Письма в ЖЭТФ, том 26, вып. 5, стр. 349 – 352 *5 сентября 1977 г.*

О КРИТЕРИИ ПАЙЕРЛСОВСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ МЕТАЛЛАХ

А.М.Габович, Э.А.Пашицкий

Рассмотрен фононный спектр сильно анизотропного квазиодномерного металла с учетом изгибных колебаний отдельных цепочек и получен критерий пайерлсовской неустойчивости. Показано, что при достаточно сильном электрон-фононном взаимодействии пайерлсовский переход является "трехмерным" фазовым переходом первого рода. Наряду с этим возможен структурный фазовый переход второго рода, сопровождающийся смягчением низкочастотной поперечно-изгибной фононной моды.

В последнее время интенсивно изучается явление пайерлсовской неустойчивости в квазиодномерных системах [1, 2]. В большинстве теоретических работ, посвященных исследованию пайерлсовского перехода, фононный спектр считался трехмерным и изотропным (см., например, [3 - 6]). Кроме того, ни в одной из работ, за исключением [4], не было проведено последовательное рассмотрение пайерлсовской неустойчивости в рамках одних и тех же приближений для электрон-фононного и кулоновского взаимодействий (чаще всего роль последнего сводилась к перенормировке константы связи).

В настоящей работе рассмотрена задача о структурном фазовом переходе в квазиодномерных проводниках с сильно анизотропными электронными и упругими свойствами на основе континуальной модели металла [4, 7], которая единым самосогласованным образом описывает колебания решетки и электронной плотности и является справедливой в данном случае, поскольку период волн зарядовой плотности (ВЗП), равным $L = \pi/2k_F$ (где k_F – фермиевский импульс), значительно превышает период исходной решетки. Предполагая достаточно большую величину матричных элементов межцепочечных перескоков [8], для вычис-

© Издательство "Наука", Письма в ЖЭТФ, 1977 г.

ления критической температуры пайерлсовского перехода T_c будем пользоваться приближением самосогласованного поля [1].

Линеаризованная система уравнений для малых упругих колебаний в анизотропном металле приведена в [4, 9]. Для кристаллов с тетрагональной симметрией, которая характерна, в частности, для $K_2Pt(CN)_4Br_{0,3} \times 3H_2O$ (KCP) [10], отличны от нуля следующие модули упругости:

$$\left.\begin{aligned} &\lambda_{zzzz} \equiv \beta; \quad \lambda_{xxxx} = \lambda_{yyyy} \equiv a_2; \quad \lambda_{xyxy} \equiv a_1; \\ &\lambda_{xxzz} = \lambda_{yyzz} \equiv \nu; \quad \lambda_{xzxz} = \lambda_{yzyz} \equiv \mu; \quad \lambda_{xxyy} \equiv \delta. \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

В квазиодномерных кристаллах, состоящих из слабо связанных между собой линейных цепочек атомов или молекул, выполняется условие:

$$\beta >> a_1, a_2, \delta, \mu, \nu. \tag{2}$$

Наряду с акустическими колебаниями здесь необходимо учитывать также изгибные колебания отдельных цепочек [11]. Ввиду слабой (прыжковой) проводимости поперек цепочек, для описания электрон-фононного взаимодействия достаточно учесть только продольную компоненту деформационного потенциала $\Lambda_{zz} \equiv \Lambda_{\parallel}$. В результате, дисперсионное уравнение для спектра фононов принимает вид

$$\omega^6(\mathbf{k}) + B(\mathbf{k})\omega^4(\mathbf{k}) + C(\mathbf{k})\,\omega^2(\mathbf{k}) + D(\mathbf{k}) = 0. \tag{3}$$

В случае чисто продольных колебаний ($k_\perp = 0$) свободный член $D(\mathbf{k}) \equiv 0$, так что условие пайерлсовской неустойчивости, соответствующее обращению в нуль из частот за счет логарифмической особенности поляризационного оператора одномерного электронного газа в точке $k_z = 2k_F$, принимает вид: $C(\mathbf{k}) = 0$. Отсюда следует выражение для критической температуры пайерлсовского перехода

$$T_{c\parallel} \cong E_F \exp\{-1/g_\parallel\}; \qquad g_\parallel = \nu_F \frac{2N_o\Lambda_\parallel + \dfrac{(\Lambda_\parallel k_F)^2}{\pi e^2} - \beta}{\left(N_o + \Lambda_\parallel \dfrac{k_F^2}{\pi e^2}\right)^2}, \tag{4}$$

где ν_F – плотность состояний на ферми-поверхности, E_F – энергия Ферми, а N_o – концентрация электронов проводимости. Необходимо подчеркнуть, что при последовательном учете экранированного кулоновского взаимодействия главные члены порядка $\Pi_\parallel(2k_F) \approx \nu_F \ln(E_F/T)$ в $C(\mathbf{k})$ сокращаются, в силу чего структурный фазовый переход второго рода и возникновение продольной ВЗП с $\mathbf{q} = \{0, 0, 2k_F\}$ возможны лишь при условии (ср. с [4]):

$$2N_o\Lambda_\parallel + \frac{(\Lambda_\parallel k_F)^2}{\pi e^2} - \beta > 0. \tag{5}$$

Условие "трехмерной" структурной неустойчивости кристаллической решетки при $k \neq 0$ (но $k_\perp^2 << k_z^2$) соответствует появлению комплексных корней уравнения (3) и с точностью до членов $\sim(k_\perp/k_z)^4$ и $(\gamma^2 k_z^2/\beta\rho)^2$, где ρ – плотность кристалла, а γ^2 – пропорциональна изгибной жесткости цепочки атомов [11], сводится к приближенному равенству $B(\mathbf{k}) \cong 0$, из которого получаем:

$$T_c \cong E_F \exp\{-1/\nu_F V\}; \tag{6}$$

$$V = \frac{\left[2N_0\Lambda_\parallel + \dfrac{(\Lambda_\parallel k_F)^2}{\pi e^2} - \beta\right] - \left(\dfrac{k_\perp}{2k_F}\right)^2\left[a_1 + a_2 + \mu - \dfrac{(\Lambda_\parallel k_F)^2}{\pi e^2}\right]}{N_0 + \left(\Lambda_\parallel \dfrac{k_F^2}{\pi e^2}\right)^2 + \left(\dfrac{k_\perp}{2k_F}\right)^2\left[2\left(N_0 + \Lambda_\parallel \dfrac{k_F^2}{\pi e^2}\right)^2 + \left(\dfrac{k_F^2}{\pi e^2}\right)^2\right]}. \tag{7}$$

Фазовый переход в диэлектрическое состояние возможен только при условии $V > 0$, которое является обобщением критерия (5). Так как при условии $B(\mathbf{k}) = 0$ ни один из корней уравнения (3) не обращается в нуль, то перестройка решетки происходит скачком, что соответствует фазовому переходу первого рода. Этот вывод согласуется с экспериментами [1], согласно которым гигантская коновская аномалия в КСР никогда не приводит к полному размягчению решетки ($\omega \neq 0$), а в TTF – TCNQ фазовый переход при $T = 38$К сопровождается гистерезисом [12]. Как следует из [7], при условии

$$(\Lambda_\parallel k_F)^2/\pi e^2 - a_2 - \mu > 0 \tag{8}$$

константа связи V растет с увеличением $k_\perp$, так что более выгодной является трехмерная ВЗП, наблюдавшаяся как в КСР, так и в TTF – – TCNQ [1, 2].

Наряду с рассмотренными выше структурными переходами, при условии $D(\mathbf{k}) = 0$ в точке $k_z = 2k_F$ для $k_\perp \neq 0$ возможен еще один фазовый переход второго рода, сопровождающийся обращением в нуль частоты поперечно-изгибной моды колебаний. Критическая температура такого перехода равна

$$T_c' \cong E_F \exp\left\{-\frac{\beta(2k_F)^2 + \mu k_\perp^2}{\nu_F \Lambda_\parallel^2}\right\}. \tag{9}$$

Такая ситуация, по-видимому, имеет место в КСР, где после структурного перехода при $T \approx 120$К [13] наблюдался скачок модуля Юнга при $T \approx 35$К [14].

Институт физики
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
30 апреля 1977 г.
После переработки
6 июля 1977 г.

Литература

[1] Л.Н.Булаевский. УФН, 115, 263, 1975.

[2] A.J.Berlinsky. Contempor. Phys.,17, 331, 1976.

[3] W.Dieterich. Zeit. f. Physik, 270, 239, 1974.

[4] И.О.Кулик. ЖЭТФ, 66, 2224, 1974.

[5] A.Bjiliš, K.Saub. S.Barisic. Nuovo Cim., 23B, 102, 1974.

[6] K.Levin. D.L.Mills, S.L.Cunningham. Phys. Rev., B10, 3821; 3832, 1974.

[7] И.О.Кулик. ЖЭТФ, 47, 2159, 1964; ФММ, 21, 321, 1966.

[8] В.Н.Пригодин, Ю.А.Фирсов. Письма в ЖЭТФ, 25, 90, 1977.

[9] В.П.Силин. ЖЭТФ, 38, 977, 1960.

[10] H.J.Deiseroth. H.Schulz. Phys. Rev. Lett., 33, 963, 1974.

[11] И.М.Лифшиц. ЖЭТФ, 22, 471, 475, 1952.

[12] T.Ishiguro, S.Kagoshima, H.Anzai. J. Phys. Soc. Jap., 41, 351, 1976.

[13] K.Franulovic, D.Djurek. Phys. Lett., 51A, 91, 1975.

[14] M.Barmatz, L.A.Testardi, A.F.Garito, A.J.Heeger. Sol. State Comm., 15, 1299, 1974.