

АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ  
ДОНЕЦКИЙ  
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ АН УКРАИНЫ

На правах рукописи

ОРЕЛ Сергей Михайлович

НЕЛИНЕЙНЫЕ ЭФФЕКТЫ,  
ОБУСЛОВЛЕННЫЕ ВНЕШНИМИ НАПРЯЖЕНИЯМИ  
И ИЗМЕНЕНИЯМИ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ,  
В ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ СПЕКТРЕ И СВОЙСТВАХ МЕТАЛЛА

Специальность 01.04.07 — «Физика твердого тела»

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

ДОНЕЦК — 1993



AB 28.747

Работа выполнена в Донецком физико-техническом институте

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор Антонов В. Н.

доктор физико-математических наук, профессор Гришин А. М.

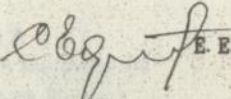
доктор физико-математических наук, профессор Макаров В. И.

Ведущая организация: НИИ физики при Ростовском и Д  
Госуниверситете

Защита состоится "23" декабря 1993 г. в 14<sup>30</sup> часов  
на заседании Специализированного Совета Д. 016.32.01 при ДОНТИ АН  
Украины по адресу: 340114, Донецк, ул. Р. Люксембург, 72.  
С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ДОНТИ АН Украины.

Автореферат разослан "22" ноября 1993 г.

Ученый секретарь  
Специализированного Совета  
кандидат физико-математических наук

 Е. Е. Соловьев

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы: Изучение решеточных свойств металлов (динамика решетки, упругие постоянные (УП), параметры решетки и т. д.) является одной из наиболее обширных и важных областей физики твердого тела. Расчет решеточных свойств кристаллов прежде всего требует подробного рассмотрения электрон-фононной системы. Само по себе последовательное самосогласованное описание свойств электронной и фононной систем конденсированного состояния является одной из центральных проблем в физике систем многих частиц. На многие вопросы, связанные с этой проблемой, до настоящего времени нет четких и точных ответов.

Возрастающая точность экспериментальных измерений позволяет наблюдать эффекты, создание адекватной теории которых требует выхода за рамки линейного приближения. Это связано как с измерением упругих постоянных (УП) высших порядков, так и с эффектами, обусловленными особенностями электронного строения реальных твердых тел (электронные топологические переходы (ЭТП), проявление неадиабатических состояний в фононном спектре и т. д.).

Исследование кристаллов с дефектами, неоднородно напряженных кристаллов приводит к необходимости создания теории неоднородно деформированного состояния. Такая теория, в первую очередь, должна устанавливать связь между упругими свойствами реального кристалла и идеального, что предполагает введение в рассмотрение УП высших порядков. В этой связи важным становится установление связи между УП, определенными при различных граничных условиях: адиабатическими, изотермическими, "смешанными".

На упругие свойства металла оказывают влияние и особенности его электронной структуры. В напряженном кристалле эти особенности наиболее сильно проявляются при изменении топологии поверхности Ферми (ПФ). Поскольку узкий слой электронных состояний вблизи уровня Ферми является неадиабатическим, важным оказывается и учет неадиабатичности. Развитие теории неадиабатических состояний представляется весьма актуальным для изучения таких явлений, как сверхпроводимость, решеточная неустойчивость и др.

Настоящая работа ставит своей целью исследование влияния неоднородных деформаций, особенностей электронной структуры и электрон-ионного взаимодействия на решеточные и электронные свой-

ства металла, имея ввиду использование полученных результатов для объяснения и предсказания экспериментально наблюдаемых эффектов.

В соответствии с этим были поставлены и решены следующие задачи:

- дальнейшее развитие представлений об энергии электронно-ионной системы металла, не опирающихся на адиабатический принцип;
- исследование роли неадиабатических состояний в формировании колебательных спектров металла в условиях ЭТП;
- разработка псевдопотенциальных моделей для расчета термодинамических свойств электронной подсистемы металла в окрестности ЭТП и условий реализации таких переходов;
- развитие нелинейной теории термоупругости, использующей для описания упругих свойств неоднородно деформированных кристаллов УП идеального кристалла и параметры неоднородных деформаций.

Научная новизна результатов состоит в том, что впервые

1. Вычислены вклады неадиабатических состояний электронно-ионной системы, отличные от ангармонизмов, в упругие постоянные металла и проанализирована их температурная зависимость.

2. Исследовано влияние величины зонной щели на поведение упругих постоянных второго и третьего порядков в зависимости от температуры при топологическом переходе.

3. Теоретически исследованы условия реализации топологических переходов в Al, In и сплавах  $In_{1-x}Mg_x$ . Объяснен характер изменения связности поверхности Ферми индия при гидростатическом сжатии  $p \sim 6 \cdot 10^8$  Па.

4. Получено уравнение распространения упругих волн в неоднородно деформированных кристаллах и найдена связь упругих постоянных неоднородно деформированного кристалла с упругими постоянными идеального и параметрами неоднородной деформации.

Достоверность научных допущений и выводов, полученных в диссертации, обеспечивается использованием современных методов теоретического анализа, выбором адекватного математического аппарата, строгой обоснованностью приближений и допущений. Залогом достоверности является совпадение асимптотик и предельных случаев (если таковые имеются) с известными ранее, экспериментальное подтверждение ряда предсказанных эффектов.

Практическая значимость. Полученные результаты могут быть использованы экспериментаторами при планировании исследований зонной структуры, наблюдения проявления неадиабатических состоя-

ний в энергетическом спектре и термодинамических свойствах металлов. Предложенные простые методы расчета условий, при которых возможен электронный топологический переход, позволяют существенно сузить область поиска. Результаты теоретического исследования распространения звука в напряженном кристалле используются при обработке соответствующих экспериментов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Теория спектров электрон-ионной системы металла без разделения состояний на адиабатические и неадиабатические.
2. Теория эффектов неадиабатичности в окрестности ЭТП: особенности поведения динамического поляризационного оператора и групповой скорости фононов.
3. Результаты расчетов параметров ЭТП в алюминии, индии и сплавах  $In_{1-x}Mg_x$  и объяснение характера перехода, наблюдаемого в индии при  $p \sim 0 \cdot 10^8$  Па.
4. Обобщение нелинейной теории термоупругости на случай неоднородных деформаций и следствия из общей теории: соотношения между УП, матрица распространения звука в неоднородном теле.

Апробация работы. Результаты исследований докладывались на различных конференциях, совещаниях и семинарах, в том числе на республиканских семинарах "Влияние высоких давлений на вещество" (Кадивелли, 1978 г.; Одесса, 1980, 1986 гг.); всесоюзных совещаниях "Методы расчета энергетической структуры и физических свойств кристаллов" (Киев, 1979, 1987 гг.); всесоюзных совещаниях по физике и технике низких температур (Харьков, 1980 г.; Донецк, 1990 г.; Казань, 1992 г.); ХХ Конференции стран СЭВ по физике и технике низких температур (Вроцлав, 1981 г.); школе-семинаре по квантовой химии твердого тела "Энергетическая структура неметаллических кристаллов с различным типом химической связи" (Черновцы, 1989 г.); всесоюзных (пекаровских) совещаниях по теории полупроводников (Донецк, 1989 г.; Львов, 1992 г.); конференции по квантовой химии твердого тела (Рига, 1990 г.); II советско-итальянском симпозиуме по математическим проблемам статистической физики (Киев, 1985 г.); Украинско-французском симпозиуме "Condensed Matter: Science & Industry" (Львов, 1993 г.);

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы, содержащего 195 литературных источников. Работа выполнена на 244 страницах, включая 13 иллюстраций.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дается краткий обзор теоретических и экспериментальных результатов, предшествующих выполнению работ, представленных в диссертации, раскрыта актуальность темы, определены цели работы и круг рассматриваемых задач, сформулированы основные результаты и положения, выносимые на защиту.

В первой главе на основе "плазменной" модели металла получена совместная система самосогласованных уравнений для функций Грина в обратном пространстве. (Аналогичная система уравнений в прямом пространстве была получена Е. Г. Максимовым (Максимов Е. Г. *Электрон-фононное взаимодействие и сверхпроводимость* // Труды ФИАН СССР. - 1975. Т. 86. - С. 101-139.) методом функционального дифференцирования.) Эта система позволяет определять спектры элементарных возбуждений металла, не разбивая состояния электрон-ионной системы на адиабатические и неадиабатические. Как известно, электрон-ионная система не может быть самосогласованно сведена к системе "голых" электронов и фононов с определенным взаимодействием между ними. Это обстоятельство создает определенные трудности при выборе "затравочных" бозе-возбуждений в металлах, поскольку введение "затравочных" фононов автоматически предполагает участие электронов в их образовании. В "плазменной" модели в качестве "затравочных" бозе-возбуждений выступают плазменные колебания ионов в нейтрализующем однородном фоне. Плазменные колебания ионов не являются фононами, но фононы формируются в результате перенормировки их электрон-электронным и электрон-ионным взаимодействиями. Такое описание позволяет корректно определить колебательные спектры металла, равноправно рассматривая все состояния системы, и легко выделить (в случае необходимости) адиабатические фононы.

Для описания электрон-ионной системы металла используется модель, в которой рассматривается взаимодействие ионов с электронами проводимости. Возмущением электронов остова при смещении ядер пренебрежем. Принцип Паули учитывается требованием того, что волновые функции валентных электронов должны быть ортогональны волновым функциям электронов остова (Представление о "слабом" псевдопотенциале). Пренебрежем также поляризацией ионного остова из-за большой энергии, необходимой для его возбуждения. Этот эф-

факт может играть существенную роль при определении взаимодействия между ионами. Его можно приближенно учесть, включив в ионный потенциал  $\hat{H}_0$ , наконец, не учитываются эффекты, связанные со спином электрона и магнитным взаимодействием электронов проводимости. "Затравочными" частицами в нашем случае являются невзаимодействующие электроны и плазменные колебания ионов в однородном нейтрализующем статическом фоне, что соответствует гамильтониану

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}}^0 a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \hat{H}_{pl}$$

Гамильтониан взаимодействия включает в себя электрон-электронное и электрон-ионное взаимодействия

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} = & \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}''} v_c(\vec{k}) a_{\vec{k}-\vec{k}}^+ a_{\vec{k}'+\vec{k}} a_{\vec{k}''}^+ a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}, \vec{q} \neq 0} v(\vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^+ a_{\vec{k}} - \\ & - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{q}'} v(\vec{q}+\vec{q}') (\vec{q}+\vec{q}')_{\alpha} u_{\vec{q}\alpha}^+ a_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{q}'}^+ a_{\vec{k}} - \\ & - \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{q}', \vec{q}''} v(\vec{q}+\vec{q}'+\vec{q}'') (\vec{q}+\vec{q}'+\vec{q}'')_{\alpha} (\vec{q}+\vec{q}'+\vec{q}'')_{\beta} u_{\vec{q}\alpha}^+ u_{\vec{q}'\beta}^+ a_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{q}'+\vec{q}''}^+ a_{\vec{k}} \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\vec{q}$  - вектор обратной решетки,  $a_{\vec{k}}^+$ ,  $a_{\vec{k}}$  - операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии  $\vec{k}$ ,  $v_c(\vec{k}) = 4\pi e^2 / k^2$ ,  $V = V_0 N$  - полный объем системы ( $V_0$  - объем элементарной ячейки,  $N$  - число ячеек),  $v(\vec{k}, \vec{k}+\vec{q})$  - матричный элемент электрон-ионного взаимодействия. По дважды повторяющимся греческим индексам проводится суммирование от 1 до 3.

Первый член в (1) есть электрон-электронное взаимодействие. Второе и последующие слагаемые происходят от разложения структурного фактора в ряд по смещениям ионов и, начиная с третьего, описывают электрон-фононное взаимодействие. Разложение структурного фактора в ряд по  $\vec{u}$  возможно из-за наличия в теории малого параметра  $\epsilon = \langle u^2 \rangle / a^2 \ll \langle u^2 \rangle$  - средний квадрат смещения,  $a$  - постоянная решетки). Амплитуды этого взаимодействия пропорциональны фактору псевдопотенциала  $v(\vec{q})$ .

В дальнейшем мы ограничились случаем непереходного моноатомного металла и приближением локального псевдопотенциала. Если учитывать прямое рассеяние электронов только на брэгговских плоскостях  $\pm \vec{q}/2$ , то для одночастичных функций Грина электронов и ионных смещений

$$G_{\vec{k}, \vec{k}'}(t-t') = -i \langle T \{ a_{\vec{k}}(t) a_{\vec{k}'}^\dagger(t') \} \rangle,$$

$$D_{\vec{q}}^{\alpha\beta}(t-t') = -i \langle T \{ u_{-\vec{q}\alpha}(t) u_{\vec{q}\beta}(t') \} \rangle.$$

получим самосогласованную систему уравнений

$$\left\{ \begin{aligned} G_{\vec{k}, \vec{k}'}(\omega) &= G_{\vec{k}}^{(0)}(\omega) \left[ 1 + S(\vec{k}, \vec{k}; \omega) G_{\vec{k}, \vec{k}'}(\omega) + \right. \\ &\quad \left. + S(\vec{k}, \vec{k}+\vec{q}; \omega) G_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}}(\omega) + S(\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}; \omega) G_{\vec{k}-\vec{q}, \vec{k}}(\omega) \right], \\ G_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}}(\omega) &= G_{\vec{k}+\vec{q}}^{(0)}(\omega) \left[ S(\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}; \omega) G_{\vec{k}, \vec{k}}(\omega) + S(\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}-\vec{q}; \omega) G_{\vec{k}-\vec{q}, \vec{k}}(\omega) \right], \\ G_{\vec{k}-\vec{q}, \vec{k}}(\omega) &= G_{\vec{k}-\vec{q}}^{(0)}(\omega) \left[ S(\vec{k}-\vec{q}, \vec{k}; \omega) G_{\vec{k}, \vec{k}}(\omega) + S(\vec{k}-\vec{q}, \vec{k}-\vec{q}; \omega) G_{\vec{k}-\vec{q}, \vec{k}}(\omega) \right], \\ D_{\vec{q}}^{\alpha\beta}(\omega) &= d_{\vec{q}}^{\alpha\beta}(\omega) + d_{\vec{q}}^{\alpha\gamma}(\omega) \Pi^{\gamma\delta}(\vec{q}; \omega) D_{\vec{q}}^{\delta\beta}(\omega). \end{aligned} \right. \quad (2)$$

Система уравнений (2) позволяет определить одночастичные спектры элементарных возбуждений в электрон-ионной системе. Все состояния электрон-ионной системы (2) учитываются одинаковым образом и нет необходимости разделять их на адиабатические и неадиабатические. Заметим, что из этой системы уравнений естественным образом можно выделить задачу о зонной структуре и задачу о фоновом спектре в адиабатическом приближении.

В низшем приближении по псевдопотенциалу и по  $\epsilon$  собственно-энергетические части  $S(\vec{k}, \vec{k}; \omega)$  равны форм-факторам псевдопотенциала в узлах  $\vec{q}$  и  $-\vec{q}$ :  $S(\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}; \omega) = S(\vec{k}-\vec{q}, \vec{k}; \omega) = v(\vec{q})$ ;  $S(\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}; \omega) = S(\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}; \omega) = v(-\vec{q})$ ;  $S(\vec{k}, \vec{k}; \omega) = S(\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}+\vec{q}; \omega) = S(\vec{k}-\vec{q}, \vec{k}-\vec{q}; \omega) = 0$ . Собственно-энергетическая часть  $\Pi^{\gamma\delta}(\vec{q}; \omega)$  в том же приближении есть

$$\Pi^{\gamma\delta}(\vec{q}; \omega) = \Pi_1^{\gamma\delta}(\vec{q}; \omega) + \Pi_2^{\gamma\delta}(\vec{q}; \omega),$$

$$\Pi_1^{\gamma\delta}(\vec{q}; \Omega) = \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} v(\vec{q}+\vec{q}') v(-\vec{q}-\vec{q}') (\vec{q}+\vec{q}')_{\gamma} (\vec{q}+\vec{q}')_{\delta} \chi(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}'; \Omega), \quad (3)$$

$$\Pi_2^{\gamma\delta}(\Omega, \Omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q} \neq \Omega} \frac{v(\vec{q})}{\varepsilon(\vec{q}; \Omega)} \sigma_{\gamma} \sigma_{\delta} \sum_k \int \frac{1 d\omega}{\pi} G_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}; \omega}$$

где введена обобщенная восприимчивость электронного газа  $\chi$ , которую можно выразить через поляризационный оператор (ПО)  $\pi(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}'; \Omega)$  и обратную матрицу диэлектрической проницаемости  $\varepsilon^{-1}(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}'; \Omega)$

$$\chi(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}'; \Omega) = \sum_{\vec{q}''} \pi(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}''; \Omega) \varepsilon^{-1}(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}'; \Omega). \quad (1.3.5)$$

Закон дисперсии фононов определяется полюсами функции  $\hat{D}_{\vec{q}}(\Omega)$ , которая в гармоническом приближении есть

$$\hat{D}_{\vec{q}}(\Omega) = \left[ \hat{1} \Omega^2 - \hat{\varepsilon}(\vec{q}; \Omega) \right]^{-1}, \quad (4)$$

где  $\hat{1}$  - единичная матрица,  $\hat{\varepsilon}(\vec{q}; \Omega)$  - динамическая матрица кристалла. Используя последнее уравнение системы (4), для динамической матрицы имеем

$$\hat{\varepsilon}(\vec{q}; \Omega) = \hat{D}_{\vec{q}}(\vec{q}) + \hat{\Pi}(\vec{q}; \Omega).$$

(Представление для  $\hat{D}_{\vec{q}}(\Omega)$  аналогично (4) с заменой  $\hat{D}(\vec{q}; \Omega)$  на  $\hat{D}_{\vec{q}}(\vec{q})$  - динамическую матрицу плазменных колебаний). Частотная зависимость динамической матрицы определяется зависимостью от  $\Omega$  электронного вклада  $\hat{\Pi}(\vec{q}; \Omega)$ . Таким образом, для определения фононного спектра наиболее важным является вычисление  $\hat{\Pi}(\vec{q}; \Omega)$ , что, сводится к вычислению ПО. В дальнейшем мы будем использовать для  $\pi(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}''; \Omega)$  приближение Хартри

$$\pi_0(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}''; \Omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}'} \frac{1 d\omega}{\pi} G_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{q}', \vec{k}+\vec{q}+\vec{q}'}^{(\omega+\Omega)} G_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{q}', -\vec{q}'}^{(\omega)} \quad (5)$$

Проводя в (5) интегрирование по частоте, получим для действительной части  $\pi_0(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}''; \Omega)$

$$\text{Re} \pi_0(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}''; \Omega) = \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}'} A_{\vec{k}}(-\vec{q}+\vec{q}'-\vec{q}'') A_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{q}+\vec{q}'}(\vec{q}'') \times$$

$$\times \frac{\sum_{\vec{k}}^n \sum_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{q}'}^{-n}}{E_{\vec{k}+\vec{q}+\vec{q}'} - E_{\vec{k}} - \hbar\Omega} \quad (6)$$

Важность учета неадиабатических состояний прослеживается уже в приближении почти свободных электронов. В этом приближении колебательный спектр определяется из системы нелинейных уравнений

$$\Omega^2 \delta_{\alpha\beta} - D_{\alpha\beta}^{\alpha\beta}(\vec{q}) - \text{Re} \Pi^{\alpha\beta}(\vec{q}, \Omega) = 0.$$

Нелинейность этих уравнений вызвана частотной зависимостью электронного вклада  $\Pi^{\alpha\beta}(\vec{q}; \Omega)$ , обусловленную запаздывающим характером электрон-ионного взаимодействия при колебаниях ионов в динамическую матрицу. Это приводит к тому, что качественно изменяется поведение групповой скорости фононов в окрестности  $q \sim 2k_F$ . Вместо логарифмических (коновских) особенностей, имеющих место в адиабатической теории, появляются особенности полюсного типа  $\sim 1/\sqrt{1\delta}$ .

Для зонных электронов важную роль в формировании особенностей колебательного спектра играют два обстоятельства: во-первых, точный учет неадиабатических состояний, лежащих вблизи ПФ и, во-вторых, близость этих состояний к брэгговской плоскости (БП), т. е. неадиабатические состояния, находящиеся в перестроенной области спектра.

Из общего выражения для  $\pi_{\alpha}(\vec{q}+\vec{q}, \vec{q}+\vec{q}'; \Omega)$  (6) следует, что особенности в ПО связаны с существованием полюсов в подынтегральных функциях. Эти полюса определяются уравнением, корни которого дают критические значения  $z_0$  переменной интегрирования  $z$ , при которых происходит изменение аналитического поведения интеграла (6). При изменении импульса фонона  $\vec{q}$  изменяется и величина  $z_0$ . Для фононов с импульсами  $\vec{q}$  такими, что  $z_0$  находится внутри области интегрирования или вне ее, результат является аналитической функцией  $\vec{q}$ . Результирующая особенность в  $\pi_{\alpha}(q+q, q+q'; \Omega)$  возникает для фононов с критическими импульсами  $q_0$ , для которых  $z_0$  лежит на границе области интегрирования  $z=z_0$  или попадает на БП  $z_0=1/\sqrt{1\delta}$ . Это имеет место, когда волновой вектор фонона связывает две точки ПФ с коллинеарными нормальными к поверхностям. Ситуация здесь адекватна особенностям Ландау S-матрицы в квантовой теории поля.

При вычислении диагонального элемента  $\pi_{\alpha}(\vec{q}, \vec{q}; \Omega)$  исследованы два различных случая:  $\vec{q} \neq \vec{q}'$  ( $q_x \neq 0, q_y = 0$ ),  $\vec{q} \neq \vec{q}'$  ( $q_x = 0, q_y \neq 0$ ). При

$q_x \rightarrow 0$  ( $\vec{q} \parallel \vec{q}$ ) подынтегральная функция в (1.3.3) имеет неопределенность вида 0/0. Вычисление диагональных и недиагональных элементов ПО проводилось в окрестности ЭТП для больших ( $q_x \sim g$ ) и малых импульсов фонона ( $\delta q_x \ll g$ ). Показано, что в случае больших импульсов фонона для открытой ПФ и электронной полости во второй зоне Бриллюэна (ЗБ) наличие неадиабатических состояний вблизи БП приводит к существованию в  $n_0(\vec{q}, \vec{q}; \Omega)$  аномального логарифмического вклада, который отсутствует в адиабатической теории. Этот вклад в  $n_0(\vec{q}, \vec{q}; \Omega)$  по порядку величины равен

$$\delta n_0(\vec{q}, \vec{q}; \Omega) \sim w_g \sin \left| \frac{\delta q_x - \delta q_c}{\delta q_x + \delta q_c} \right|, \quad (7)$$

( $w_g = |V(g)| / \sqrt{E_g^0}$ ,  $E_g^0 = \hbar^2 (\vec{q}/2)^2 / 2m$ ) и достигает наибольшего значения при появлении электронного кармана во второй ЗБ.

В случае малых импульсов фонона процессы переброса дают такой же вклад с противоположным знаком, поэтому в  $n_0(\vec{q}, \vec{q}; \Omega)$  слагаемое (7) отсутствует.

Недиагональные элементы  $n_0(\vec{q} + \vec{q}', \vec{q} + \vec{q}'; \Omega)$  так же содержат слагаемые вида (7) того же порядка, что и диагональные. Несмотря на логарифмическую расходимость в ПО, в энергетическом спектре фононов нет этой особенности, что связано с экранированием псевдопотенциала. Поскольку  $\chi(q; \Omega) \sim n(q; \Omega) e^{-1}(q; \Omega)$ , то логарифмическую расходимость (7) содержат и числитель, и знаменатель. При  $\delta q_x + \delta q_c$  эти расходимости сокращаются.

Существование логарифмической сингулярности в ПО в случае  $\vec{q} \parallel \vec{q}$  связано с наличием в окрестности ЭТП неадиабатических состояний электронов, у которых компонента групповой скорости  $v_x$  становится порядка скорости фонона.

В случае  $\vec{q} \perp \vec{q}$  для закрытой ПФ имеется одно значение импульса фонона  $q_x = s$ , при котором критические точки лежат на границе области интегрирования  $z_c = z_0$ . Условие  $z_c = z_0$  реализуется только для нормальных процессов с поглощением фонона, а процессы переброса не вносят неаналитичности в  $n_0(\vec{q}, \vec{q}; \Omega)$ , поскольку у соответствующих интегралов для любых импульсов фонона  $z_c^{\mp}$  находятся внутри области интегрирования. Значение  $n_0(\vec{q}, \vec{q}; \Omega)$  при  $q_x + s = 0$  равно  $F_0^+$ , а при  $q_x + s = 0 - F_0^-$ . Отличие функции  $F_0^-$  от  $F_0^+$  составляет

$$-(4q_x g)^{-1} \sqrt{w_g/2} \left[ (q_x - s)^2 + d_0^2 \right] \arccos \frac{d_0}{((q_x - s)^2 - d_0^2)^{1/2}}$$

( $d_0 = 2\sqrt{E_{кр}^{(s)} - E_F}$ ). Этой добавкой будет определяться величина скачка в производной  $\partial n_0 / \partial q_x$ . Особая точка  $q_x = s$  существенно опре-

деляется неадиабатическими электронными состояниями и в адиабатическом приближении такой неаналитичности нет.

В случае открытой ПФ возможны две ситуации в зависимости от соотношения между  $s$  и диаметром "шейки" ПФ  $d_1$ . Если  $s < d_1$ , то неаналитичность в  $\pi_0(\vec{q}, \vec{q}; \Omega)$  вносят как нормальные процессы, так и процессы переброса. Однако последние дают вклад только накануне появления второй зоны в узкой области  $\sqrt{v}v_g - s < d_1 < \sqrt{v}v_g + s$  изменения параметра  $d_1$ . Для нормальных процессов имеется два значения  $q_x = d_1 \mp s$ , при которых критические точки  $z_c$  лежат на границе области интегрирования ( $z_c = 1$ ). В области  $q_x < d_1 - s$ ,  $\pi_0(\vec{q}, \vec{q}; \Omega) \approx \text{Const}$ . Для  $d_1 - s < q_x < d_1 + s$  величина  $\pi_0(q, q; \Omega)$  убывает с ростом  $q_x$  до точки  $q_x = d_1 + s$ . При дальнейшем увеличении  $q_x$  убывание  $\pi_0(q, q; \Omega)$  происходит с другой скоростью. Такое поведение  $\pi_0(q, q; \Omega)$  означает, что в производной  $\partial \pi_0(q, q; \Omega) / \partial q$  имеются скачки  $\sim -\sqrt{v}v_g / 2$  для импульсов  $q_x = d_1 \mp s$ . Процессы переброса вносят в  $\pi_0(q, q; \Omega)$  неаналитический вклад  $\sim a^2 \ln a$ , но скачек производной  $\sim a$ , т.е. мал в меру малости  $a \ll \sqrt{2}v_g$ . В момент образования открытой ПФ может быть реализована ситуация  $s > d_1$ . Здесь имеется два значения импульса фонона  $q_x = s \mp d_1$ , для которых  $z_c = 1$ . Характер поведения  $\pi_0(q, q; \Omega)$  несколько изменяется, но величина скачка в  $\partial \pi_0(q, q; \Omega) / \partial q_x$  имеет тот же порядок, что и для нормальных процессов при  $s < d_1$ .

При образовании электронной полости во второй ЗБ в теории наряду с  $s$  и  $d_1$  появляется дополнительный параметр  $d_2$  - диаметр полости. В зависимости от соотношения между этими параметрами возможны шесть различных случаев. Наибольший интерес представляют два из них, которые могут быть реализованы независимо от величины  $w_g$ . В первом случае  $s < d_2$ ,  $2s < (d_1 - d_2)$  имеется четыре значения импульса фонона  $q_x = d_2 \mp s$  и  $q'_x = d_1 \mp s$ , при которых  $z_c$  лежит на БП, а  $\pi_0(q, q; \Omega)$  изменяет аналитическое поведение. В производных  $\partial \pi_0(q, q; \Omega) / \partial q_x$  имеются скачки  $\sim \sqrt{v}v_g$ . Процессы переброса вносят малый вклад, как и в случае открытой ПФ,  $\sim a^2 \ln a$ . Для  $d_2 < s < d_1$ ,  $2s < (d_1 - d_2)$ , при заполнении второй зоны наступает момент, когда нарушается условие  $d_2 < s$ . Последний случай может быть реализован только на начальном этапе образования электронной полости во второй ЗБ. Остальные четыре случая могут иметь место для довольно слабых  $w_g$ :  $V(q) / E_F \sim (10^{-6} - 10^{-5})$ .

Что касается недиагональных элементов  $\pi_0(\vec{q} + \vec{q}', \vec{q} + \vec{q}'; \Omega)$ , то по

величине они оказываются  $\sim v(q)$ , но содержат особенности того же типа, что и  $\pi_0(q, q; \Omega)$ . Как показывают численные расчеты поведение  $\pi_0(q, q; \Omega)$  в случае  $q_x \neq 0$ ,  $q_y \neq 0$  имеет такой же характер, как и для случая  $q_x = 0$ ,  $q_y \neq 0$ . С ростом  $q_x$  угол между касательными справа и слева от "излома" уменьшается.

Как показывает анализ, в групповой скорости фононов при  $q \sim q_0$  имеются особенности полусного типа. Аналогичное рассмотренному здесь изменение топологии ПФ происходит под давлением в индии и алюминии. Поэтому можно ожидать проявления указанных особенностей в групповой скорости фононов в этих металлах. В частности, рассматриваемый Бровманом Е. Г. и Каганом Ю. М. (Бровман Е. Г., Каган Ю. М. Фононы в непереходных металлах // УФН. - 1974. - Т. 112, № 3. - С. 369-426., рис. 9) эксперимент по  $d\omega/dq$  в Al содержит вблизи точки  $\Gamma$  особенности, которые можно трактовать с рассматриваемых здесь позиций.

Полученные здесь результаты могут служить основой для объяснения аномалий в спектре, например, ниобия (Немошкаленко В. В., Жалко-Титаренко А. В., Перлов А. Я., Сущук А. А., Павловский С. В. Возможная неадиабатичность электрон-ионной системы ниобия // Металлофизика. - 1991. - Т. 13, № 7. - С. 114-118). В работе Powell B. N., Martel P., Woods A. D. B. Lattice dynamics of Niobium-Molibden alloys (Phys. Rev. - 1968. - V. 171., № 3. - P. 727-734) обнаружено, что фононный спектр ниобия содержит ряд аномалий, в том числе и аномалии групповой скорости фононов. Расчет электронной структуры ниобия проведенный Немошкаленко В. В. и др. показал, что она содержит области конечных размеров, для которых адиабатическое приближение не справедливо. Как следует из результатов этой работы, возможная неадиабатичность электрон-фононной системы ниобия объясняет особенности фононного спектра при 10 мэВ для  $\vec{q} \parallel [1001]$  и при 10-21 мэВ для  $\vec{q} \parallel [1101]$ . Однако для однозначных выводов нужны дополнительные более детальные эксперименты.

Основываясь на результатах, полученных Б. Т. Гейликманом и М. Ю. Рейзером, проведен анализ температурных зависимостей термодинамического потенциала  $\Omega_{ep}$  и УП  $C_{ijkl}$  металла, обусловленных электрон-фононным взаимодействием. Показано, что при низких температурах  $T \ll \theta_D$  ( $\theta_D$  - температура Дебая) электрон-фононное взаимодействие приводит к перенормировке  $\sim v^4 T^2$  ( $v = u/v_F$ ,  $u$  - скорость продольного звука,  $v_F$  - скорость электронов на ПФ) вклада чисто электронного происхождения в термодинамический потенциал и упру-

гие постоянные. При высоких температурах  $t_{2e}$ , электрон-фононным взаимодействием перенормируется решеточный вклад на величину  $\sim \nu^2 T$ . Для металлов, в которых ПФ близка к сфере,  $\nu \sim 10^{-2}$ . В поливалентных металлах для определенных участков ПФ параметр  $\nu$  увеличивается и может достигать значений  $\nu \sim 1$ . В частности, это имеет место при ЭТП. Это означает, что вклады в  $c_{ijkl}$  от  $\rho_{op}$  необходимо учитывать в равной степени со вкладами электронного и решеточного происхождения.

Поскольку основной вклад в термодинамические свойства дают "перестроенные" области электронного спектра, важно было рассмотреть в той же модели ЗБ поведение особенностей, присущих ЭТП. Во второй главе детально исследуется термодинамика электронной подсистемы, когда в металле происходит ЭТП. Для этого вычислены вклады в плотность и число состояний, в термодинамический потенциал от электронных состояний, прилегающих к БП. Детально изучено поведение УП второго (УВП) и третьего (УПП) порядков в широком интервале изменения внешних напряжений и температур.

Плотность состояний квазичастиц в кристалле при определенных энергиях  $E_{кр}$  имеет особенности, обусловленные его трансляционной симметрией (Van Hove L. Accuracy of singularity in elastic frequency distribution of a crystal // Phys. Rev. - 1953. - V89. - P. 1189-1193). Эти особенности могут проявляться в кинетических и термодинамических характеристиках, в сечениях рассеяния электронов, света и др. В случае электронов проводимости условием проявления особенностей плотности состояний в термодинамических свойствах является совпадение энергии Ферми  $E_F$  с критической энергией  $E_{кр}$ . Такое равенство в общем случае не выполняется, но при специальных условиях, например, при воздействии на кристалл внешних напряжений  $t_{ij}$ , может случиться, что  $E_F(t_{ij}) = E_{кр}(t_{ij})$ . Определяемые из этого соотношения значения компонента  $t_{ij}$  есть те значения, при которых реализуется своеобразный фазовый переход, получивший название фазового перехода а  $\frac{1}{2}$  рода или фазового перехода Лифшица (Лифшиц И.М. Об аномалиях электронных характеристик металлов в области больших давлений // ЖЭФ. - 1960. - Т. 39, №. - С. 1569-1593). Поскольку причиной названных переходов является изменение связности ПФ, в последнее время эти переходы все чаще называют ЭТП. Теории таких переходов посвящено значительное количество статей (см. обзор Каганов М.М., Лифшиц И.М. Электронная теория металлов и геометрия // УФН. - 1979. - Т. 129, №3. - С. 487-529.), основанных на фе-

номенологических представлениях. Одновременно с нашими разработками была предложена псевдопотенциальная модель для расчета ПФ сплавов (Вуль Д. А., Кривоглаз Н. А. Улучшенная теория возмущений для электронной энергии // *Металлофизика*. - 1982. - Т. 4, №. - С. 3-12), в которой выделяется область состояний с  $|E(\vec{k}) - E_{кр}| \ll V_g$ . Отличие заключается в том, что используемая нами модель позволяет в рамках единой аналитической зависимости описывать все состояния электронов проводимости.

В основу развиваемой здесь микроскопической теории ЗТП положена модель, в которой точно учитывается влияние на закон дисперсии  $E(\vec{k})$  электронов двух эквивалентных параллельных БП  $\mathcal{S}$ . В этой модели не рассматривается влияние на термодинамику металла изменений топологии ПФ вблизи ребер и вершин ЗБ. Предполагается, что ЗТП под действием внешних возмущений происходит на двух указанных БП, а влияние остальных может быть учтено по теории возмущений. Модель, в которой учитывается влияние на  $E(\vec{k})$  только одной БП (Williams A.R., Weare D. *Validity of perturbation theory .I. The single band gap model.* - *J. Phys.*, 1970, С3, N2, p. 386-397), более проста, но она не совместима с соображениями симметрии ПФ относительно замены  $\vec{k}$  на  $-\vec{k}$ . Эта симметрия оказывается важной при исследовании неадиабатических состояний.

Необходимость точного учета когерентной перестройки закона дисперсии электрона около близкой к ПФ БП вызвана тем, что в области энергий  $|E(\vec{k}) - E_{кр}| \leq V_g$  обычно используемая теория возмущений по малому параметру  $V_g/E_F$  становится неприменимой.

На основе развитой теории исследовано влияние величины зонной щели на поведение упругих постоянных второго и третьего порядков в зависимости от температуры при топологическом переходе. Показано, что аномальная часть УПВП много меньше самих упругих постоянных кристалла ( $C_{ijkl} \sim 10^{10} + 10^{11}$  Па) даже при высоких температурах ( $\Delta/T \ll 1, \Delta = d/E_g, \tau = kT/E_g$ ) и малых  $a(\delta C_{ijkl} \sim a^4)$ . Иная ситуация у УПП. При низких температурах (но таких, что  $\Delta\tau$ ) их поведение существенно зависит от аномальной части  $\delta C_{ijklmn}$ , которая для малых  $a \approx 0,4$  нм ( $\delta C_{ijklmn} \sim a^{-6}$ ) может стать сравнимой с величиной  $C_{ijklmn} \sim 10^{11}$  Па. Такое различие в поведении УПВП и УПП вызвано тем, что, в согласии с общими представлениями о ЗТП, при  $T=0$  и  $\Delta \neq 0$   $\delta C_{ijkl} \sim \Delta^{1/2}$ , в то время как  $\delta C_{ijklmn} \sim \Delta^{-1/2}$ . Наиболее резко  $\delta C_{ijklmn}$  изменяются в области  $0 < -\Delta/\tau \leq 3$ , и это должно проявиться при измерениях величин  $C_{ijklmn}$ .

Особенности в поведении УП должны привести к аномалиям в матрице распространения звука. Собственные значения  $\rho w^2$  этой матрицы ( $\rho$  - плотность,  $w$  - величина, пропорциональная скорости звука) являются линейными комбинациями УПП. Аномальная часть  $\delta(\rho w^2)$ , следовательно, является функцией  $\delta c_{ijkl}$ :

$$\delta(\rho w^2) = \delta c_{ijkl} w_l w_k K_j K_i.$$

Здесь  $\vec{k}$  и  $\vec{w}$  - единичные векторы распространения и поляризации упругой волны.

Производная  $\rho w^2$  по тензору напряжений  $t_{ij}$  является функцией УПП, поэтому

$$\delta \left( \frac{d\rho w^2}{dt_{pq}} \right) = \delta c_{ijklmn} S_{mnpq}^T w_l w_k K_j K_i.$$

где  $S_{mnpq}$  - податливости.

Поскольку всегда  $\delta c_{ijkl} \ll c_{ijkl}$ , величина  $\rho w^2$  остается практически неизменной. Аномальное поведение производной  $\delta(\rho w^2)/dt_{pq}$  в окрестности топологического перехода приведет к резкому изменению наклона кривой  $\rho w^2(t_{ij})$  на участке  $0 < -\Delta/\tau < \Delta$ . Так как величины  $\delta c_{ijklmn}$  могут быть соизмеримы с  $c_{ijklmn}$ , наклон  $\rho w^2(t_{ij})$  будет наиболее заметно меняться у кристаллов с большими значениями  $g = 2\pi/a$ .

Для ряда металлов имеются теоретические расчеты зонной структуры, находящиеся в хорошем согласии с экспериментом. Как правило у простых металлов величина  $|v_g|/E_g$  оказывается порядка 0,01-0,1. Отсюда следует, что аномалии в  $d(\rho w^2)/dt_{ij}$  могут наблюдаться при температурах, достигающих десятков кельвин, а при больших  $|v_g|/E_g$  и малых  $a$  - вплоть до комнатных. Следует иметь в виду, что в области наиболее резкого изменения  $\delta c_{ijklmn}$  аномальный вклад  $\delta(d(\rho w^2)/dt_{pq}) \sim T^{-1/2}$ , т.е. с ростом температуры  $\delta(d(\rho w^2)/dt_{pq})$  уменьшается.

Если топологический переход индуцируется приложением к кристаллу внешних напряжений, то интервал напряжений  $\Delta\sigma$ , в котором резко изменяется наклон  $\rho w^2(t_{ij})$ , довольно узок. Величина  $\Delta\sigma$  зависит от температуры и упругих свойств кристалла. Даже при относительно высоких температурах  $\Delta\sigma \leq 10^8$  Па.

Здесь рассмотрены явления, связанные с изменением топологии ПФ на изолированных БП. В поливалентных металлах, в отличие от

исследованной ситуации. связность ПФ может изменяться вблизи углов и ребер ЗБ. Но и в этом случае при появлении (или исчезновении) новых зон поведение  $\rho w^2(t_{ij})$  качественно будет совпадать с рассмотренным. Количественный расчет аномальных вкладов при этом усложняется, однако и для таких металлов можно рассчитать величины воздействий, вызывающих ЭТП, и вычислить  $\delta(d\rho w^2/dt_{ij})$ .

В третьей главе рассчитаны величины одноосных напряжений, приводящих к изменению топологии ПФ алюминия и индия. Для  $In$  рассмотрен также случай гидростатического давления и влияние концентрации  $x$  магния в сплавах  $In_{1-x}Mg_x$ .

ЭТП могут быть вызваны разнообразными напряжениями (или деформациями) кристалла, хотя получающиеся в результате их действия изменения топологии ПФ сводятся к небольшому числу вариантов. Рассматривать все возможные напряжения и их следствия в кристаллах разной симметрии вряд ли разумно, поэтому мы ограничимся в этой работе исследованием гидростатического давления и некоторых, специально выбранных, одноосных нагрузок, имея в виду, главным образом, возможность экспериментального наблюдения предсказываемых переходов.

Экспериментально ЭТП впервые были обнаружены в некубических металлах  $In$ ,  $Tl$ ,  $Re$  (см. Макаров В.И. Влияние топологических особенностей энергетического спектра электронов проводимости на характеристики сверхпроводников // Автореферат докт. диссер. Свердловск. - 1973. - 28с.) при действии на них гидростатического давления. В кубических кристаллах отношение  $a/2k_0$  ( $a$  - модуль вектора обратной решетки,  $k_0$  - радиус ПФ свободных электронов) не зависит от давления, поэтому изменение топологии ПФ под давлением может иметь место только за счет изменения ширины щели, или, что тоже самое, за счет роста с давлением значения форм-фактора псевдопотенциала, ответственного за когерентные эффекты около близкой к ПФ БП. Этот эффект, по-видимому, наблюдается в  $Ca$  и  $Sr$ . В обнаруженных экспериментально ЭТП происходит изменение топологии малых участков ПФ. Это сильно затрудняет возможность выяснения характера изменения топологии поверхности по имеющимся экспериментальным данным, поэтому особую значимость приобретают теоретические расчеты.

Кроме давления, ЭТП могут быть индуцированы одноосными напряжениями и введением примесей. Наибольшие возможности по разнообразию таких переходов, по числу металлов, в которых можно изме-

нять связность ПФ, представляют одноосные напряжения.

Для щелочных металлов хорошо развита псевдопотенциальная теория. Поскольку ПФ находится внутри первой ЗБ, под действием одноосных напряжений в этих металлах может быть реализована ситуация, рассмотренная в главе 2. Это значит, что аномальные вклады в различные термодинамические характеристики при не очень больших напряжениях могут быть рассчитаны в модели, точно учитывающей влияние двух БП, на которых изменяется топология ПФ. Расчет напряжений, индуцирующих ЭТП, основанный на модели главы 2, проведен в /4/.

Иная ситуация складывается в поливалентных металлах. ПФ которых имеет сложный вид. Приведенные в главе 3 расчеты показывают, что наименьшие одноосные напряжения в Al и In (в случае In и давления), вызывающие ЭТП, реализуют изменение топологии ПФ вблизи пересечения трех БП. В секулярном уравнении, чтобы точно учесть все БП, примыкающие к точке изменения топологии ПФ, были оставлены те форм-факторы псевдопотенциала, для которых разложение в духе теории возмущений по  $V_{ij}/E_F$  оказывалось невозможным. Полученное таким образом секулярное уравнение решалось точно.

Имеющиеся теоретические и экспериментальные работы по исследованию зонной структуры ПФ Al и In позволили нам избежать громоздких вычислений матричных элементов псевдопотенциала и их производных по деформациям. Для вычисления, входящих в критерии изменения топологии ПФ величин как функций прикладываемых напряжений, использовалось линейное приближение по деформациям.

Нами предсказан характер изменения топологии ПФ Al и In под действием одноосных напряжений и вычислены величины необходимых напряжений. В работе *Overcash D.R., Tracy Davis et al. Stress-Induced Electronic Transition (2.5 order) in Al (Phys. Rev. Lett. -1981. -V. 46, -1981. -V. 46, N4. -P. 287-290)* было исследовано влияние растяжения вдоль  $\langle 110 \rangle$  на температуру сверхпроводящего перехода и кинетические характеристики вискозоров алюминия. Наблюдаемые изменения периода осцилляций термо-эдс в магнитном поле при увеличении  $\sigma$  свидетельствуют о топологическом переходе при  $\sigma = 5,4 \cdot 10^8$  Па. Авторы цитируемой работы связывают этот переход с разрывом кольца из  $\beta$ -трубок по сечению  $\alpha_1$ . Как показали расчеты, при растяжении вдоль  $\langle 110 \rangle$  должны последовательно наблюдаться два топологических перехода, при этом сначала происходит разрыв кольца по сечению  $\alpha_1$ , а затем исчезает электронный карман вблизи точки  $\Gamma$

(сечение  $\beta_1$ ). Что касается растяжения вдоль  $\{001\}$ , то в этом случае доступны экспериментальному наблюдению переходы, связанные с разрывом колец, образованных  $\alpha$ -трубками в окрестности точки  $w$  (сечения  $\alpha_2$  и  $\beta_2$ ).

Анализ поведения ПФ индия под давлением показал, что наблюдаемый под давлением  $p \sim 6$  кбар ЭТП связан с образованием электронного кармана в  $w$ -точке в третьей зоне.

Метод расчета, предложенный в главе 3, может быть применен и для других простых металлов как для предсказания возможных ЭТП, так и для выяснения характера изменений топологии ПФ, наблюдаемых экспериментально.

В четвертой главе развита нелинейная теория термоупругости реальных кристаллов, находящихся в произвольном напряженном состоянии. Показано, что УП неоднородно деформированного кристалла выражаются через комбинации чистых и "смешанных" УП различных порядков исходного идеального кристалла и тензор неоднородных деформаций. Выведено уравнение распространения упругой волны в неоднородно деформированном кристалле. В этом уравнении в качестве известных параметров используются УП идеального кристалла и тензор неоднородных дисторсий. Полученные уравнения состояния твердого тела и распространения упругих волн в реальных кристаллах позволяют, на наш взгляд, наиболее просто описывать как изменение упругих свойств материала, так и проводить теоретическое исследование различных колебательных процессов.

В деформированных материалах распространение упругих волн изучалось, как правило, с двух точек зрения. Во-первых, определялось влияние однородных статических деформаций на матрицу распространения звука. Во-вторых, теоретически исследовалось влияние слабо неоднородных напряжений на распространение упругих волн в изотропном материале. Эти исследования являются частными случаями развитой здесь теории.

Особенности, обусловленные неадиабатическими состояниями и ЭТП, могут проявляться в УПВ и УПП. Пятая глава посвящена обработке различных экспериментов по определению УП. В первых трех разделах рассмотрен случай однородных деформаций.

Одним из наиболее точных и получивших в настоящее время широкое распространение методов определения УП высших порядков в однородно напряженном идеальном кристалле является измерение зависимости скорости звука от прикладываемых напряжений. Как пока-

зано в [2], при обработке таких экспериментов важно учитывать отличие "смешанных" УППП от чисто адиабатических и изотермических. Понижение симметрии у смешанных УП усложняет процедуру обработки, поэтому для большинства групп Лауэ приведены таблицы производных собственных значений матрицы распространения звука по тензору напряжений, в которых учтено отсутствие полной симметрии Фойгта у "смешанных" УППП. Получены формулы, позволяющие вычислять вторые производные УПВП по компонентам тензора напряжений.

Амплитуда второй гармоники  $a_2$ , генерируемой входящей волной, зависит от УП третьего порядка. Следует отметить, что в этом случае пять УП всегда входят в  $a_2$  в виде четырех комбинаций:  $C_{225} + 2C_{144}$ ,  $C_{144} + 2C_{456}$ ,  $C_{225} - C_{144}$ ,  $C_{566} - C_{144}$  (Holt A.C. Two theoretical considerations for ultrasonic pulse measurements of third-order elastic constants for cubic crystals//J. Appl. Phys. - 1968. -V. 39, N7. -P. 3046-3048). Это не позволяет находить все  $C_{\alpha\beta\gamma}$  из измерений амплитуды  $a_2$ . Однако, не уступая по точности предыдущему, этот метод представляет собой альтернативный источник информации, что важно при оценке точности экспериментов. Приведенные в пятой главе формулы позволяют выбрать условия эксперимента так, чтобы провести сравнение с результатами предыдущего метода наиболее полно.

Статический метод измерения УПВП и УППП является наименее точным, но более простым, чем рассмотренные выше. Теория этого метода, предложенного в работе Hurnaghan F.D. *Finite deformation of an elastic solid*. (New York: Wiley, -1951. -261p.), была развита в работе [3]. Для иллюстрации возможностей такого способа измерения УПВП и УППП мы ограничились рассмотрением кубического кристалла.

В четвертом разделе найдено решение задачи о распространении звука в поле конечной периодической деформации. Такая деформация возникает в экспериментально наблюдаемых "волнах концентрации" примеси (Аракелян В.С., Аванян А.А., Сулян С.В. Диффузия примеси в поле стоячей ультразвуковой волны//Известия АН Армянской ССР. Физика. 1984. -Т. 19, №. -С. 340-342). Другой вид периодической деформации описывается стоячей волной. Наибольшие особенности при распространении звука наблюдаются, если параметры звуковой волны соизмеримы с масштабами изменения неоднородной деформации. В зависимости от вида деформации имеет место либо брэгтовское отражение, либо параметрический резонанс.

## ОБЩИЕ ВЫВОДЫ

1. Для анализа эффектов неадиабатичности получена полная система уравнений в терминах фурье-образов пропагаторов квазичастиц, позволяющая рассчитывать спектры электрон-ионной системы без разделения состояний на адиабатические и неадиабатические.

2. Исследован вклад неадиабатических состояний в динамическую восприимчивость зонных электронов и групповую скорость фононов при различных топологиях поверхности Ферми. Показано изменение логарифмического характера коновской особенности в групповой скорости фононов на сингулярность полюсного типа. Обнаружены логарифмический вклад в поляризационный оператор при импульсах  $\vec{q}$  фонона, коллинеарных вектору обратной решетки  $\vec{\phi}$ , и скачок производной от поляризационного оператора при  $\vec{q} \perp \vec{\phi}$ .

3. Вычислены неадиабатические вклады от электрон-фононного взаимодействия в термодинамический потенциал и упругие постоянные металла. Тем самым установлена возможность выхода за рамки приближения  $\kappa^6 \sim m/M$ , являющегося ограничением в адиабатическом приближении Борна-Опенгеймера. Исследованы температурные зависимости и указаны условия, при которых эти вклады существенны.

4. Для реалистической модели зонной структуры металла точно учтена когерентная перестройка вблизи брэгговских плоскостей и исследовано изменение свойств при электронном топологическом переходе.

5. Показано, что при переходе от закрытой поверхности Ферми к открытой и при исчезновении электронной полости статическая диэлектрическая функция  $\epsilon(q)$  содержит слагаемое, пропорциональное  $d^{3/2}$  ( $d = |E_{\text{кр}} - E_F|$  - расстояние между уровнем Ферми и критической энергией). Полученное выражение для  $\epsilon(q)$  переходит в известную формулу Линдхардта, если положить форм-фактор псевдопотенциала  $V_q$  равным нулю.

6. Исследовано поведение упругих постоянных второго и третьего порядков при изменении топологии поверхности Ферми в зависимости от температуры.

7. Рассчитаны величины одноосных напряжений, индуцирующих электронные топологические переходы, и предсказана эволюция поверхности Ферми в третьей зоне алюминия и индия при одноосном

сжатии и растяжении вдоль  $\langle 100 \rangle$  (Al, In) и  $\langle 110 \rangle$  (Al).

8. Исследованы изменения поверхности Ферми индия при наложении гидростатического давления и сплавов  $In_{1-x}Mg_x$  при различных значениях концентрации  $x$  магния. Выявлена природа электронного топологического переход в In, наблюдаемого экспериментально при сжатии  $p = 6 \cdot 10^8$  Па. Показано, что в этом случае происходит образование электронного кармана вблизи точки  $w$  в третьей зоне Бриллюэна.

9. Выведено нелинейное уравнение распространения упругих волн в неоднородных материалах и материалах с неоднородными деформациями при произвольном источнике таких деформаций.

10. Установлена связь упругих постоянных неоднородно деформированного кристалла с упругими постоянными идеального и характеристиками неоднородных деформаций.

11. Получены выражения, позволяющие находить упругие постоянные высших порядков из экспериментов по распространению волн малой амплитуды в произвольно напряженном кристалле. Учтено отсутствие полной фойгтовской симметрии у смешанных упругих постоянных. Развита теория статического метода измерения упругих постоянных третьего порядка.

Совокупность полученных результатов свидетельствует, по нашему мнению, что в диссертации развивается по существу новое направление: количественное исследование проявления нелинейных эффектов в атомных и электронных свойствах металлов.

Основные результаты диссертации изложены в следующих публикациях:

1. Zarochentsev E. V., Orel S. M., Varyukhin V. N. Elastic constants of a stressed crystal. I. General theory // Phys. Stat. Sol. (a). - 1979. - v. 52, N2. - P. 453-462.
2. Zarochentsev E. V., Orel S. M., Varyukhin V. N. Elastic constants of a stressed crystal. II. Cubic crystal // Phys. Stat. Sol. (a). - 1979. - v. 53, N1. - P. 75-85.
3. Zarochentsev E. V., Orel S. M. Elastic constants of a stressed crystal. III. Static method of defining isothermal elastic constants of third order // Phys. Stat. Sol. (a). - 1980. - v. 57, N1. - P. 137-141.
4. Зароченцев Е. В., Орел С. М., Теплов С. В. Изменение топологии

- поверхности Ферми простых металлов при одноосных напряжениях // ФТТ. - 1980. - Т. 22, №1. - С. 24-30.
5. Барьяхтар В. Г., Зароченцев Е. В., Орел С. М. Микроскопическая теория свойств простых металлов при изменении топологии поверхности Ферми // ФММ. - 1981. - Т. 51, №1. - С. 7-15.
  6. Еременко Т. М., Зароченцев Е. В., Орел С. М. Фазовые переходы в щелочных металлах, индуцированные внешним напряжением // ФТВД. - 1981. - В. 6. - С. 45-55.
  7. Зароченцев Е. В., Орел С. М. Электронно-топологические переходы в алюминии и индии. Расчет напряжений переходов // ФММ. - 1984. - Т. 58, №1. - С. 31-36.
  8. Zarochentsev E. V., Mostovoi V. M., Orel S. M. The Fermi surface of indium and indium-based alloys // Sol. state com. - 1985. - V. 53, №7. - P. 595-598.
  9. Zarochentsev E. V., Orel S. M., Koshergin I. V. Elastic constants of a stressed crystal. V. Harmonic generation // Phys. Stat. Sol. (a). - 1986. - v. 94, №1. - P. 105-111.
  10. Zarochentsev E. V., Orel S. M., Yakovets A. Yu. Elastic constants of a stressed crystal. IV. Sound propagation matrix // Phys. Stat. Sol. (a). - 1986. - V. 94, №2. - P. 515-521.
  11. Зароченцев Е. В., Орел С. М. Топологические переходы в monoатомных металлах IIIa группы // ФТВД. - 1986. - в. 22. - С.
  12. Барьяхтар В. Г., Зароченцев Е. В., Орел С. М. Особенности дисперсической функции при топологическом переходе и их проявление в термодинамике металла // Препринт ИТФ-87-90Р. Киев. - 1987. - 16с
  13. Зароченцев Е. В., Орел С. М. Аномальное поведение упругих постоянных при изменении топологии поверхности Ферми // Металлофизика. - 1988. - Т. 10, №5. - С. 7-12.
  14. Зароченцев Е. В., Орел С. М., Степанчук Ю. С. Пространственная дисперсия упругих свойств кристалла при неоднородных деформациях // ФТВД. - 1988. - в. 27. - С. 55-60.
  15. Зароченцев Е. В., Орел С. М., Степанчук Ю. С. Распространение упругих волн малой амплитуды в неоднородно деформированном стержне // ФТВД. - 1988. - в. 29. - С. 30-36.
  16. Драгунов И. Е., Зароченцев Е. В., Орел С. М. Неадиабатические фононы в простых металлах // ФММ. - 1989. - Т. 67, №5. - С. 837-844.
  17. Zarochentsev E. V., Orel S. M., Stepanchuk Y. S. Elastic pro-

perties of in homogeneously deformed crystals // Phys.stat. sol. (a). -1989. -v.116, №2. -P.293-303.

18. Драгунов И. Е., Орел С. М., Яковец А. Ю. Термодинамика взаимодействующих электронов и фононов // Физика и техника высоких давлений. - 1989. Т. 31. - С.15-21.
19. Драгунов И. Е., Зароченцев Е. В., Орел С. М. Неадиабатичность в поляризационном операторе // ФТТ. -1990. -Т. 31, №1. -С.314-315.
20. Зароченцев Е. В., Орел С. М., Степанчук Ю. С. Отражение упругих волн от границы двойникования кубических кристаллов // ФТВД. - 1990. -в. 33. -С. 21-23.
21. Драгунов И. Е., Зароченцев Е. В., Орел С. М. Влияние неадиабатических состояний на колебательный спектр решетки металла // ФТВД. - 1992. - Т. 2. №. С. 31-50.

---

Подп. в печать 16.11.93. Формат 60x84 1/16. Бумага типографская.  
Офсетная печать. Усл. печ. л. I, 39. Усл. кр.-отт. I, 63. Уч.-изд. л. I, 55.  
Тираж 100 экз. Заказ № 4-6983.

340114, Донецк, ул. Люксембург, 72

---

ДМАПП, 340050, Донецк, ул. Артема, 96



464279

AB 28.74

**AB 28.747**