

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



4/III 74

П-371

P4 - 7481

822/2-74

Н.М.Плакида, В.Л.Аксенов

МОДУЛИ УПРУГОСТИ  
И УСТОЙЧИВОСТЬ РЕШЕТКИ  
КВАНТОВЫХ КРИСТАЛЛОВ

**1973**

ЛАБОРАТОРИЯ  
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7481

Н.М.Плакида, В.Л.Аксенов

МОДУЛИ УПРУГОСТИ  
И УСТОЙЧИВОСТЬ РЕШЕТКИ  
КВАНТОВЫХ КРИСТАЛЛОВ

*Направлено в physica status solidi*

В последнее время при изучении свойств сильно ангармонических кристаллов /квантовых кристаллов геля, кристаллов инертных газов при высоких температурах/ широкое распространение получила теория самосогласованных фононов /см. обзор /1/. При выполнении численных расчетов наиболее простой и успешной оказалась так называемая улучшенная самосогласованная теория (ISC), в которой частоты самосогласованных фононов определяются в первом порядке теории - в псевдогармоническом или приближении среднего фононного поля, из членов второго порядка учитывается лишь вклад кубического ангармонизма, но ренормированной теорией возмущений /см. работы /2/ /.

В недавней работе /3/ мы показали, что такой подход может быть неудовлетворительным при вычислении модулей упругости в области сильного ангармонизма - вблизи точки динамической неустойчивости решетки /4/ для классических кристаллов / $T \gg T_D$  - температура Дебая/. В этой работе мы приводим результаты аналогичных расчетов для простой модели квантового кристалла - ГЦК-решетки с взаимодействием ближайших соседей при  $T = 0$ .

Как показано в работе /4/, однофононная функция Грина, описывающая распространение самосогласованных фононов, имеет вид:

$$G_q(\omega) = \frac{2\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2 - 2\omega_q \Pi_q(\omega)}, \quad /1/$$

где перенормированные в среднем фоновом поле частоты  $\omega_q$  ( $q = \vec{q}_j$ ) определяются в принятой модели уравнением:

$$\omega_q^2 = \omega_{0q} \frac{\bar{\phi}''(x)}{\phi''(r_0)} \equiv \alpha^2(x) \omega_{0q}^2, \quad /2/$$

$\omega_{0q}$  - частота в гармоническом приближении с силовой постоянной  $\phi''(r_0)$ . Ренормированный потенциал  $\bar{\phi}(x)$  для модельного потенциала Морзе имеет вид /4/:

$$\bar{\phi}(x) = D( e^{-12x} e^{2y} - 2e^{-6x} e^{y/2} ), \quad /3/$$

где параметр потенциала Морзе "а" выбран так, что  $a r_0 = 6$ ;  $x = (\ell - r_0) / r_0$  - безразмерная координата. Параметр перенормировки  $\gamma = a^2 \bar{u}^2(\ell) = 36 \bar{u}^2(\ell) / r_0^2$  определяется средним квадратом относительного смещения ближайших соседей  $\bar{u}^2(\ell) = \langle (\vec{u} - \vec{u}') \vec{\ell} \rangle^2 / \ell^2$ , расположенных на расстоянии  $\ell$ . Массовый оператор в /1/ содержит члены второго порядка самосогласованной теории и при учете только кубических членов при  $T=0$  может быть записан в виде /4/:

$$\Pi_{\vec{q}_j}(\omega) = -\omega_{\vec{q}_j} \epsilon_0 \frac{[\bar{\phi}'''(x)]^2}{[\bar{\phi}''(x)]^3} S_{\vec{q}_j}(\omega) =$$

$$-\omega_{\vec{q}_j} \frac{\epsilon_0}{2D} \frac{\gamma^2(x)}{\alpha^6(x)} S_{\vec{q}_j}(\omega), \quad /4/$$

где  $\epsilon_0 = (1/2N) \sum_q \omega_q^2 \equiv \alpha \epsilon_0^{(0)}$  - энергия нулевых колебаний,

$S_{\vec{q}_j}(\omega)$  - безразмерная сумма по векторам обратного пространства. Уравнение самосогласования, получающееся при вычислении  $\bar{u}^2(\ell)$  по функции Грина /1/, при  $T=0$  имеет вид /4/:

$$y = \frac{1}{a\lambda} \left[ 1 - \frac{6\nu_0}{\lambda} \frac{y^2}{a^5} \right]^{-1}, \quad /5/$$

где  $\lambda = zD \epsilon^{(0)}$  - безразмерный параметр связи атомов в решетке /для ГЦК-решетки число ближайших соседей  $z = 12$ /. Согласно оценкам в /5/,  $\lambda = 2.2$  для  ${}^4\text{He}$ ,  $\lambda = 2.58$  для  ${}^3\text{He}$  и  $\lambda = 12$  для  $\text{Ne}$ . Численный коэффициент при ренормированном кубическом ангармонизме  $\nu_0 = 7.3 \cdot 10^{-3}$  определяется с помощью приближенного интегрирования по частотам функции Грина /1/ с массовым оператором /4/ /см. /1//. В отличие от ISC теория, где уравнение самосогласования решается в псевдогармоническом приближении ( $r_0 = 0$ ), мы учитываем в уравнении /5/ члены второго порядка, поскольку их вклад сравним с членами первого порядка: для главных, линейных по  $(1/\lambda)$  членов он составляет ~20% при  $x=0$ :  $y = (1/\lambda) \{1 - 1/\lambda(7/4 - 54\nu_0)\}$  и увеличивается с ростом  $x$ .

Изотермические модули упругости кристалла определяются статическим ( $\omega = 0$ ) длинноволновым ( $q \rightarrow 0$ ) пределом функции Грина /1/ по наклону соответствующих дисперсионных кривых /3/. Учитывая /2/, /4/, для модулей упругости  $C_{\alpha\beta}$  получаем:

$$C_{\alpha\beta} = \frac{C_{\alpha\beta}}{C_{\alpha\beta}^{(0)}} \cdot \frac{a^2(x)}{1+x} \left[ 1 - \frac{z}{\lambda} \frac{y^2(x)}{a^5(x)} S_{kj} \right], \quad /6/$$

где  $C_{\alpha\beta}^{(0)}$  - модули упругости в гармоническом приближении, соответствующие частотам  $\omega_{qj}$  в /2/,  $S_{kj} = \lim_{q \rightarrow 0} S_{qj}(\omega = 0)$ ,  $\vec{k} = \vec{q}/|\vec{q}|$ . Для кубической решетки

все три независимых модуля  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$  определяются при соответствующем выборе направления вектора  $\vec{k}$  и поляризации  $j$ : при  $\vec{k} = \vec{k}_1$  вдоль оси (100) продольная мода  $j = L$  определяет  $C_{11}$ , поперечная  $j = T = C_{44}$ ; при  $\vec{k} = \vec{k}_2$  вдоль оси (110)  $j = T_1$  определяет  $C_{44}$ ,  $j = T_2$  - модуль  $(C_{11} - C_{12})/2$ . Соответствующие суммы  $S_{kj}$ , вы-

численные путем однократного суммирования по  $10^3$  точек в зоне Бриллюэна, равны:

$$S_{k_1 L}^* = 1,73 \cdot 10^{-3}, \quad S_{k_1 T}^* = 1,36 \cdot 10^{-3}, \quad S_{k_2 T_2}^* = 1,05 \cdot 10^{-2}.$$

На рис. 1 представлена зависимость модулей упругости  $C_{11}^*$  /кривые 1,2/ и  $(1/2)(C_{11}^* - C_{12}^*)$  /кривые 3,4/ от объема  $v^* \cdot (\ell/r)^3 = (1+x)^3$  для  $\lambda = 2,6$  /кривые 1,3/ и  $\lambda = 12$  /кривые 2,4/. Сплошной линией показаны модули упругости, вычисленные согласно /6/ с параметром перенормировки  $\gamma$  в /2/-/4/, определяемым из уравнения самосогласования /5/. Пунктирной линии соответствуют модули упругости, вычисленные для параметра  $\gamma$ , определяемого из условий самосогласования в псевдогармоническом приближении  $\nu_0 = 0$  в /5//, как в ISC теории /2/. Окончания кривых, отмеченные крестиком, соответствуют точкам динамической неустойчивости решетки, когда в уравнении самосогласования /5/ появляются комплексные решения /4/. Как следует из рисунка, поведение модулей упругости существенно зависит от способа самосогласования: при решении уравнения /5/ в псевдогармоническом приближении ( $\nu_0 = 0$ ) модули упругости остаются действительными до значительно больших значений объема  $v^*$  и могут обращаться в нуль /как  $C_{11}$  для  $\lambda = 12$  - кривая 2/, приводя к появлению "мягкой воды", как и для классических кристаллов, рассмотренных в /3/. Сокращение области динамической устойчивости решетки при учете членов второго порядка в уравнении самосогласования /5/ легко понять, учитывая обсуждение после формулы /5/.

На рис. 2 приведена зависимость давления  $P = (z\ell/6v) \phi'(x)$  от объема  $v^*$ ,  $P^* = P/(D\sqrt{2}/r_0^3)$ , для тех же значений параметра  $\lambda$  при двух различных способах самосогласования. Отметим, что решетка при малых значениях  $\lambda$  устойчива лишь при положительных внешних давлениях /4/.

Как следует из приведенных расчетов, члены второго порядка играют важную роль при решении уравнения самосогласования, определяющего область динамической устойчивости решетки и характер поведения модулей

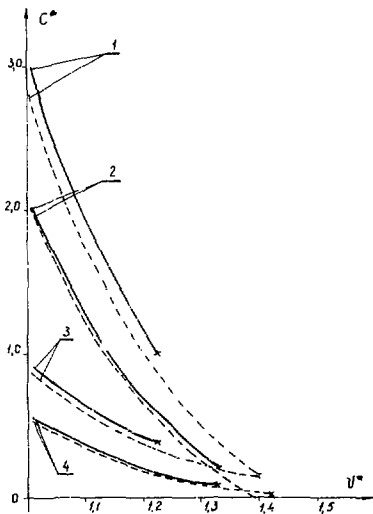


Рис. 1. Зависимость модулей упругости от приведенного объема

1 -  $C_{11}^*$   ${}^4\text{He}$ , 2 -  $C_{11}^*$  Ne, 3 -  $\frac{C_{11}^* - C_{12}^*}{2}$   ${}^4\text{He}$ ,

4 -  $\frac{C_{11}^* - C_{12}^*}{2}$  Ne

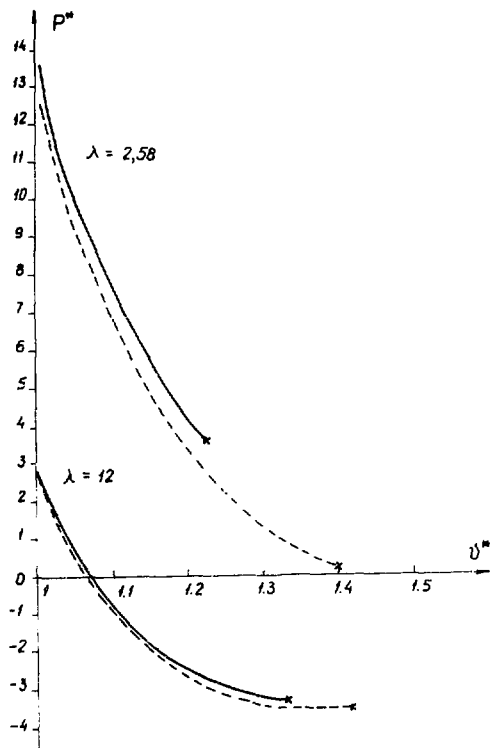


Рис. 2. Зависимость приведенного давления от приведенного объема.



упругости. Учет членов третьего и более высоких порядков самосогласованной теории существенно не меняет результатов ввиду малости их вклада, порядка  $(1/\lambda)^n$ ,  $n \geq 2$ , хотя при выполнении численных расчетов для модулей упругости и других физических величин их следует принимать во внимание наряду с членами второго порядка в уравнении самосогласования /см. /6/ /.

Отметим, что приведенные в этой работе вычисления для модельного потенциала Морзе, не имеющего "твердой сердцевинны", не могут быть непосредственно использованы для сравнения с реальными кристаллами гелия, где учет этой части взаимодействия особенно важен /см. /7/ /.

#### Литература

1. N.R. Werthamer. *Am.J.Phys.*, 37, 763 (1969).
2. V.V. Goldman, G.K. Horton, M.L. Klein. *Phys.Rev.Lett.*, 21, 1527 (1968); *Phys.Lett.*, 28A, 341 (1968). *J.Phys.Chem.Sol.*, 31, 2241 (1970); *Phys. Rev.*, B2, 4995 (1970); M.L. Klein, T.R. Koehler, R.L. Gray. *Phys.Rev.*, B7, 1571 (1973).
3. Н.М. Плакида, В.Л. Аксенов. *Препринж ОИЯИ*, P4-6862, Дубна, 1972; *ФТТ*, 15, 2575 /1973/.
4. T. Siklós, V.L. Aksienov. *Phys.Stat.Sol.*, 50B, 171 (1972).
5. R.A. Guyer. *Sol.St.Phys.*, 23, 413 (1969).
6. П.С. Зырянов, В.В. Кондратьев, И.Г. Кулиев. *ФММ*, 34, 263 /1972/; *ФММ*, 35, 233 /1973/.
7. T.R. Koehler, N.R. Werthamer. *Phys.Rev.*, A3, 2074 (1971), *ibid.* A5, 2230 (1972).  
H.R. Glyde, F.C. Khona. *Canad.J.Phys.*, 50, 1143, 1152 (1972).

Рукопись поступила в издательский отдел  
5 октября 1973 года.