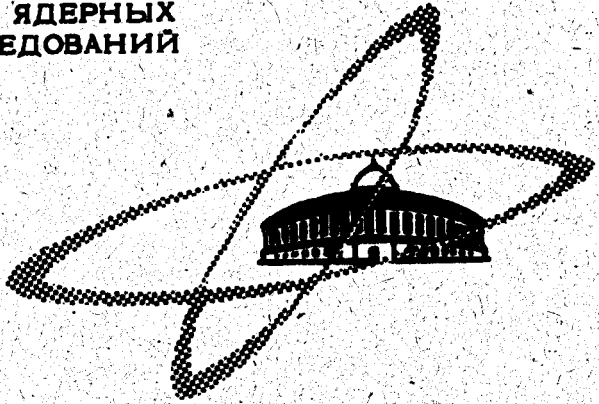


20/vi-70

5-168  
ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 5089



К. Валясек

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ТЕОРИЯ ЛИБРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ  
В ТВЕРДОМ ОРТОВОДОРОДЕ  
В БОЗЕВСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

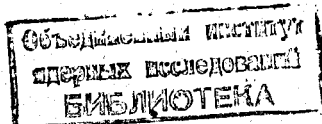
1970

P4 - 5089

К. Валясек

ТЕОРИЯ ЛИБРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ  
В ТВЕРДОМ ОРТОВОДОРОДЕ  
В БОЗЕВСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Направлено в журнал "Теоретическая  
и математическая физика"



## 1. Введение

Известно, что в твердом водороде с высокой концентрацией молекул ортоводорода (60%) наблюдаются особенности его теплоемкости <sup>/1/</sup> и изменение формы линии Я.М.Р. <sup>/2/</sup> в области 1,5°К. Эти явления связаны с фазовым переходом, при котором происходит упорядочение ротационного движения молекул ортоводорода  $H_2$ . Упорядочение обусловлено квадруполь-квадрупольным взаимодействием между молекулами ортоводорода <sup>/3/</sup>.

Наблюдается также изменение структуры кристаллической решетки <sup>/4/</sup>. Эксперименты показывают <sup>/4/</sup>, что в низкотемпературной упорядоченной фазе водород образует Г.Ц.К. решетку, а в высокотемпературной - гексагональную. Это согласуется с расчетами Фельштейнера <sup>/5/</sup>, из которых следует, что упорядоченная Г.Ц.К. структура энергетически более выгодна, чем гексагональная. Проблема исследования ротационного движения молекул в упорядоченной фазе твердого ортоводорода вызвала в последнее время значительный интерес. В ряде работ <sup>/6, 7, 8/</sup> показано, что эти движения распространяются в виде волн, связанных с возбуждением ротационных степеней свободы. Однако так как в области низких температур средние значения углового момента молекулы равны нулю, скорее нужно говорить о либрационном движении. Поэтому элементарные возбуждения, отвечающие этим волнам, называются либронами.

В работах /7,8/ построена теория либронных возбуждений на основе приближения хаотических фаз, а в работах /6,8/ либронные возбуждения рассматриваются в приближении, когда операторы рождения и уничтожения этих возбуждений заменялись бозевскими операторами.

Однако результаты бозевского приближения основаны на теории возмущений и довольно неточны. В настоящей работе построена более точная бозевская теория либронных возбуждений с помощью метода, эквивалентного методу приближенного вторичного квантования /9/.

## 2. Модель системы

Рассмотрим кристалл ортоводорода, в котором молекулы связаны квадруполь-квадрупольным взаимодействием. Решетка твердого ортоводорода  $H_2$  ниже точки фазового перехода состоит из четырех простых кубических подрешеток /5,6,7,8,10,11,12/. В каждой из подрешеток ось симметрии молекулы направлена вдоль одной из четырех осей симметрии кристалла третьего порядка. Эти оси совпадают с главными диагоналями куба Г.Ц.К. решетки. Гамильтониан системы запишем в виде /8/:

$$H = \sum_{i,j} \sum_{m,n} \gamma_{ij}^{m,n} O_i^m O_j^n, \quad (1)$$

$$m, n = 0, \pm 1, \pm 2,$$

где  $i, j$  - индексы, определяющие положение молекулы в кристалле.

$$O_i^0 = 3(J_i^z)^2 - 2$$

$$O_i^{\pm 1} = J_i^z J_i^{\pm} + J_i^{\pm} J_i^z$$

$$O_i^{\pm 2} = (J_i^{\pm})^2$$

$$J_i^{\pm} = J_i^x \pm i J_i^y$$

$J_1^z, J_1^x, J_1^y$  - компоненты вектора углового момента  $J_1$  для молекулы  $i$ .

Здесь ротационное квантовое число  $J=1$  и ось квантования  $z_1$  совпадает с осью симметрии молекулы  $i$ ,

$$\gamma_{ij}^{mn} = \frac{\Gamma_{ij}}{18} (70\pi)^{1/2} A_m A_n \sum_{M,N=-2}^2 C(224/MN) Y_{4,M+N}^* (\Omega_{ij}) \times \\ \times D_{Mm}^{2*}(\vec{\omega}_i) D_{Nn}^{2*}(\vec{\omega}_j)$$

- константы квадруполь-квадрупольной связи между молекулами  $i$  и  $j$ .

$$A_0 = -1, \quad A_{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{2}}, \quad A_{\pm 2} = -\sqrt{\frac{3}{2}},$$

$\Gamma_{ij} = \frac{6e^2 Q^2}{25 |\vec{R}_{ij}|^5}$  - параметр квадрупольного взаимодействия,  $Q$  - скалярное значение квадрупольного момента,  $\vec{R}_{ij}$  - вектор, соединяющий центры тяжести молекулы  $i$  и  $j$ ;  $C(224/MN)$  - коэффициенты Клебша-Гордана,  $\Omega_{ij} = (\theta_{ij}, \phi_{ij})$  - аксиальный и азимутальный углы, определяющие ориентацию вектора  $\vec{R}_{ij}$  относительно кристаллической оси  $c$ .

$\vec{\omega}_i = (\theta_i, \phi_i)$  - аксиальный и азимутальный углы, определяющие ориентацию оси квантования  $z_1$  относительно оси  $c$ . Константы

$\gamma_{ij}^{m,n}$  обладают свойствами:

$$\gamma_{ij}^{mn} = \gamma_{ij}^{nm}, \quad \gamma_{ij}^{-m,-n} = \gamma_{ij}^{mn*},$$

$$\sum_j \gamma_{ij}^{m0} = 0.$$

(2)

Следуя Раичу и Этгерсу /8/, введем операторы  $a_1, a_1^+, b_1, b_1^+$ . Операторы  $a_1^+, a_1$  есть операторы рождения и уничтожения состояния с  $J^z = 1$  молекулы  $i$ , а  $b_1^+, b_1$  с  $J^z = -1$ . Они выражаются через компоненты  $J_1^{\rightarrow}$  следующим образом /3/:

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 - (J_1^z)^2] J_1^-,$$

$$b_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 - (J_1^z)^2] J_1^+ \quad (3)$$

и удовлетворяют коммутационным соотношениям /8/:

$$[a_i, a_j] = [b_i, b_j] = [a_i, b_j] = [a_i^+, a_j^+] = [b_i^+, b_j^+] = [a_i^+, b_j^+] = 0,$$

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij} (1 - 2a_i^+ a_i - b_i^+ b_i),$$

$$[b_i, b_j^+] = \delta_{ij} (1 - 2b_i^+ b_i - a_i^+ a_i), \quad (4)$$

$$[a_i, b_j^+] = -\delta_{ij} b_i^+ a_i,$$

$$[b_i, a_j^+] = -\delta_{ij} a_i^+ b_i,$$

а также соотношениям:

$$a_j^2 = a_i^+ a_i^2 = b_i^+ b_i^2 = a_i^+ b_i^+ = a_i b_i = a_i b_i^+ = b_i a_i^+ = 0.$$

Компоненты  $J_1^{\rightarrow}$  и операторы  $O_1^m$  можно записать через  $a_1$  и  $b_1$  следующим образом /8/:

$$J_1^z = a_1^+ a_1 - b_1^+ b_1,$$

$$J_1^+ = \sqrt{2} (a_1^+ + b_1),$$

$$J_1^- = \sqrt{2} (a_1 + b_1^+),$$

$$O_1^0 = 3(a_1^+ a_1 + b_1^+ b_1) - 2,$$

$$O_1^{+1} = \sqrt{2} (a_1^+ - b_1),$$

$$O_1^{-1} = \sqrt{2} (a_1 - b_1^+),$$

(5)

$$O_1^{+2} = 2a_1^+ b_1,$$

$$O_1^{-2} = 2b_1^+ a_1.$$

Записывая  $H$  (1) в операторах  $a_1$  и  $b_1$ , получим сложный гамильтониан, который содержит билинейные, тройные и четверные комбинации этих операторов /8/. Однако при очень низких температурах существенны только слабовозбужденные состояния кристалла, в которых статистические средние от операторов  $a_1^+ a_1$  и  $b_1^+ b_1$  малы. Поэтому заменим коммутационные соотношения (4) бозевскими коммутационными соотношениями /8/ :

$$[a_1, a_j] = [a_1^+, a_j^+] = [b_1, b_j] = [b_1^+, b_j^+] = [a_1, b_j] =$$

$$= [a_1^+, b_j^+] = [a_1, b_j^+] = [b_1, a_j^+] = 0,$$

(6)

$$[a_1, a_j^+] = \delta_{1j}, \quad [b_1, b_j^+] = \delta_{1j}.$$

Будем удерживать в гамильтониане (1) только члены, билинейные по  $a_i$  и  $b_i$ .

Полагаем также, что /8/:

$$\gamma_{ij}^{00} = \begin{cases} -\frac{19\Gamma}{144} & \text{для ближайших соседей} \\ 0 & \text{в других случаях} \end{cases}$$

Тогда получим /8/

$$\begin{aligned} H^{(2)} = & 19\Gamma \sum_i (a_i^+ a_i + b_i^+ b_i) + 2 \sum_{ij} \{ \gamma_{ij}^{+1,+1} (a_i^+ - b_i^-) (a_j^+ - b_j^-) + \\ & + \gamma_{ij}^{-1,-1} (a_i^- - b_i^+) (a_j^- - b_j^+) + \gamma_{ij}^{+1,-1} (a_i^+ - b_i^-) (a_j^- - b_j^+) + \\ & + \gamma_{ij}^{-1,+1} (a_i^- - b_i^+) (a_j^+ - b_j^-) \} - \frac{19\Gamma}{3} N_0, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $N_0$  - число молекул в кристалле.

Отбрасывание членов выше билинейных и переход к бозевским коммутационным соотношениям соответствует пренебрежению кинематическим и динамическим взаимодействиям, что хорошо известно в теории ферромагнетизма. В работах /6,8/ на основе гамильтониана (7) развита теория элементарных возбуждений в твердом ортоводороде в бозевском приближении. Недиагональные члены в (7) рассматривались как возмущение и учитывались только эффекты первого порядка.

В настоящей работе строится теория элементарных возбуждений в твердом ортоводороде с помощью диагонализации гамильтониана (7).



### 3. Спектр возбуждений

Перепишем гамильтониан (7), вводя Фурье - компоненты от операторов  $a_1, b_1$  и величин  $\gamma_{\alpha\beta}^{mn}$

$$\begin{aligned}
 a_{\vec{a}\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_a} e^{-i\vec{k}\vec{R}_a} a_{\vec{R}_a}, \\
 b_{\vec{a}\vec{k}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_a} e^{-i\vec{k}\vec{R}_a} b_{\vec{R}_a}, \\
 \gamma_{\alpha\beta}^{mn}(\vec{K}) &= \sum_{\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta} e^{i\vec{K}(\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta)} \gamma_{\alpha\beta}^{mn}(\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta),
 \end{aligned} \tag{8}$$

$\alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$

где  $N$  - число элементарных ячеек,  $\vec{R}_a$  - вектор положения молекулы в подрешетке  $a$ ,  $\vec{K}$  - волновой вектор. Для удобства введем также величины /8/:

$$f_{\alpha\beta}(\vec{K}) = \frac{4}{19\Gamma} \gamma_{\alpha\beta}^{+1,-1}(\vec{K}),$$

$$g_{\alpha\beta}(\vec{K}) = \frac{4}{19\Gamma} \gamma_{\alpha\beta}^{+1,+1}(\vec{K}),$$

которые обладают свойствами:

$$\begin{aligned}
 f_{\alpha\beta}(\vec{K}) &= f_{\alpha\beta}(-\vec{K}), & f_{\alpha\beta}^*(\vec{K}) &= f_{\beta\alpha}(\vec{K}), \\
 g_{\alpha\beta}(\vec{K}) &= g_{\alpha\beta}(-\vec{K}), & g_{\beta\alpha}(\vec{K}) &= g_{\alpha\beta}(\vec{K}).
 \end{aligned} \tag{9}$$

Тогда получим:

$$\begin{aligned}
 H^{(2)} = & 19\Gamma \sum_{\alpha \vec{k}} (a_{\alpha \vec{k}}^+ a_{\alpha \vec{k}} + b_{\alpha \vec{k}}^+ b_{\alpha \vec{k}}) + \\
 & + \frac{19\Gamma}{4} \sum_{\alpha, \beta, \vec{k}} \{ 2f_{\alpha\beta} (\vec{K}) X_{\alpha \vec{k}}^+ X_{\beta \vec{k}} + g_{\alpha\beta} (\vec{K}) X_{\alpha \vec{k}}^+ X_{\beta, -\vec{k}} + \\
 & + g_{\alpha\beta}^* (\vec{K}) X_{\alpha \vec{k}} X_{\beta, -\vec{k}} \} - \frac{19\Gamma}{3} N_0,
 \end{aligned} \tag{10}$$

где  $X_{\alpha \vec{k}} = \sqrt{2}(a_{\alpha \vec{k}} - b_{\alpha, -\vec{k}}^+)$ . Введем также оператор:  $Y_{\alpha \vec{k}} = \sqrt{2}(a_{\alpha \vec{k}} + b_{\alpha, -\vec{k}}^+)$ .  
 Уравнения движения для  $X_{\alpha \vec{k}}, X_{\alpha, -\vec{k}}^+, Y_{\alpha \vec{k}}, Y_{\alpha, -\vec{k}}^+$  имеют вид:

$$\frac{i d X_{\alpha \vec{k}}}{dt} = [X_{\alpha \vec{k}}, H^{(2)}] = 19\Gamma Y_{\alpha \vec{k}}, \tag{11}$$

$$\frac{i d X_{\alpha, -\vec{k}}^+}{dt} = -19\Gamma Y_{\alpha, -\vec{k}}^+,$$

$$\frac{i d Y_{\alpha \vec{k}}}{dt} = 19\Gamma (X_{\alpha \vec{k}} + 2 \sum_{\beta} \{ f_{\alpha\beta} (\vec{K}) X_{\beta \vec{k}} + g_{\alpha\beta} (\vec{K}) X_{\beta, -\vec{k}}^+ \}),$$

$$\frac{i d Y_{\alpha, -\vec{k}}^+}{dt} = -19\Gamma (X_{\alpha, -\vec{k}}^+ + 2 \sum_{\beta} \{ g_{\alpha\beta}^* (\vec{K}) X_{\beta \vec{k}} + f_{\alpha\beta}^* (\vec{K}) X_{\beta, -\vec{k}}^+ \}). \tag{11a}$$

Дифференцируя по времени (11a), получим далее:

$$\begin{aligned}
 -\frac{d^2 Y_{\alpha \vec{k}}}{dt^2} = & (19\Gamma)^2 (Y_{\alpha \vec{k}} + 2 \sum_{\beta} \{ f_{\alpha\beta} (\vec{K}) Y_{\beta \vec{k}} - g_{\alpha\beta} (\vec{K}) Y_{\beta, -\vec{k}}^+ \}) \\
 -\frac{d^2 Y_{\alpha, -\vec{k}}^+}{dt^2} = & (19\Gamma)^2 (Y_{\alpha, -\vec{k}}^+ + 2 \sum_{\beta} \{ -g_{\alpha\beta}^* (\vec{K}) Y_{\beta \vec{k}} + f_{\alpha\beta}^* (\vec{K}) Y_{\beta, -\vec{k}}^+ \}).
 \end{aligned} \tag{12}$$

Уравнения (12) удобно записать в матричной форме, вводя матрицы:

$$\bar{Y}(\vec{K}) = \begin{bmatrix} Y_{1\vec{K}} \\ \vdots \\ Y_{4\vec{K}} \\ Y_{1,-\vec{K}}^+ \\ \vdots \\ Y_{4,-\vec{K}}^+ \end{bmatrix} \quad \bar{F}(\vec{K}) = \begin{bmatrix} \|f_{\alpha\beta}(\vec{K})\| & \| -g_{\alpha\beta}(\vec{K}) \| \\ \vdots & \vdots \\ \| -g_{\alpha\beta}^*(\vec{K}) \| & \| f_{\alpha\beta}^*(\vec{K}) \| \end{bmatrix} \quad (13)$$

где  $\|f_{\alpha\beta}(\vec{K})\|$  и  $\| -g_{\alpha\beta}(\vec{K}) \|$  матрицы  $4 \times 4$ . Тогда получим:

$$-\frac{d^2 \bar{Y}(\vec{K})}{dt^2} = (19\Gamma)^2 \{ 1 + 2\bar{F}(\vec{K}) \} \bar{Y}(\vec{K}). \quad (14)$$

Для получения спектра элементарных возбуждений диагоналируем уравнения (12), для чего по существу необходимо диагонализировать матрицу  $\bar{F}(\vec{K})$ .

Введем унитарную матрицу  $\bar{V}(\vec{K})$  размерностью  $8 \times 8$  и удовлетворяющую условиям:

$$\bar{V}^+(\vec{K}) \bar{F}(\vec{K}) \bar{V}(\vec{K}) = \bar{\Phi}(\vec{K}), \quad (15)$$

где  $\bar{\Phi}(\vec{K})$  - диагональная матрица

$$\bar{V}^+(\vec{K}) \bar{V}(\vec{K}) = \bar{V}(\vec{K}) \bar{V}^+(\vec{K}) = 1.$$

Матрицу  $\bar{V}(\vec{K})$  можно записать в форме

$$\bar{V}(\vec{K}) = \begin{bmatrix} \|V_{\alpha L}(\vec{K})\| \\ \vdots \\ \|V_{\alpha L}^*(\vec{K})\| \end{bmatrix} \quad (16)$$

где  $\|V_{\alpha L}(\vec{K})\|$  - матрица размерностью  $4 \times 8$   $\alpha=1...4$ ,  $L=1...8$ . Пользуясь соотношениями (15), получим для элементов матрицы  $\vec{V}(\vec{K})$  следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \sum_L V_{\alpha L}(\vec{K}) V_{\beta L}^*(\vec{K}) &= \delta_{\alpha\beta}, \\ \sum_L V_{\alpha L}(\vec{K}) V_{\beta L}(\vec{K}) &= 0, \\ \sum_{\alpha} V_{\alpha L}^*(\vec{K}) V_{\alpha L_1}(\vec{K}) + V_{\alpha L}(\vec{K}) V_{\alpha L_1}^*(\vec{K}) &= \delta_{LL_1}, \\ \sum_{\beta} f_{\alpha\beta}(\vec{K}) V_{\beta L}(\vec{K}) - g_{\alpha\beta}(\vec{K}) V_{\beta L}^*(\vec{K}) &= V_{\alpha L}(\vec{K}) \phi_L(\vec{K}), \end{aligned} \quad (17)$$

где  $\phi_L(\vec{K})$  - собственные значения матрицы  $\vec{F}(\vec{K})$ , а также равенство:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta}(\vec{K}) [V_{\alpha L}^*(\vec{K}) V_{\beta L_1}(\vec{K}) + V_{\alpha L_1}^*(\vec{K}) V_{\beta L}(\vec{K})] - \\ - g_{\alpha\beta}^*(\vec{K}) V_{\alpha L}(\vec{K}) V_{\beta L_1}(\vec{K}) - g_{\alpha\beta}(\vec{K}) V_{\alpha L}^*(\vec{K}) V_{\beta L_1}^*(\vec{K}) = \\ = \delta_{LL_1} \phi_L(\vec{K}). \end{aligned} \quad (18)$$

Вводя операторы

$$\begin{aligned} \eta_{L\vec{K}} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \{ V_{\alpha L}^*(\vec{K}) Y_{\alpha\vec{K}} + V_{\alpha L}(\vec{K}) Y_{\alpha, -\vec{K}}^+ \}; \\ \xi_{L\vec{K}} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \{ V_{\alpha L}^*(\vec{K}) X_{\alpha\vec{K}} - V_{\alpha L}(\vec{K}) X_{\alpha, -\vec{K}}^+ \} \end{aligned} \quad (19)$$

со свойствами  $\eta_{LK}^+ = \eta_{L,-K}^-$ ,  $\xi_{LK}^+ = -\xi_{L,-K}^-$ , преобразуем (11) и (11а) к виду:

$$\frac{i d \xi_{LK}^{\vec{}}}{dt} = 19 \Gamma \eta_{LK}^{\vec{}},$$

$$\frac{i d \eta_{LK}^{\vec{}}}{dt} = \frac{\epsilon_{LK}^2}{19 \Gamma} \xi_{LK}^{\vec{}},$$
(20)

где  $\epsilon_{LK}^2 = (19 \Gamma)^2 [1 + 2 \phi_L(\vec{K})]$ . Уравнения (20) приводятся к диагональному виду с помощью операторов:

$$c_{L\vec{K}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\epsilon_{L\vec{K}}}{19 \Gamma} \right)^{1/2} \left( \xi_{L\vec{K}} + \frac{19 \Gamma}{\epsilon_{L\vec{K}}} \eta_{L\vec{K}} \right).$$
(21)

Линейная комбинация (21) выбрана таким образом, чтобы:

$$i \frac{d c_{L\vec{K}}}{dt} = \epsilon_{L\vec{K}} c_{L\vec{K}}.$$

Можно проверить, что  $c_{L\vec{K}}$  и  $c_{L\vec{K}}^+$  удовлетворяют бозевским коммутационным соотношениям:

$$[c_{L\vec{K}}, c_{L_1\vec{K}_1}] = [c_{L\vec{K}}^+, c_{L_1\vec{K}_1}^+] = 0,$$

$$[c_{L\vec{K}}, c_{L_1\vec{K}_1}^+] = \delta(\vec{K} - \vec{K}_1) \delta_{LL_1}.$$

Диагонализируем теперь гамильтониан (10). Перейдем от операторов

$a_{a\vec{K}}$  и  $b_{a\vec{K}}$  к  $c_{L\vec{K}}$  с помощью преобразования

$$a_{a\vec{K}} = \sum_L u_{aL}(\vec{K}) c_{L\vec{K}} + v_{aL}(\vec{K}) c_{L,-\vec{K}}^+,$$

$$b_{a\vec{K}} = \sum_L u_{aL}^*(\vec{K}) c_{L\vec{K}} + v_{aL}^*(\vec{K}) c_{L,-\vec{K}}^+,$$
(22)

где

$$u_{aL}(\vec{K}) = \frac{1}{2} v_{aL}(\vec{K}) \left( \frac{19\Gamma}{\epsilon_{LK}} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\epsilon_{LK}}{19\Gamma} + 1 \right),$$

$$v_{aL}(\vec{K}) = \frac{1}{2} v_{aL}(\vec{K}) \left( \frac{19\Gamma}{\epsilon_{LK}} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{\epsilon_{LK}}{19\Gamma} - 1 \right).$$

Тогда будем иметь

$$H^{(2)} = \sum_{LK} \epsilon_{LK} \vec{c}_{LK} + \frac{1}{2} \sum_{LK} \epsilon_{LK} \vec{c}_{LK} - 4 \frac{19\Gamma}{3} N_0. \quad (23)$$

По-существу преобразование (22) эквивалентно известному  $(u, v)$ -преобразованию Н.Н. Боголюбова и С.В. Тябликова<sup>/9/</sup>. Заметим, однако, что непосредственное применение метода  $(u, v)$ -преобразования встречает затруднение ввиду громоздких расчетов.

Благодаря использованию уравнений движения второго порядка (12) и выбору операторов  $X_{aK}$  и  $Y_{aK}$  задача значительно упрощается. Можно убедиться на основе развитой здесь теории, что  $\langle \vec{J}_1 \rangle = 0$ . Таким образом, мы получаем элементарные возбуждения либрационного типа, т.е. либроны.

#### 4. Обсуждение

Сравним полученные результаты с некоторыми результатами либронной теории Райча и Эттерса<sup>/8/</sup>. Полученное ими выражение для энергии либронов в бозевском приближении имеет вид:

$$\epsilon_{LK}^{\rightarrow} = 19\Gamma \{1 + \phi_L(\vec{K})\} \quad (24)$$

и отличается от результата настоящей работы

$$\epsilon_{LK}^{\rightarrow} = 19\Gamma \sqrt{1 + 2\phi_L(\vec{K})}. \quad (25)$$

Эти энергии мало отличаются, когда недиагональные члены в (10) можно рассматривать как малое возмущение. В приближении хаотических фаз /8/ Райч и Этгерс получили для  $\epsilon_{LK}^{\rightarrow}$  выражение:

$$\epsilon_{LK}^{\rightarrow} = -\frac{19\Gamma}{2} \langle 0^0 \rangle \sqrt{1 + 2\phi_L(\vec{K})}, \quad (26)$$

где  $\langle 0^0 \rangle$  - "параметр упорядочения", который играет в (26) роль температурной перенормировки. Вблизи  $T = 0^0 \text{ K}$   $\langle 0^0 \rangle \approx -2$  с точностью до нескольких процентов /8/. Поэтому либронные энергии (25) и (26) при низких температурах очень близки. Энергия основного состояния кристалла в нашем случае равна:

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{LK} \epsilon_{LK}^{\rightarrow} - 4N_0 \frac{19\Gamma}{3}. \quad (27)$$

Вычисляя  $\sum_{LK} \epsilon_{LK}^{\rightarrow}$  с помощью введения плотности либронного спектра (ср. /8/), получим для  $E_0$

$$E_0 \approx -1,018N_0 \frac{19\Gamma}{3}.$$

Результат Райча и Этгерса /8/ следующий:

$$E_0 \approx -1,015N_0 \frac{19\Gamma}{3}.$$

Таким образом, мы видим, что развитая в настоящей работе теория очень хорошо применима при низких температурах.

Отметим, также, что в различных задачах, где исследуется взаимодействие либронной подсистемы с другими степенями свободы кристалла, необходимо вычислять корреляционные функции типа  $\langle a_i^+ a_i^+ (t) a_i (t) \rangle$ , расчеты которых в приближении хаотических фаз затруднительны. На основе настоящей работы такие корреляционные функции вычисляются довольно просто.

В заключение выражаю благодарность профессору Д.Н. Зубареву и А.Л. Куземскому.

#### Л и т е р а т у р а

1. R.W.Hill, B.W.Ricketson. Phil. Mag. 45 (1954), 277  
G.Ahlers, W.H.Ortung. Phys. Rev. 133 (1964) A 1642.
2. F.Reif, E.M.Purcell. Phys. Rev. 91 (1953) 631  
G.W.Smith, R.M.Haisley. Phys. Rev. 117 (1960) 732.
3. T.Nakamura. Progr. Theor. Phys. 14 (1955) 135.
4. M.Clouter, H.P.Gush. Phys. Rev. Lett. 45 (1965) 200.  
R.L. Mills, A. F. Schuch. Phys. Rev. Lett. 15 (1965), 722  
R.L. Mills, A.F. Schuch, D.A. Depatie. Phys. Rev. Lett. 17 (1966) 1131. A.F. Schuch, R.L. Mills, D.A. Depatie. Phys.Rev. 165 (1968) 1032.
5. I.Felsteiner. Phys. Rev. Lett. 15 (1965) 1025.
6. S.Homma, K.Okada,, H.Matsuda. Progr. Theor. Phys. 38 (1967), 767.
7. H.Ueyama, T.Matsubara. Progr. Theor. Phys. 38 (1967), 784.
8. J.C.Raich, R.D.Etters. Phys. Rev. 168 (1968) 425.
9. С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, 1965.



10. J.C.Raich, H.M.James. Phys. Rev. Letters 16 173 (1966).
11. H.M.James, J.C.Raich. Phys. Rev. 162, 649 (1967),
12. O.Nagai, T. Nakamura, Progr. Theor. Phys. 24, 432, (1961),  
30, 412 (1963).

Рукопись поступила в издательский отдел  
29 апреля 1970 года.