

**В. Г. Вакс, С. П. Кравчук. А. В. Трефилов.** М и к р о с к о п и ч е -  
с к а я   т е о р и я   а н г а р м о н и ч е с к и х   э ф ф е к т о в   в   щ е -  
л о ч н ы х   и   О Ц К   щ е л о ч н о з е м е л ь н ы х   м е т а л л а х .   А н г а р -  
м о н и ч е с к и е   э ф ф е к т ы   (АЭ)   в   д и н а м и к е   и   т е р м о д и н а м и к е   м е т а л л о в   в а ж н ы   д л я  
и х   в ы с о к о т е м п е р а т у р н ы х   с в о й с т в ,   в   ф и з и к е   м я г к и х   м о д   и   в   д р у г и х   я в л е н и я х .  
К о л и ч е с т в е н н ы х   д а н н ы х   о б   АЭ   п о к а   н е м н о г о ,   а   т е о р е т и ч е с к и е   о ц е н к и   ч а с т о

неопределенны и противоречивы<sup>1, 2</sup>. Щелочные металлы являются одними из наиболее удобных объектов для изучения АЭ, и есть ряд указаний на то, что характер и относительный масштаб АЭ (например, вблизи точки плавления  $T_m$ ) в них и в других металлах одинаков. Это подтверждается, в частности, нашими расчетами для щелочно-земельных металлов. Поэтому расчеты<sup>1-5</sup> и эксперименты<sup>6-9</sup> для щелочных металлов можно рассматривать и как источник информации об общих особенностях АЭ в металлах.

В работах<sup>1-5</sup> на основе развитой ранее псевдопотенциальной модели, дающей весьма точное описание свойств щелочных металлов (см., например,<sup>10</sup> и литературу там), детально исследовались следующие АЭ:

1. Анггармонические сдвиги частот  $\Delta\omega_i(T) = \omega_i(T) - \omega_i(0)$  и затухание  $\Gamma_i(T)$  фононов<sup>х</sup>.

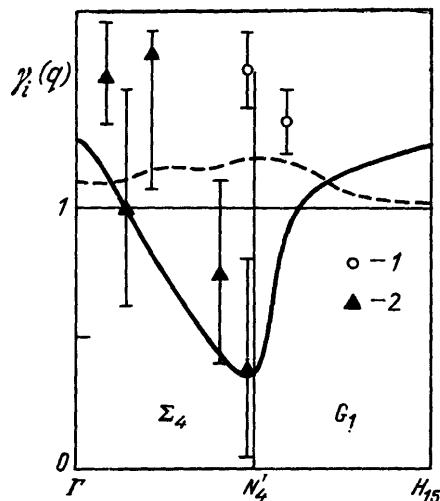
2. Влияние давления на АЭ и температурная зависимость параметров Грюнрайзена<sup>3</sup>  $\gamma_i(T) = -\partial \ln \omega_i(T) / \partial \ln V$ .

3. Модули упругости третьего порядка<sup>4</sup>  $c_{ijk}$  и температурная зависимость упругих модулей второго порядка<sup>5</sup>  $c_{ij}(T)$ .

4. АЭ в термодинамике<sup>2</sup> — в свободной энергии, теплоемкости, тепловом расширении и т. д.

5. Аномалии АЭ для «мягких» фононов, связанных с мартенситными фазовыми переходами (ФП)<sup>1, 3</sup>.

Расчеты<sup>1-5</sup> показали, что основной вклад в АЭ вносят мягкие фононы (в рассматриваемых ОЦК металлах — в окрестности поперечной ветви  $\Sigma_4$ ,



Параметры Грюнрайзена  $\gamma_i$  для фононов ветвей  $\Sigma_4$  и  $G_1$  в ОЦК щелочных металлах.

Теоретические кривые<sup>3</sup>: штриховая — калий,  $T = 0$ ; сплошная — калий,  $T = 299$  К. Эксперимент: 1 — калий<sup>9</sup>,  $T = 4,2$  К; 2 — натрий<sup>6</sup>,  $T = 295$  К.

т. е.  $TA_1$  [110]), что является, видимо, общим свойством АЭ в кристаллах с мягкими модами<sup>11</sup>. При этом вид и масштаб АЭ для мягких и для остальных, «нормальных», фононов различны. Частоты  $\omega_i$  нормальных фононов с ростом  $T$  падают, а величины  $\delta_i = \Delta\omega_i(T)/\omega_i(0)$ ,  $\eta_i = \Gamma_i(T)/\omega_i(0)$  и  $\Delta\gamma_i(T) = \gamma_i(T) - \gamma_i(0)$  невелики. Так, при  $T = T_m$   $\delta_i = -(0,1-0,15)$ ,  $\eta_i = 0,05-0,1$ ,  $\Delta\gamma_i = 0,1-0,2$ . В то же время для мягких  $TA_1$  ( $\xi$ ,  $\xi$ , 0)-фононов с  $\xi = qa/2\pi \gtrsim 0,2$  (где  $a$  — постоянная ОЦК решетки): а) частоты  $\omega(0, T)$  с ростом  $T$  не падают, а растут (что характерно для мягких мод, связанных с ФП<sup>11</sup>, здесь — из ОЦК в плотноупакованные фазы, ГПУ, ГЦК, R9); б) параметры Грюнрайзена  $\gamma_i$  резко падают с ростом  $T$  (см. рисунок); в) относительное затухание  $\eta_i$  при немалых  $T$  значительно; так,  $\eta_i(T_m) \sim 0,3-0,4$ .

В экспериментах<sup>6-8</sup> предсказание а) для Na и Li было подтверждено. Наблюдались также весьма малые значения  $\gamma_i$  для коротковолновых  $TA_1$ -фононов при комнатных  $T$  в Na в 2—3 раза меньшие, чем при низких  $T$  в К (см. рисунок). Поскольку все фононные свойства Na и K подобны<sup>1-5, 10</sup>,

то эти данные, по-видимому, подтверждают также и предсказание б), хотя желательны, конечно, прямые измерения зависимостей  $\gamma_i(T)$ . Отметим еще, что найденная в <sup>3</sup> резкая зависимость величин  $\delta_i, \eta_i$  мягких мод от объема  $V$  (проявляющаяся и в больших значениях  $d\gamma_i/dT$ ) указывает на важность электрон-ионных взаимодействий, вкладов энергии зонной структуры в свойства мягких мод: в чисто ионной решетке  $\delta_i, \eta_i \sim V^{-1/3}$ , т. е. меняются с  $V$  очень медленно.

Расчеты <sup>4</sup> модулей  $c_{ijk}$  (коэффициентов при  $u_i u_j u_k$  в разложении свободной энергии по деформациям  $u_i$ ) дают для их отношений к обычным модулям  $c_{ij}$  значения  $c_{ijk}/c_{ij} = 2-4$ . Но для сдвиговой деформации и, соответствующей длинноволновым ТА-фононам, оказывается,  $c_{uuu}/c_{uu} = -(20-30)$ , что отражает малость энергетического барьера по  $u$ , тенденцию кристалла к соответствующему ФП. Высокотемпературная асимптотика для модулей сдвига,  $c_{ij}(T) \approx c_1 - Tc_2$ , начинается уже при очень низких  $T \ll 0,1T_D$ , где  $T_D$  — температура Дебая <sup>5</sup>. Это связано с определяющим вкладом мягких фононов в данные АЭ и показывает, что наличие подобных зависимостей  $c_{ij}(T)$ , характерное для многих металлов и сплавов, может указывать на присутствие в них мягких мод.

Расчеты <sup>2</sup> вкладов АЭ в теплоемкость  $C_p$  позволили, в частности, выделить из наблюдаемых  $C_p^{exp}$  вклады равновесных дефектов решетки и оценить из них энергии  $E_{IV}$  и энтропии  $S_{IV}$  рождения вакансий. Оценки <sup>2</sup>, выполненные в предположении малых  $S_{IV} \ll 1$ , дали небольшие значения  $E_{IV} = 0,15 - 0,2$  эВ. Однако в микроскопических расчетах <sup>12</sup>, выполненных в той же модели, было найдено  $E_{IV} = 0,25 - 0,35$  эВ, и  $S_{IV}$ , по оценкам авторов <sup>12</sup>, также не мало:  $S_{IV} = 3-4$ . Эти немалые  $E_{IV}$  и  $S_{IV}$  согласуются как с оценками из  $C_p^{exp}$ , так и с другими экспериментами <sup>2</sup>.

Недавние измерения <sup>13-16</sup> указали на сходство фононных спектров ОЦК щелочно-земельных и щелочных металлов. В связи с этим модель и методы работ <sup>1, 3</sup> были применены к расчетам  $\Delta\omega_i, \Gamma_i$  и  $\gamma_i$  в ОЦК Ca, Sr и Ba. Результаты иллюстрируются таблицей, где  $\delta_i^{an} = (\Delta_i^3(T) + \Delta_i^4(T))/\omega_i(0)$ ,  $\Delta_i^3$

Относительные сдвиги частот  $\delta_i$ , затухание  $\eta_i$  и параметры Грюнрайзена  $\gamma_i$  фононов при  $T = T_m$

Фонон	$10^4 \delta_i^{an}(T_m)$				$10^2 \eta_i(T_m)$		$\gamma_i(T_m)$			
	K	Ba	Ca	Sr	K	Ca	K	Ba	Ca	Sr
$H_{15}$	-10	-7	-9	-11	6,2	5,1	1,3	1,5	1,6	1,7
$P_4$	-2,2	-0,8	0,3	1,7	5,8	5,7	1,3	1,5	1,5	1,4
$N_1'$	-1,8	-1,7	-1,8	-2,3	4,8	6,8	1,5	1,6	1,7	1,8
$N_3'$	-8,4	-6,2	-7,3	-9,7	7,7	5,5	0,9	1,1	1,4	1,8
$N_4'$	21	24	41	98	36	45	0,3	0,5	-0,6	-1,4

и  $\Delta_i^4$  — вклады в сдвиг частоты от трех- и четырехфононных процессов, определенные в <sup>1</sup>, а значения  $T_m$  для K, Ba, Ca и Sr равны 337, 998, 1112 и 1045 K. Видно, что относительный масштаб АЭ в K и Ba сходен, а в ряду Ba — Ca — Sr он растет, отражая уменьшение в этом ряду стабильности ОЦК фазы. Видно также, что обсуждавшиеся мягкомодовые аномалии АЭ а — в) здесь выражены еще более ярко, и параметры Грюнрайзена  $\gamma(N_4')$  в Ca и Sr при  $T = T_m$  отрицательны. В связи с этим отметим, что большие отрицательные  $\gamma_i = -(30-40)$  наблюдались для мягких акустических фононов, связанных с мартенситными ФП <sup>17,18</sup> в  $Nb_3Sn$  и сплавах In — Tl, так что резкое ангармоническое уменьшение  $\gamma_i$  может быть характерным для широкого класса мягких мод, связанных с ФП.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vaks V. G., Kravchuk S. P., Trefilov A. V. // J. Phys. Ser. F. 1980. V. 10. P. 2105.
2. Vaks V. G., Kravchuk S. P., Trefilov A. V. // Ibidem. P. 2325.
3. Вакс В. Г., Кравчук С. П., Трефилов А. В. // ФТТ. 1979. Т. 21. С. 3370.
4. Зароченцев Е. В., Сафронов В. П., Трефилов А. В. // ФНТ. 1977. Т. 3. С. 209.
5. Vaks V. G., Zarochentsev E. V., Kravchuk S. P., Safronov V. P. // J. Phys. Ser. F. 1978. V. 8. P. 725.
6. Blaschko O., Krexner G. // Phys. Rev. Ser. B. 1984. V. 30. P. 1667.
7. Ernst G., Artner C., Blaschko O., Krexner G. // Ibidem. 1986. V. 33. P. 6465.
8. Smith H. G. // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 1228.
9. Meyer J., Dolling G., Kalus J., Vettier C., Paureau J. // J. Phys. Ser. F. 1976. V. 6. P. 1899.
10. Братковский А. М., Вакс В. Г., Трефилов А. В. // ЖЭТФ. 1984. Т. 88. С. 2141.
11. Вакс В. Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. — М.: Наука, 1973.
12. Братковский А. М., Зейн Н. Е. // ФТТ. 1984. Т. 26. С. 2561.
13. Buchenau U., Heiroth M., Shober H. R., Evers J., Oehlinger G. // Phys. Rev. Ser. B. 1984. V. 30. P. 3502.
14. Mizuki J., Chen Y., Ho K. M., Stassis C. // Ibidem. 1985. V. 32. P. 666.
15. Heiroth M., Buchenau U., Shober H. R., Evers J. // Ibidem. 1986. V. 34. P. 6681.
16. Mizuki J., Stassis C. // Ibidem. 1985. V. 32. P. 8372.
17. Chang Z. P., Barsch G. R. // Ibidem. 1980. V. 22. P. 3342.
18. Brassington M. P., Saunders G. A. // Proc. Roy. Soc. Ser. A. 1983. V. 387. P. 283.

53(048)

**НАУЧНАЯ СЕССИЯ ОТДЕЛЕНИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ И АСТРОНОМИИ  
И ОТДЕЛЕНИЯ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ АКАДЕМИИ НАУК СССР  
(25-26 ноября 1987 г.)**

25 и 26 ноября 1987 г. в Институте физических проблем им. С. И. Вавилова АН СССР состоялась научная сессия Отделения общей физики и астрономии АН СССР. На сессии были заслушаны доклады:

*25 ноября*

1. А. А. Чернов. Поверхностное плавление и смачивание.
2. А. П. Леванюк. Несоразмерные фазы в реальном кристалле.

*26 ноября*

3. Р. А. Сюняев. Сверхновая в Большом Магеллановом Облаке и ее рентгеновское излучение (теория и первые результаты наблюдений).
4. Г. С. Иванов-Холодный. Проблемы солнечно-земной физики и исследования ионосферы.

Ниже приводится краткое содержание одного доклада.

523.9-7(048)

**Г. С. Иванов-Холодный.** Проблемы солнечно-земной физики и исследования ионосферы. Задача исследования и использования космоса активно решается с применением как автоматически работающих спутников, так и обитаемых космических станций (ОКС). Необходимость хорошего знания состояния ближнего космоса, в котором летают спутники и где осуществляется большинство космических экспериментов и проектов, очевидна. Памятно событие преждевременного схода