

С326

30/11-70

П-757

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 5317



В.Б. Приезжев

ДИНАМИКА ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ЖИДКОСТИ
В КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1970

P4 - 5317

В.Б. Приезжев

ДИНАМИКА ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ЖИДКОСТИ
В КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

8572/2 up

1. В в е д е н и е

Свойства кристаллов, в элементарной ячейке которого находится несколько атомов, изучены достаточно хорошо. Особенностью спектра возбуждений такой системы является наличие оптических фононных ветвей, отделенных от акустических щелью. Величина щели зависит от разницы масс атомов и силовых постоянных. При температурах выше точки плавления исчезает дальний порядок в расположении атомов, что приводит к ряду изменений в фононном спектре. В настоящей работе изучаются высокочастотные возбуждения в двухкомпонентной жидкости при температурах, несколько превышающих температуру плавления. Исследование коллективных возбуждений, характерное время которых много меньше характерного времени диффузии ($\approx 10^{-13}$ сек), обычно производится в квазикристаллическом приближении. В этом приближении положения равновесия колеблющихся атомов неподвижны и распределены с некоторой функцией $g(R)$. Естественным обобщением квазикристаллической модели на случай двухкомпонентной жидкости является введение трех функций распределения: для относительного расположения атомов каждого сорта и для расположения атомов одного сорта относительно атомов другого.

Использование такого приближения не устраняет все трудности, связанные с отсутствием трансляционной симметрии системы. Обычно потенциал взаимодействия двух атомов на малых расстояниях близок к потенциалу взаимодействия твердых сфер. Это затрудняет рассмотрение квазикристаллической модели в гармоническом приближении. Кроме того в сплавах металлов, которыми является большинство смешивающихся жид-

ностей, имеется дальнедействующее кулоновское взаимодействие. В дальнейшем мы не будем касаться этих вопросов и проведем рассмотрение для достаточно гладких короткодействующих потенциалов в гармоническом приближении. Однако получаемые ниже формулы могут быть использованы и в общем случае. Для этого потребуется лишь воспользоваться методом псевдопотенциала для учета кулоновского взаимодействия и псевдогармоническим приближением для учета сильного ангармонизма колебаний атомов в разупорядоченной системе. В п.2 получено выражение для собственных частот колебаний двухкомпонентной жидкости. Поскольку анализ этого выражения в общем случае затруднителен, в п.3 рассмотрена одномерная цепочка с взаимодействием между ближайшими соседями. Этот пример иллюстрирует качественные особенности основного решения. Обсуждение проводится в п.4.

2. Дисперсионная зависимость в двухкомпонентной жидкости

Рассмотрим систему N_1 атомов массы M_1 и N_2 атомов массы M_2 , взаимодействие между которыми определяется потенциалами V_{11} , V_{22} , V_{12} . Гамильтониан системы запишем в виде:

$$H = \sum_{i=1}^{N_1} \frac{\vec{p}_i^2}{2M_1} + \sum_{j=1}^{N_2} \frac{\vec{p}_j^2}{2M_2} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{N_1} V^{11}(\vec{R}_i - \vec{R}_j + \vec{u}_i - \vec{u}_j) + \quad (1)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{N_2} V^{22}(\vec{R}_i - \vec{R}_j + \vec{u}_i - \vec{u}_j) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} V^{12}(\vec{R}_i - \vec{R}_j + \vec{u}_i - \vec{u}_j) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_2} \sum_{j=1}^{N_1} V^{21}(\vec{R}_i - \vec{R}_j + \vec{u}_i - \vec{u}_j),$$

где \vec{p}_i - импульс атома i , \vec{R}_i - положение равновесия атома, \vec{u}_i - смещение из положения равновесия. Последний член в гамильтониане введен для симметризации дальнейших выкладок.

Определим фурье-преобразование потенциала взаимодействия

$$V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \frac{(2\pi)^3}{N} \sum_{\vec{k}} V(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (2)$$

Здесь имеется в виду переход от интегрирования к суммированию. Поэтому перед знаком суммы появляется множитель $\frac{(2\pi)^3}{N}$. Полное число атомов в системе N . Объем на один атом полагаем равным единице. Положения равновесия атомов считаем распределенными с функцией $f_{ij}^{KK'}(\vec{R}_i, \vec{R}_j)$, верхние индексы которой принимают значения 1,2, в зависимости от сорта атомов ^{1/}. Это допущение составляет основу квазикристаллического приближения. Принципиальные трудности определения функции распределения здесь не обсуждаются.

Запишем гамильтониан (1) в виде:

$$H = \sum_{i=1}^{N_1} \frac{\vec{p}_i^2}{2M_1} + \sum_{j=1}^{N_2} \frac{\vec{p}_j^2}{2M_2} + \frac{(2\pi)^3}{N^2} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \sum_{\vec{k}} \sum_{i \neq j}^{N_1} \int d\vec{R}_i d\vec{R}_j f_{ij}^{KK'}(\vec{R}_i - \vec{R}_j) V^{KK'}(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j + \vec{u}_i - \vec{u}_j)} \quad (3)$$

Множитель $\frac{1}{N}$ появляется из-за двойного интегрирования по объему

N функции, зависящей только от разности координат $\vec{R}_i - \vec{R}_j$. Введем фононные переменные, подобные каноническим переменным кристаллической решетки (см., например, ^{2/})

$$\vec{u}_i^a = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \frac{e^{a}([\vec{i}|\vec{k})}{\sqrt{M_1}} e^{i\vec{k}\vec{R}_i} A(\vec{k}),$$

$$\vec{p}_i^a = \frac{-i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{a}([\vec{i}|\vec{k}) \sqrt{M_1} e^{-i\vec{k}\vec{R}_i} B(\vec{k}), \quad (4)$$

где \vec{k} обозначает пару (\vec{k}, j) ; \vec{k} - волновой вектор, j - тип колебаний или номер ветви.

Определение векторов поляризации, введенное здесь, несколько отличается от обычного. Дело в том, что в выбранной схеме рассмотрения разупорядоченной двухкомпонентной системы нельзя ввести понятия элементарной ячейки с базисом. Поэтому мы ввели в качестве аргумента вектора поляризации функцию $[i]$, которая принимает значения 1 или 2 в зависимости от того, к какому сорту принадлежит атом. В случае решетки с базисом такое определение эквивалентно замене $e(\kappa|\vec{k}) \rightarrow e(\kappa|\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}_\kappa}$, где \vec{r}_κ - радиус-вектор атома κ в элементарной ячейке. Очевидно,

что такая замена не нарушает свойств поляризационных векторов, если последние выбраны так, чтобы $e^+(k) = e(-k)$. По-прежнему имеем условия замкнутости и ортонормированности в виде:

$$\sum_{\kappa, \alpha} e^{\alpha} (\kappa | \frac{k}{j}) e^{\alpha} (\kappa | \frac{k}{j'}) = \delta_{jj'}$$

$$\sum_j e^{\alpha} (\kappa | \frac{k}{j}) e^{\beta} (\kappa' | \frac{k}{j}) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\kappa\kappa'} \quad (5)$$

Раскладывая потенциальную энергию в ряд по смещениям и пользуясь определениями (4), перепишем гамильтониан в фоновых переменных:

$$H = \frac{1}{2} \sum_k B^+(k) B(k) + \sum_{\kappa\kappa'} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} V_n^{\kappa\kappa'}(k_1 \dots k_n) A(k_1) \dots A(k_n), \quad (6)$$

где

$$V_n^{\kappa\kappa'}(k_1 \dots k_n) = \left(\frac{2\pi}{N}\right)^3 \sum_{\ell} \sum_{m \neq \ell} \sum_q \int d^3 R_{\ell} d^3 R_m f_{\ell m}^{\kappa\kappa'}(\vec{R}_{\ell} \vec{R}_m) V^{\kappa\kappa'}(\vec{q}) \times$$

$$\times e^{i\vec{q}(\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_m)^n} \prod_{i=1}^n i q^{\alpha} b_{\ell m}^{\alpha}(k_i), \quad (7)$$

$$b_{\ell m}^{\alpha}(k) = \frac{e^{\alpha}([\ell|k]e^{i\vec{k}\vec{R}_{\ell}})}{\sqrt{M_{\ell}N}} - \frac{e^{\alpha}([m|k]e^{i\vec{k}\vec{R}_m})}{\sqrt{M_mN}}.$$

Операторы $A(k)$ и $B(k)$ обладают следующими свойствами:

$$[B(k)A^+(k)] = \delta_{\kappa\kappa'}, \quad [A(k)A^+(k')] = 0, \quad [B(k)B^+(k')] = 0,$$

$$A(k) = A^+(-k), \quad B(k) = -B^+(-k). \quad (8)$$

Рассмотрим уравнение для функции Грина

$$G_{\kappa\kappa'}(t-t') = \ll A(k, t); A^+(k', t') \gg. \quad (9)$$

Из уравнений движения для операторов $A(k, t)$, $B(k, t)$ в гайзенберговском представлении с гамильтонианом (5):

$$i \frac{d}{dt} A(k, t) = B(k, t)$$

$$i \frac{d}{dt} B(k, t) = \sum_{\kappa\kappa'} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \sum_{k_2 \dots k_n} V_n^{\kappa\kappa'}(-k, k_2, \dots, k_n) A(k_2) \dots A(k_n) \quad (10)$$

получаем уравнение для функции Грина (9):

$$\left(i \frac{d}{dt}\right)^2 G_{\kappa\kappa'}(t-t') = \delta(t-t') \delta_{\kappa\kappa'} + \sum_{\kappa\kappa'} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k_1 \dots k_n} V_{n+1}^{\kappa\kappa'}(-k, k_1 \dots k_n) \times$$

$$\times \ll A(k_1) \dots A(k_n); A^+(k', t') \gg. \quad (11)$$

Как и в случае кристаллической решетки, мы полагаем равными нулю члены в разложении энергии, линейные по смещениям атомов. Поэтому суммирование в последнем выражении начинается с единицы.

Совершая фурье-преобразование функции Грина

$$G_{\kappa\kappa'}(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(t-t')} G_{\kappa\kappa'}(\omega) d\omega, \quad (12)$$

в гармоническом приближении получаем для функции $G_{\kappa\kappa'}(\omega)$ уравнение

$$\omega^2 G_{\kappa\kappa'}(\omega) = \delta_{\kappa\kappa'} + \sum_{\kappa\kappa'} \sum_{k_1} V_2^{\kappa\kappa'}(-k, k_1) G_{\kappa_1 \kappa'}(\omega). \quad (13)$$

Рассмотрим матрицу $V_2^{\kappa\kappa'}(-k, k')$ подробнее. Согласно определению (7), имеем:

$$V_2^{\kappa\kappa'}(-k, k') = \frac{(2\pi)^3}{N^2} \sum_{\ell} \sum_{m \neq \ell} \sum_q \int d^3 R_{\ell} d^3 R_m f_{\ell m}^{\kappa\kappa'}(\vec{R}_{\ell} \vec{R}_m) V^{\kappa\kappa'}(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_m)}$$

$$i q^{\alpha} i q^{\beta} \left(\frac{e^{+\alpha}([\ell|k]}{\sqrt{M_{\ell}}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_{\ell}} - \frac{e^{+\alpha}([m|k]}{\sqrt{M_m}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_m}) \right) \left(\frac{e^{\beta}([\ell|k']]}{\sqrt{M_{\ell}}} e^{i\vec{k}'\vec{R}_{\ell}} - \frac{e^{\beta}([m|k']]}{\sqrt{M_m}} e^{i\vec{k}'\vec{R}_m}) \right).$$

Введем функцию распределения

$$g^{KK'}(\vec{R}\vec{R}') = \sum_{i=1}^{N_K} \sum_{j=1}^{N_{K'}} f_{ij}^{KK'}(\vec{R}_i = \vec{R}, \vec{R}_j = \vec{R}') \quad (15)$$

и определим ее фурье-преобразование

$$g^{KK'}(\mathbf{R}) = \sum_q g^{KK'}(q) e^{-i\vec{q}\vec{R}} \quad (16)$$

Определение функции распределения (15) эквивалентно обычному:

$$g^{KK'}(\mathbf{R}) = \left\langle \frac{1}{N_K} \sum_{i=1}^{N_K} \sum_{j=1}^{N_{K'}} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_j) \right\rangle,$$

но введение промежуточной функции распределения f позволяет более естественным образом перейти от суммирования по равновесным положениям атомов к интегрированию по объему системы.

Если верхние индексы матрицы $V_2^{KK'}(-k, k)$ совпадают, например, $K = K' = 1$, выражение (14) с учетом определений (15) и (16) принимает вид:

$$\begin{aligned} V_2^{11}(-k, k') &= \frac{(2\pi)^3}{N^3} \sum_{\vec{q}} \int d^3\vec{R} d^3\vec{R}' g^{11}(\vec{R}-\vec{R}') V^{11}(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{R}-\vec{R}')} i q^a i q^\beta \\ &= \frac{1}{M_1} e^{+a} (1|k) e^\beta (1|k') \left(e^{-i\vec{k}\vec{R}} - e^{-i\vec{k}\vec{R}'} \right) \left(e^{i\vec{k}'\vec{R}} - e^{i\vec{k}'\vec{R}'} \right) = \\ &= \frac{(2\pi)^3}{N^3} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}'} \int d^3\vec{R} d^3\vec{R}' g^{11}(\vec{q}') V^{11}(\vec{q}) i q^a i q^\beta e^{+a} (1|k) e^\beta (1|k') \times \\ &= \frac{1}{M_1} \left\{ e^{i(\vec{q}-\vec{q}')(\vec{R}-\vec{R}')} e^{i\vec{R}(\vec{k}-\vec{k}')} + e^{i(\vec{q}-\vec{q}')(\vec{R}-\vec{R}')} e^{i\vec{R}'(\vec{k}-\vec{k}')} - e^{i\vec{R}(\vec{k}-\vec{k}')} - e^{i(\vec{q}-\vec{q}'+\vec{k})(\vec{R}-\vec{R}')} e^{i\vec{R}'(\vec{k}-\vec{k}')} \right\} = \\ &= \frac{(2\pi)^3}{N^3} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}'} g^{11}(\vec{q}') V^{11}(\vec{q}) i q^a i q^\beta e^{+a} (1|k) e^\beta (1|k') \frac{1}{M_1} \delta(\vec{k}-\vec{k}') \times \\ &\times \{ 2\delta(\vec{q}-\vec{q}') - \delta(\vec{q}-\vec{q}'+\vec{k}) - \delta(\vec{q}-\vec{q}'+\vec{k}') \}. \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} V_2^{12}(-k, k') &= \frac{(2\pi)^9}{N^3} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}'} g^{12}(\vec{q}') V^{12}(\vec{q}) i q^a i q^\beta \delta(\vec{k}-\vec{k}') \times \\ &= \left\{ \frac{e^{+a} (1|k) e^\beta (1|k')}{M_1} \delta(\vec{q}-\vec{q}') - \frac{e^{+a} (2|k) e^\beta (1|k)}{\sqrt{M_1 M_2}} \delta(\vec{q}-\vec{q}'+\vec{k}) - \right. \\ &\left. - \frac{e^{+a} (1|k) e^\beta (2|k')}{\sqrt{M_1 M_2}} \delta(\vec{q}-\vec{q}'-\vec{k}) + \frac{e^{+a} (2|k) e^\beta (2|k')}{M_2} \delta(\vec{q}-\vec{q}') \right\}. \end{aligned} \quad (18)$$

Матрицы $V_2^{22}(-k, k')$ и $V_2^{21}(-k, k')$ находим с помощью формул (17) и (18) простой заменой индексов.

Заметим, что $V_2^{KK}(-k, k') = \delta(\vec{k}-\vec{k}')$. Это следствие закона сохранения k (но не квазиимпульса, как в случае кристаллической решетки). Поэтому решение уравнения (13) имеет вид:

$$G_{kk}(\omega) = \frac{1}{\omega^2 - \sum_{KK'} V_2^{KK'}(-k, k)} \quad (19)$$

Полюса функции Грина (19) определяют спектр возбуждений рассматриваемой системы:

$$\omega_k^2 = \sum_{KK'} V_2^{KK'}(-k, k), \quad (20)$$

ω_k^2 являются собственными значениями, а $e^a(\kappa|k)$ - собственными векторами уравнения

$$\omega^2(k) e^a(\kappa|k) = \sum_{\kappa'} D_{a\beta}^{\kappa\kappa'}(k) e^{\beta}(\kappa'|k), \quad (21)$$

где $D_{a\beta}^{\kappa\kappa'}(k)$ - динамическая матрица, элементы которой определяются выражениями (17), (18) и условиями (Б):

$$D_{a\beta}^{11}(k) = \frac{(2\pi)^3}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{q^\alpha q^\beta}{M_1} \{ V^{11}(\vec{q}) [2g^{11}(\vec{q}) - g^{11}(\vec{q}+\vec{k}) - g^{11}(\vec{q}-\vec{k})] + V^{12}(\vec{q})g^{12}(\vec{q}) + V^{21}(\vec{q})g^{21}(\vec{q}) \}$$

$$D_{a\beta}^{12}(k) = -\frac{(2\pi)^3}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{q^\alpha q^\beta}{\sqrt{M_1 M_2}} \{ V^{12}(\vec{q})g^{12}(\vec{q}-\vec{k}) + V^{21}(\vec{q})g^{21}(\vec{q}+\vec{k}) \} \quad (22)$$

$$D_{a\beta}^{22}(k) = \frac{(2\pi)^3}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{q^\alpha q^\beta}{M_2} \{ V^{22}(\vec{q}) [2g^{22}(\vec{q}) - g^{22}(\vec{q}+\vec{k}) - g^{22}(\vec{q}-\vec{k})] + V^{12}(\vec{q})g^{12}(\vec{q}) + V^{21}(\vec{q})g^{21}(\vec{q}) \}$$

$$D_{a\beta}^{21}(k) = -\frac{(2\pi)^3}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{q^\alpha q^\beta}{\sqrt{M_2 M_1}} \{ V^{21}(\vec{q})g^{21}(\vec{q}-\vec{k}) + V^{12}(\vec{q})g^{12}(\vec{q}+\vec{k}) \}.$$

Условием существования решения однородного уравнения (21) является равенство нулю детерминанта

$$|D_{a\beta}^{\kappa\kappa'}(k) - \omega^2 \delta_{a\beta} \delta_{\kappa\kappa'}| = 0. \quad (23)$$

Подставляя выражения (22) в (23) и решая полученное уравнение относительно ω^2 , определим искомую дисперсионную зависимость. Так, для продольных оптической и акустической ветвей получим:

$$\omega^2(k) = \frac{D^{11} + D^{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} (D^{11} + D^{22})^2 - D^{11}D^{22} + D^{12}D^{21}}, \quad (24)$$

где

$$D^{11}(k) = \frac{(2\pi)^3}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{M_1} \frac{(qk)^2}{k^2} \{ V^{11}(\vec{q}) [2g^{11}(\vec{q}) - g^{11}(\vec{q}+\vec{k}) - g^{11}(\vec{q}-\vec{k})] + V^{12}(\vec{q})g^{12}(\vec{q}) + V^{21}(\vec{q})g^{21}(\vec{q}) \}.$$

Произведем переход от суммирования к интегрированию $\frac{(2\pi)^3}{N} \sum_{\vec{q}} \rightarrow \int d\vec{q}$ и с учетом определений (2), (16) получим:

$$D^{11}(k) = \frac{2}{M_1} \int d\vec{R} \{ g^{11}(\vec{R}) [1 - \cos \vec{k} \vec{R}] \phi^{11}(\vec{R}) + g^{12}(\vec{R}) \phi^{12}(\vec{R}) + g^{21}(\vec{R}) \phi^{21}(\vec{R}) \}. \quad (25)$$

Здесь

$$\phi^{\kappa\kappa'}(\vec{R}) = \frac{\partial^2}{\partial R^2} V^{\kappa\kappa'}(\vec{R}).$$

$$D^{12}(k) = \frac{2}{\sqrt{M_1 M_2}} \int d\vec{R} \phi^{12}(\vec{R}) g^{12}(\vec{R}) \cos \vec{k} \vec{R}. \quad (26)$$

Для $D^{22}(k)$ и $D^{21}(k)$ имеем аналогичные выражения. Функция $\omega^2(k)$ неоднозначна. Для каждого значения k имеется два решения уравнения (23), соответствующих оптической и акустической ветвям элементарных возбуждений. В случае кристаллической решетки можно выбрать однозначную функцию, рассматривая собственные частоты в схеме расширенных зон. Отсутствие упорядоченности в жидкости делает невозможным такое рассмотрение, т.к. понятие зоны Бриллюэна в этом случае не определено. Мы отложим обсуждение этого вопроса до следующего раздела,

где будет рассмотрена одномерная разупорядоченная цепочка, для которой решение отличается большей наглядностью.

3. Линейная цепочка

Рассмотрим линейную цепочку $2N$ атомов двух сортов с массами m_1 и m_2 . Атомы одного сорта расположены поочередно с атомами другого. Каждый атом взаимодействует только с ближайшими соседями, потенциал взаимодействия $V(r)$. Равновесные положения атомов фиксированы, и задана функция распределения относительных расстояний между положениями равновесия соседних атомов. Ограничимся рассмотрением системы в гармоническом приближении, гармоническую силовую постоянную обозначим a .

Гамильтониан запишем в виде:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{n=0}^N \frac{p_{2n}^2}{2m_1} + \sum_{n=0}^N \frac{p_{2n+1}^2}{2m_2} + \frac{a}{4} \sum_{n=0}^N \sum_{\kappa=1,-1} [(u_{2n} - u_{2n+\kappa})^2 + (u_{2n+1} - u_{2n+1+\kappa})^2] \\ &= \frac{1}{2} \sum_k B^+(k) B(k) + \frac{a}{4} \sum_{n=0}^N \sum_{\kappa=1,-1} \frac{1}{N} \sum_{k_1, k_2} \left[\prod_{i=1,2} \frac{e(i|k_i)}{\sqrt{M_i}} - e^{ik_1 R_{2n}} - \frac{e(2|k_i)}{\sqrt{M_2}} e^{ik_1 R_{2n+\kappa}} A(k_i) \right. \\ &\left. + \prod_{i=1,2} \left(\frac{e(2|k_i)}{\sqrt{M_2}} e^{ik_1 R_{2n+1}} - \frac{e(1|k_i)}{\sqrt{M_1}} e^{ik_1 R_{2n+1+\kappa}} \right) A(k_i) \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

Смысл всех введенных здесь величин тот же, что и в соответствующих формулах п.2. Определим парную функцию распределения

$$g(R) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N \langle \delta(R - R_{2n} + R_{2n+1}) + \delta(R - R_{2n} + R_{2n-1}) \rangle \quad (28)$$

и запишем гамильтониан в виде:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_k B^+(k) B(k) + \frac{a}{4} \sum_{k_1, k_2} \frac{1}{N^2} \int dR dR' g(R-R') \left[\prod_{i=1,2} \frac{e(i|k_i)}{\sqrt{M_i}} e^{ik_1 R} - \right. \\ &\left. - \frac{e(2|k_i)}{\sqrt{M_2}} e^{ik_1 R'} \right] A(k_i) + \prod_{i=1,2} \left(\frac{e(2|k_i)}{\sqrt{M_2}} e^{ik_1 R} - \frac{e(1|k_i)}{\sqrt{M_1}} e^{ik_1 R'} \right) A(k_i). \end{aligned} \quad (29)$$

Пользуясь правилами коммутации операторов $A(k)$, $B(k)$, получим для элементов динамической матрицы следующие выражения:

$$D_{11} = \frac{2a}{M_1}, \quad D_{22} = \frac{2a}{M_2}, \quad D_{12} = D_{21} = -\frac{a}{\sqrt{M_1 M_2}} \int dR g(R) \cos kR. \quad (30)$$

Решение детерминантного уравнения (23) в этом случае имеет вид:

$$\omega^2(k) = a \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm a \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} - \frac{1}{M_2} \right) + \frac{1}{M_1 M_2} \left[\int dR g(R) \cos kR \right]^2}. \quad (31)$$

Это решение при $M_1 = M_2$ принимает форму, характерную для квазикристаллической модели

$$\omega^2(k) = \frac{a}{M} \int dR g(R) (1 - \cos kR). \quad (32)$$

Сформулируем теперь правила выбора независимых решений уравнения (23). Система N частиц должна иметь N независимых решений. Так, линейная цепочка одинаковых частиц имеет собственную частоту $\omega(k)$ для каждого из N значений k . Линейная цепочка из 2 атомов двух сортов имеет $4N$ решений, половина из которых не является независимыми.

Выберем в качестве независимых решений уравнения (23) те решения, которые в пределе $M_1 \rightarrow M_2$ определяются формулой (32) для однородной цепочки. На рис. 1 изображены зависимости $\omega(k)$ для атомной и двухатомной цепочек. Пунктирная линия соответствует отброшенным решениям. В трехмерном случае независимые решения выбираются подобным образом.

4. Обсуждение

Полученные в квазикристаллическом приближении решения (24), (31) свидетельствуют о том, что в спектре двухкомпонентной жидкости имеется щель между оптической и акустической ветвями элементарных возбуждений. Остается, однако, невыясненной роль диффузии, учет которой может

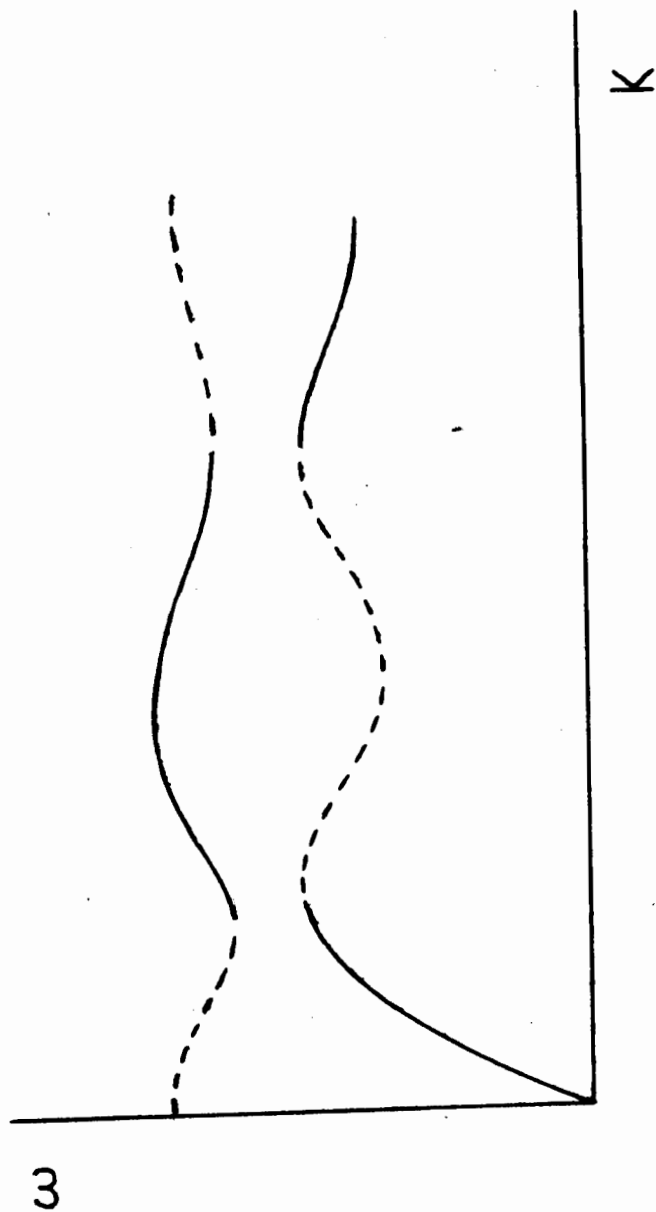


Рис. 1.

привести к существенным изменениям в спектре. Рассмотрим два разрыва дисперсионной кривой при значениях k , расположенных в областях, которые соответствуют 1-й и 2-й зонам Бриллюэна в кристалле. Физически скачок дисперсионной кривой означает, что при некотором значении k могут распространяться 4 типа волн различной энергии. Масса атомов, колеблющихся в каждой волне, различна. Такая ситуация возможна лишь при наличии когерентности в колебаниях большого числа частиц. В жидкости при малых k (первый скачок) начинает проявляться гидродинамический характер колебаний. Диффузия приводит к нарушению когерентности колебаний атомов. Поэтому первый разрыв может исчезать даже при температурах, близких к точке плавления. При увеличении k (второй скачок) свойства элементарных возбуждений хорошо описываются в рамках квазикристаллической модели. В этой области полученный результат отличается большей надежностью. Заметим, что именно в области второго скачка дисперсионная кривая может быть изучена с помощью неупругого рассеяния нейтронов. Представляется интересным обнаружить экспериментально аномалию в поведении дисперсионных кривых жидких смесей.

В заключение автор выражает благодарность К. Парлиньскому и Н.М. Плакиде за интерес к работе и обсуждения.

Л и т е р а т у р а

1. G. Kemeny, *Ann. of Phys.*, **53**, 1, 1969.
2. Н.М. Плакида, Т. Шиклош. *Acta phys. Hung.*, **25**, 17 (1968).

Рукопись поступила в издательский отдел
10 августа 1970 года.