассматривалась нами в псевдогармоническом приближении в работе /10/ и с самосогласованным учетом членов второго порядка, обусловленных ренормированным кубическим ангармонизмом, в работах /11,19/. В этой модели мы приходим к простой самосогласованной системе уравнений для ренормированного парного потенциала:

$$\tilde{\phi}(\ell) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2} \overline{u^2}(\ell) \right)^n \phi^{(2n)}(\ell), \quad /16/$$

для корреляционной функции смещений ближайших соседей на расстоянии ℓ :

$$\begin{aligned} \overline{u^2}(\ell) &= \frac{1}{\ell^2} \langle [\vec{\ell} (\vec{u}_{\ell} - \vec{u}_0)]^2 \rangle = \\ &= \frac{1}{z \tilde{\phi}''(\ell)} \frac{1}{N} \sum_q \omega_q \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} [-\text{Im} G_q(\omega + i\delta)] \text{cth} \frac{\omega}{2\theta}. \end{aligned} \quad /17/$$

Уравнение для давления имеет вид

$$P = - \frac{z\ell}{6v} \tilde{\phi}'(\ell), \quad /18/$$

где для ГЦК решетки $v = \ell^3 / \sqrt{2}$, $z = 12$. Функция Грина $G_q(\omega)$ в /17/ имеет вид

$$G_{qj}(\omega) = \frac{2\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2 - 2\omega_q \Pi_q(\omega)}, \quad /19/$$

где перенормировка частот в псевдогармоническом приближении ω_{qj} сводится к перенормировке силовой постоянной /10/:

$$\omega_{\vec{q}j}^2 = \frac{\tilde{\phi}''(\ell)}{\phi''(R_0)} \omega_{0\vec{q}j}^2 \equiv \frac{f(\theta, \ell)}{f} \omega_{0\vec{q}j}^2 \quad /19a/$$

$\omega_{0\vec{q}j}$ - частоты в гармоническом приближении в этой модели с силовой постоянной $f = \phi''(R_0)$. Выражение для массового оператора второго порядка $\Pi_{\vec{q}}(\omega)$ в приближении ренормированного кубического ангармонизма приводится в /11/; в предельном случае высоких ($\theta \gg \omega_D$) температур, который дальше мы только и будем рассматривать, он имеет вид

$$\Pi_{\vec{q}j}(\omega) = -\theta \omega_{\vec{q}j} \frac{g^2(\theta, \ell)}{f^3(\theta, \ell)} S_{\vec{q}j}(\omega), \quad /19б/$$

где $g(\theta, \ell) = \tilde{\phi}'''(\ell)$ константа ренормированного кубического взаимодействия и

$$S_{\vec{q}j}(\nu) = \frac{1}{32N} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} \frac{\Delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 - \vec{q})}{\lambda_{\vec{q}}^2 \lambda_{\vec{q}_1}^2 \lambda_{\vec{q}_2}^2} \left\{ \frac{(\lambda_{\vec{q}_1} + \lambda_{\vec{q}_2})^2}{(\lambda_{\vec{q}_1} + \lambda_{\vec{q}_2})^2 - \nu^2} + \frac{(\lambda_{\vec{q}_1} - \lambda_{\vec{q}_2})^2}{(\lambda_{\vec{q}_1} - \lambda_{\vec{q}_2})^2 - \nu^2} \right\} \times$$

$$\times \left\{ \sum_{\vec{n}} (-1)^{\vec{n} \cdot \vec{m}} (\vec{n} \vec{e}_{\vec{q}_1}) (\vec{n} \vec{e}_{\vec{q}_2}) \sin \frac{d}{4} \vec{n} \vec{q} \sin \frac{d}{4} \vec{n} \vec{q}_1 \sin \frac{d}{4} \vec{n} \vec{q}_2 \right\}^2$$

$$\nu = 2\omega / \omega_L, \lambda_{\vec{q}} = \lambda_{\vec{q}j} = 2\omega_{\vec{q}j} / \omega_L, \omega_L^2 = 8f(\theta, \ell) / M,$$

$\vec{n} = 2\vec{\ell} / d, d = \ell \sqrt{2}$ - период кубической решетки.

Решение самосогласованной системы уравнений /16/-/19/ рассматривалось в работах /10,11,19/ для модельного потенциала Морзе

$$\phi(R) = D \left[e^{-2a(R-R_0)} - 2e^{-a(R-R_0)} \right], \quad /21/$$

где D - глубина потенциальной ямы: $\phi(R_0) = -D$, a - параметр потенциала, который удобно выбрать в виде $aR_0 = 6$, так, чтобы гармоническая силовая постоянная $f = 2Da^2$ совпадала с вычисленной для потенциала Ленарда-Джонса (12-6). При этом самосогласованная система уравнений сводится к одному уравнению для безразмерной корреляционной функции $y = a^2 u^2 \sqrt{V}$ в /17/; в случае высоких температур при нулевом давлении $P=0$ оно имеет вид /11/

$$y = \frac{T^* e^y}{4(1 - 9AT^* e^y)}, \quad /22/$$

где $T^* = \theta/D$, в псевдогармоническом приближении $A = 0$, а в приближении ренормированного кубического ангармонизма численная оценка для суммы /20/ дает $A = 0,056$. Уравнение /22/ в псевдогармоническом приближении имеет действительные решения в области температур $T^* \leq T_s^{*ph} = 1,47^{/10/}$, а с учетом первого члена второго порядка /ренормированного кубического ангармонизма/ в области $T^* \leq T_s^* = 0,6^{/11,19/}$. Сильное понижение температуры динамической устойчивости системы - области существования самосогласованных фононов - при учете членов второго порядка легко объяснить, решая уравнение /22/ при $y \ll 1$ итерацией

$$y \approx \frac{T^*}{4} (1 + y + 0,5 T^*) \approx \frac{T^*}{4} (1 + 0,25 T^* + 0,5 T^*). \quad /22a/$$

Как видно, в этом решении линейная по температуре поправка от членов второго порядка в 2 раза превышает поправку за счет членов первого порядка: $e^y \approx 1 + y$.

При вычислении модулей упругости для кубической решетки мы можем воспользоваться тем обстоятельством, что все три независимые модуля упругости могут быть определены по наклону дисперсионных кривых. В пределе длинных волн в /9/, при определенном выборе вектора $\vec{k} = \vec{q}/q$ вдоль одного из симметричных направлений в кристалле и выборе поляризации $j=L$ /продольной/ или $j=T_1, T_2$ /одной из поперечных/, получаем следующие соотношения, определяющие модули упругости /20/:

$$\vec{k} = [1, 0, 0] \rho \bar{\omega}_{\vec{q}, L}^2 \rightarrow c_{11} q^2, \quad \rho \bar{\omega}_{\vec{q}, T}^2 \rightarrow c_{44} q^2, \quad /23/$$

$$\vec{k} = [1, 1, 0] \rho \bar{\omega}_{\vec{q}, T_1}^2 \rightarrow c_{44} q^2, \quad \rho \bar{\omega}_{\vec{q}, T_2}^2 \rightarrow \frac{1}{2} (c_{11} - c_{12}) q^2.$$

Следовательно, рассматривая статический ($\omega = 0$) длинноволновый предел ($\vec{q} \rightarrow 0$) для функции Грина /19/, получаем следующие выражения для модулей упругости:

$$\frac{C_{\alpha\beta}}{C_{\alpha\beta}^{(0)}} = \frac{R_0}{\ell} \frac{f(\theta, \ell)}{f} \left[1 - 2\theta \frac{g^2(\theta, \ell)}{f^3(\theta, \ell)} S_{\vec{k}, j} \right], \quad /24/$$

где $C_{\alpha\beta}^{(0)}$ - модули упругости в приближении, $S_{\vec{\kappa}_j} = \lim_{q \rightarrow 0} S_{\vec{q}_j} (\omega=0)$. Для модели ГЦК решетки с парным потенциалом /21/ получаем следующую зависимость модулей упругости от температуры:

$$C_{11}^* = \frac{2}{1+0,25\gamma} [e^{-\gamma} - 9T^* S_{\vec{\kappa}_1, L}], \quad /25a/$$

$$C_{44}^* = \frac{1}{1+0,25\gamma} [e^{-\gamma} - 9T^* S_{\vec{\kappa}_1, T}], \quad /25б/$$

$$(C_{11} - C_{12})^* = \frac{1}{1+0,25\gamma} [e^{-\gamma} - 9T^* S_{\vec{\kappa}_2, T_2}]. \quad /25в/$$

Здесь введены безразмерные модули упругости $C_{\alpha\beta}^* = C_{\alpha\beta} / C_{44}^{(0)} = d C_{\alpha\beta} / t$, $\vec{\kappa}_1 = [1, 0, 0]$, $\vec{\kappa}_2 = [1, 1, 0]$; $\frac{t}{R_0} = 1 + 0,25\gamma$ получено из уравнения /18/ при $P=0$. Значение безразмерной корреляционной функции при заданной температуре T^* следует подставлять из уравнения самосогласования /22/, решение которого в псевдогармоническом приближении ($A=0$) дает модули упругости в первом порядке самосогласованной теории, а решение с учетом ренормированного кубического ангармонизма ($A \neq 0$) определяет модули упругости второго порядка в приближении главных, кубических членов. Квазигармоническое выражение для модулей упругости можно получить из /25/, подставляя гармоническое значение $\gamma^{(0)} = T^* / 4$ /см./22а// и полагая $e^{-\gamma} \approx 1 - \gamma$.

Предельные значения сумм $S_{\vec{\kappa}_j}$ в /20/ вычислялись при помощи однократного суммирования по 10^3 точек в первой зоне Бриллюэна. При этом были получены следующие значения:

$$S_{\vec{\kappa}_1, L} = 0,1028, \quad S_{\vec{\kappa}_1, L} = 0,080, \quad S_{\vec{\kappa}_2, T_2} = 0,0647.$$

Для контроля рассчитывалась точно вычисляемая сумма:

$$S = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}_j} \frac{e^{\frac{x}{a_j}} + e^{\frac{y}{q_j}}}{\lambda_{\vec{q}_j}^2} \sin^2 \frac{d}{4} (q^x + q^y) = 0,5.$$

Расчеты показали, что при числе точек $N = 343$ $S = 0,4985$, при $N = 10^3$ $S = 0,4995$, $N = 3375$ $S = 0,4998$.

Температурная зависимость модулей упругости приведена на рисунке, где сплошной линией показаны модули упругости при

полном самосогласовании в уравнении /22/ /точки окончания кривых соответствуют исчезновению действительных решений/, пунктирной - при псевдогармоническом самосогласовании ($A=0$). Квазигармонические модули упругости ($\gamma = \gamma^{(0)} \pm T^*/4$) с точностью до 2% совпадают с модулями упругости при псевдогармоническом самосогласовании, хотя выражения для них справедливы при $T^* \ll 1$.

3. Обсуждение

В рассматриваемых приближениях модули упругости зависят от температуры, что приводит, как видно из сравнения /25а/, /25в/ и /25б/, к нарушению соотношения Коши, то есть к $C_{12} \neq C_{44}$. Ве-

личина $a(T) = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$, которая является мерой анизотропии, уменьшается с ростом температуры. Используя /25/, получаем $a \approx 2(1 - 0,135 T^* e^{\gamma})$.

Полученные результаты находятся в хорошем согласии с приближением малого ангармонизма при $T^* \ll 1$. В значительной области температур, $T^* \leq 0,4 T^*$, отличие модулей упругости, вычисленных при различном способе самосогласования в /22/, невелико, порядка 10%. Для сравнения с вычислениями /14/ приведены значения модулей упругости для ксенона при некоторых значениях приведенной температуры $T^* = 0,2; 0,3; 0,4$, где кружками показаны значения в приближении, учитывающем лишь первый член в /13/ и совпадающем с нашим приближением при псевдогармоническом самосогласовании /пунктирная линия/, а треугольниками - значения, полученные при учете всех членов в уравнении /13/, что приводит к уменьшению отрицательного вклада в модули упругости от ренормированного кубического ангармонизма в /7б/. Некоторое несоответствие наших расчетов с /14/ можно объяснить тем, что нами использован потенциал Морзе, более мягкий по сравнению с потенциалом Ленарда-Джонса (12-6) в работе /14/:

$$\phi_M'''(R_0) / \phi_{L-J}'''(R_0) \approx 0,86.$$

Поведение модулей упругости при $T^* \leq T_s^* = 0,6$ существенно зависит от характера самосогласования. Как видно, в этом случае последовательный учет главных членов второго порядка /линейных по T^* в /22// приводит к сильной перенормировке пробных фононов,

и при $T^* \rightarrow T_s^*$ система становится неустойчивой относительно распространения самосогласованных фононов. Отметим, что подобная же неустойчивость была получена в работе /21/ только при учете членов второго порядка, играющих в этом случае основную роль /см. обсуждение в /22а//. Псевдогармоническое самосогласование в этой области температур существенно не меняет характера модулей упругости и при $T^* \sim 0,8$ приводит к ложной "мягкой моде" для продольных колебаний в направлении [1,0,0]. Как показано в работах /11,19/, вблизи точки неустойчивости T_s^* теплоемкость

$c_p \sim (1 - T^*/T_s^*)^{-1/2} \rightarrow \infty$ и сжимаемость $(\frac{\partial p}{\partial V})_T \rightarrow 0$, что означает нарушение

термодинамических критериев устойчивости /1/. Отметим здесь во избежание недоразумений, что динамическая неустойчивость при $T_s^* = 0,6$ /см. /11,19// лежит выше температуры плавления /для инертных газов $T_{пл}^* \approx 0,5/$ и поэтому в реальных условиях не может наблюдаться. Существование же "мягкой моды" можно ожидать для систем со сложной решеткой /22,23/, где неустойчивость для одной из мод колебаний может произойти раньше полной динамической неустойчивости всей системы, и поэтому необходимо производить исследования модулей упругости дополнительно к решению самосогласованной системы уравнений, как было отмечено в /16/.

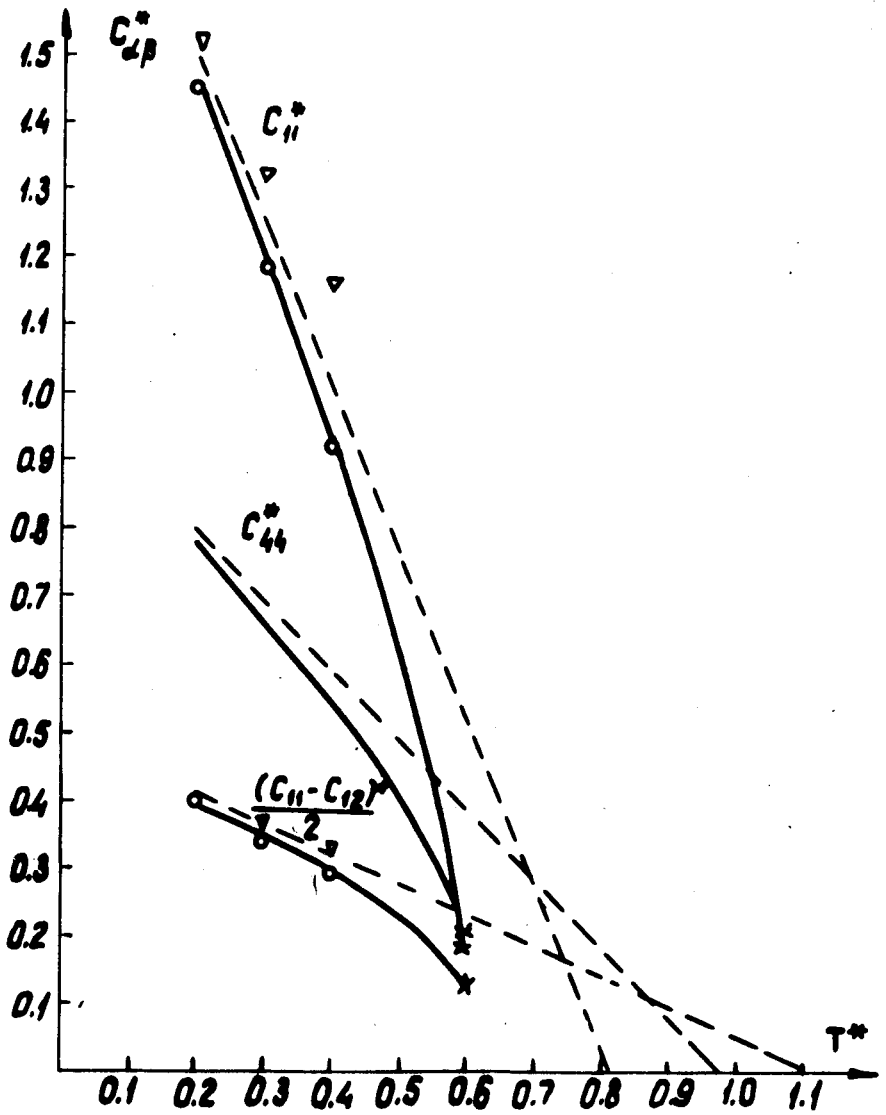
Сделаем еще несколько замечаний о точности полученных в разделе 1 выражений для модулей упругости /10/, /11/, /13/, /15/ и выражений /6/, /12/, /14/, определяющих самосогласованную систему уравнений. Следует отметить, что самосогласованная теория ангармонических кристаллов, развитая в /5-12/, основана на вариационном принципе и не требует производить разложение по малому параметру. Поэтому критерием применимости теории является сходимость последовательных приближений при все более сложном выборе пробной функции - гамильтониана пробных фононов /5,9/. Однако в случае малого ангармонизма теория должна сводиться к обычной теории возмущений /1,2/, и поэтому конкретный выбор пробных фононов обычно производится в соответствии с этим требованием. С этой точки зрения общие выражения /14/, /15/ содержат члены более высоких порядков по параметру теории возмущений $T^* \ll 1$, поэтому для получения более надежных результатов следовало бы учесть также и вклады от следующих порядков в кумулянтном разложении.

В заключение авторы считают своим приятным долгом поблагодарить П.С.Зырянова за сообщение результатов работ /16/ до их публикации и полезные обсуждения.

Литература

1. Г.Л.Лейбфрид. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. ФМЛ, Москва, 1963.
2. Г.Лейбфрид, В.Людвиг. Теория ангармонических эффектов в кристаллах. ИЛ, Москва, 1963.
3. F.W.deWette, B.R.A.Nijboer. *Phys.Lett.*, 18, 19 (1965).
4. C.Feldman, M.L.Klein, G.K.Horton. *Phys.Rev.*, 184, 910 (1969).
5. Ph.Choquard. *The Anharmonic Crystal*. W.A.Benjamin. New York - Amsterdam, 1967.
6. H.Horner. *Z.Phys.*, 205, 72 (1967).
7. Н.М.Плакида, Т.Шиклош. Препринт ОИЯИ, Р4-3449, Дубна, 1967. *Acta Phys.Hung.*, 25, 17 (1968).
8. N.S.Gillis, N.R.Werthamer, T.R.Koehler. *Phys.Rev.*, 165, 951 (1968).
9. N.R.Werthamer. *A.J.Phys.*, 37, 763 (1969); *Phys.Rev.*, B1, 572 (1970).
10. Н.М.Плакида. ФТТ, 11, 700 /1969/.
11. Н.М.Плакида, Т.Шиклош. *Phys.stat.sol.*, 33, 103 (1969); 39, 171 (1970).
12. Н.М.Плакида. ТМФ, 12, 135 /1972/; ФТТ, 14, 2541 /1972/.
13. W.Gotze, K.H.Michel. *Z.Phys.*, 217, 170 (1968); T.Paszkievicz. Preprint JINR, E4-6444, Dubna, 1972.
14. G.K.Horton, V.V.Goldman, M.L.Klein. *Phys.Rev.*, B2, 4995 (1970); *Phys.Rev.*, B4, 567 (1971).
15. M.L.Klein, W.G.'Hoover. *Phys.Rev.*, B4, 537 (1971).
16. П.С.Зырянов, В.В.Кондратьев, И.Г.Кулиев. ФММ, 34, 263 /1972/; ФММ, 35 /1972/.
17. М.Борн, Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. ИЛ, Москва, 1958.
18. M.L.Klein, V.V.Goldman, G.K.Horton. *Phys.Rev.Lett.*, 21, 1527 (1968); *Phys.Lett.*, 28A, 341 (1968); *J.Phys.Chem.Sol.*, 31, 2241 (1970).
19. Т.Шиклош, В.Л.Аксенов. *Phys.Stat.Sol.*, 50b, 171 (1972).
20. D.C.Wallace. *Phys.Rev.*, 162, 776 (1967).
21. Д.И.Хомский. ФТТ, 11, 209 /1969/.
22. T.Schneider, G.Srinivasan, C.P.Enz. *Phys.Rev.*, A5, 1528 (1972).
23. N.S.Gillis, T.R.Koehler. *Phys.Rev.*, B4, 3971 (1971); B5, 1925 (1972).
E.Pytte. *Phys.Rev.*, B5, 3758 (1972).

Рукопись поступила в издательский отдел
25 декабря 1972 года.



Зависимость приведенных модулей упругости от приведенной температуры.