сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17 - 12475

И.Карасова, В.К.Федянин, А.Шурда

СПЕКТР ПОВЕРХНОСТНЫХ КОЛЕБАНИЙ ПРИ УЧЕТЕ АДСОРБЦИИ

1979

P17 - 12475

И.Карасова, В.К.Федянин, А.Шурда

СПЕКТР ПОВЕРХНОСТНЫХ КОЛЕБАНИЙ ПРИ УЧЕТЕ АДСОРБЦИИ

Карасова И., Федянин В.К., Шурда А. Р17 - 12475

Спектр поверхностных колебаний при учете адсорбции

На основе формализма операторов заполнения и корреляционных функций рассматриваются поверхностные колебания решетки с хемисорбированными адатомами. Проанализировано поведение колебательного спектра для одноатомной квадратной решетки.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Karasova I., Fedyanin V.K., Šurda A. P17 - 12475

The Frequency Spectrum for a Surface with Adsorbed Adatoms

The surface vibrations of a lattice with chemisorbed adatoms were investigated using the formalism of occupation numbers and correlation functions. Behaviour of the frequency spectrum of a monoatom quadratic lattice was analysed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

МОДЕЛЬНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН

Для простоты адсорбирующую поверхность твердого тела будем моделировать одноатомной плоской решеткой. Предположим, что адатомы связаны с атомами поверхности настолько сильно, что колеблются вместе с ними /т.е. рассмотрим хемисорбцию на идеальной поверхности/.

Используя в описании подсистемы адатомов формализм операторов заполнения и корреляционных функций /1/, можно полный гамильтониан системы поверхность+адсорбированные атомы записать в виде

$$H = \sum_i \frac{\vec{P}_i^2}{2M}(1-n_i) + \sum_i \frac{\vec{P}_i^2}{2(M+m)} n_i + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\phi(\vec{R}_i-\vec{R}_j) +$$

$$+\nu\sum_i n_i + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} J(\vec{R}_i-\vec{R}_j)\, n_i n_j\,.$$

Здесь M - масса атома кристаллической поверхности в узле i, m - масса адатома, $\vec{P}_i$ - их импульс, $\vec{R}_i$ - их мгновенное положение, $\phi(\vec{R}_i-\vec{R}_j)$ - потенциал взаимодействия между атомами в узле i и j, $J(\vec{R}_i-\vec{R}_j)$ моделирует потенциал взаимодействия между адатомами в узлах i и j, ν - эффективный химический потенциал адатомов, и, наконец, n_i - операторы заполнения, имеющие собственные значения 0 и 1; причем $n_i = 0$ отвечает узлу поверхности без адатома, $n_i=1$ - заполненному адатомом. Если воспользоваться тем, что $n_i^2 = n_i$, то гамильтониан запишется компактнее

$$H = \sum_i \frac{\vec{P}_i^2}{2(M+mn_i)} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\phi(\vec{R}_i-\vec{R}_j) + \nu\sum_i n_i + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} J(\vec{R}_i-\vec{R}_j)n_i n_j . \quad /1/$$

Введем модельный гамильтониан H_0, параметры которого определим вариационной процедурой Боголюбова:

$$H_0 = H_{ph} + H_{ad} ,$$

$$H_{ph} = \sum_i \frac{\vec{P}_i^2}{2M_0} + \frac{1}{4}\sum_{i\neq j} A_{ij}^{\alpha\beta} X_{ij}^{\alpha} X_{ij}^{\beta} , \qquad /2/$$

$$H_{ad} = \frac{1}{2}\kappa \sum_{i\neq j} n_i n_j + \nu_0 \sum_i n_i , \qquad X_{ij}^{\alpha} = u_i^{\alpha} - u_j^{\alpha} ,$$

где вариационные параметры M_0, $A_{ij}^{\alpha\beta}$, κ, ν_0 определяются минимумом модельной свободной энергии

$$F_{mod} = -\beta^{-1}\ln Sp\, e^{-H_0\beta} + \langle H-H_0\rangle_0 \geq -\beta^{-1}\ln Sp\, e^{-\beta H} , \quad \beta = \frac{1}{kT}.$$

Здесь индекс (0) означает, что усреднение разности /1/ и /2/ проводится по гамильтониану /2/ и u_i^{α} является α-компонентой смещения i-того атома из положения равновесия /для простоты мы ограничиваемся гармоническим членом/. Смещения u_i^{α}, как обычно, определяются формулами

$$R_i^{\alpha} = \langle R_i^{\alpha}\rangle + u_i^{\alpha} = i^{\alpha} + u_i^{\alpha} ; \quad \alpha = 1,2,$$

$$\langle 0\rangle = \frac{Sp[0\, e^{-\beta H}]}{Sp[e^{-\beta H}]} .$$

Среднее от разности $H-H_0$ запишется

$$\langle H-H_0\rangle_0 = \frac{1}{2}\sum_i \langle \vec{P}_i^2\rangle_{ph}\left[\left\langle\frac{1}{M+mn_i}\right\rangle_{ad} - \frac{1}{M_0}\right] + \frac{1}{2}\left\langle\sum_{i\neq j}\phi(\vec{R}_i-\vec{R}_j)\right\rangle_{ph} -$$

$$-\frac{1}{4}\sum_{i\neq j} A_{ij}^{\alpha\beta}\langle X_{ij}^{\alpha} X_{ij}^{\beta}\rangle_{ph} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\langle n_i n_j\rangle_{ad}\left[\langle J(\vec{R}_i-\vec{R}_j)\rangle_{ph} - \kappa\right] +$$

$$+ (\nu-\nu_0)\sum_i \langle n_i\rangle_{ad} .$$

Среднее по модельному гамильтониану H_{ph} от потенциалов взаимодействия $\phi(\vec{R}_i-\vec{R}_j)$, $J(\vec{R}_i-\vec{R}_j)$ удобно представить в виде /2/:

$$\langle J(\vec{R}_i-\vec{R}_j)\rangle_{ph} = \exp\left[\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\langle X_{ij}^{\alpha} X_{ij}^{\beta}\rangle_{ph}\nabla_i^{\alpha}\nabla_i^{\beta}\right] J(\vec{i}-\vec{j}) \equiv \tilde{J}(\vec{i}-\vec{j}), \qquad /3/$$

$$\langle \phi(\vec{R}_i-\vec{R}_j)\rangle_{ph} = \exp\left[\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\langle X_{ij}^{\alpha} X_{ij}^{\beta}\rangle_{ph}\nabla_i^{\alpha}\nabla_i^{\beta}\right]\phi(\vec{i}-\vec{j}) \equiv \tilde{\phi}(\vec{i}-\vec{j}).$$

Условия минимума модельной свободной энергии

$$\frac{\delta F_{mod}}{\delta M_0} = \frac{\delta F_{mod}}{\delta A_{k\ell}^{\gamma\delta}} = \frac{\delta F_{mod}}{\delta\kappa} = \frac{\delta F_{mod}}{\delta\nu_0} = 0$$

дают следующее уравнение для параметров H_0

$$\kappa = \tilde{J}(\vec{i}-\vec{j}),$$

$$A_{k\ell}^{\gamma\delta} = \nabla_k^{\gamma}\nabla_k^{\delta}\tilde{\phi}(\vec{k}-\vec{\ell}) + \langle n_k n_\ell\rangle_{ad}\nabla_k^{\gamma}\nabla_k^{\delta}\tilde{J}(\vec{k}-\vec{\ell})$$

$$\frac{1}{M_0} = \left\langle\frac{1}{M+mn_i}\right\rangle_{ad} = \frac{1}{M} + \langle n_i\rangle_{ad}\left(\frac{1}{M+m} - \frac{1}{M}\right), \qquad /4/$$

$$\nu_0 = \nu + \frac{1}{2}\langle \vec{P}_i^2\rangle_{ph}\left(\frac{1}{M+m} - \frac{1}{M}\right).$$

При этом /в теории поверхностных явлений $\langle n_i\rangle \equiv \left\langle\frac{\sum_i n_i}{N}\right\rangle$ называется покрытием и обозначается θ/ зависимость $\frac{1}{M_0}$ от $\langle n_i\rangle_{ad}$, мы нашли, использовав, как и выше, проекционное свойство $n_i (n_i^2 = n_i)$.

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЙ СПЕКТР ПОВЕРХНОСТИ ПРИ УЧЕТЕ АДСОРБЦИИ

Будем рассматривать второе уравнение /4/, т.е. уравнение

$$A^{\gamma\delta}_{k\ell} = \nabla^{\gamma}_{k} \nabla^{\delta}_{k} \tilde{\phi}(\vec{k} - \vec{\ell}\,) + \nabla^{\gamma}_{k} \nabla^{\delta}_{k} \tilde{J}(\vec{k} - \vec{\ell}\,) < n_k n_\ell >_{ad}, \qquad /5/$$

в котором, напомним еще раз, равновесные положения определены выбором гамильтониана H_{ph}, но никаких других предположений мы не сделали. Чтобы проанализировать поведение колебательного спектра, надо моделировать поверхность и подсистему адатомов.

Предположим, что поверхность имеет структуру простой одноатомной кубической решетки. Пусть атомы этой поверхности взаимодействуют лишь со своими ближайшими соседями центральными и нецентральными силами взаимодействия. Предположим, что взаимодействие в подсистеме адатомов имеет характер центрального взаимодействия между парами ближайших соседей. Предположим еще, что эффект взаимодействия поверхность - подсистема адатомов приводит, кроме изменений констант взаимодействия /3/, к изменению параметра решетки, без изменения формы ячейки ($a_0 \to a$). Тогда уравнение /5/ определяет элементы матрицы силовых параметров $A^{\gamma\delta}_{k\ell}$ простой кубической решетки, но масса атомов теперь равна M_0/см. уравнение /4//.

В этом случае уравнение /4/

$$M e^{\alpha}_{\vec{q}j} \omega^2_{\vec{q}j} = \sum_{\ell\beta} e^{\beta}_{\vec{q}j} \Phi^{\alpha\beta}_{\ell 0} e^{-i\vec{q}\vec{\ell}}$$

для частот $\omega^2_{\vec{q}j}$ и векторов поляризации $\vec{e}_{\vec{q}j}$ / $\Phi^{\alpha\beta}_{\ell 0}$ - элементы матрицы силовых констант и M - масса атомов/ принимает очень простой вид

$$M_0 \omega^2_{\vec{q}j} = -\sum_{\ell} A^{\alpha\alpha}_{0\ell} e^{-i\vec{q}\vec{\ell}} \qquad /6/$$

Если представить матрицу $\| A^{\alpha\beta}_{0\ell} \|$ в виде

$$\| A^{\alpha\beta}_{01} \| = \| A^{\alpha\beta}_{03} \| = + \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}, \quad \| A^{\alpha\beta}_{02} \| = \| A^{\alpha\beta}_{04} \| = + \begin{pmatrix} A_2 & 0 \\ 0 & A_1 \end{pmatrix},$$

где A_1 - центральная и A_2 - нецентральная константы связи, то из /6/ следует

$$\begin{aligned} M_0 \omega^2_{\vec{q}j=1} &= 2A_1(1 - \cos q_1 a) + 2A_2(1 - \cos q_2 a), \\ M_0 \omega^2_{\vec{q}j=2} &= 2A_2(1 - \cos q_1 a) + 2A_1(1 - \cos q_2 a). \end{aligned} \qquad /7/$$

Корреляционная функция смещений

$$< X^{\alpha}_{\ell m} X^{\beta}_{\ell m} >_{ph} = \frac{\hbar}{MN} \sum_{\vec{q}j} \frac{e^{\alpha}_{\vec{q}j} e^{\beta}_{\vec{q}j}}{\omega_{\vec{q}j}} (1 - e^{i\vec{q}(\vec{\ell} - \vec{m})}) \operatorname{cotgh} \frac{1}{2} \hbar \beta \omega_{\vec{q}j}$$

с учетом свойств симметрии решетки

$$<(X^1_{0\ell})^2>_{ph} = <(X^2_{0\ell})^2>_{ph} \equiv <(X)^2>_{ph}$$

принимает вид

$$<(X)^2>_{ph} = \frac{\hbar}{2M_0 N} \sum_{\vec{q}j} \frac{1 - \cos q_1 a}{\omega_{\vec{q}j}} \operatorname{cotgh} \frac{1}{2} \hbar \beta \omega_{\vec{q}j}, \qquad /8/$$

где частоты $\omega_{\vec{q}j}$ удовлетворяют уравнению /7/. Аналитически $<(X)^2>_{ph}$ можно вычислить только в пределе высоких температур. Подставляя /7/ в /8/ и разлагая функцию cotgh по x, получаем

$$<(X)^2>_{ph} = \frac{1}{\beta\pi A_1} \left[\operatorname{arctg} \sqrt{\frac{A_1}{A_2}} + \frac{A_1}{A_2} \operatorname{arc\,cotg} \sqrt{\frac{A_1}{A_2}} \right]$$

для произвольных A_1, A_2. Если $A_1 \gg A_2$, то

$$<(X)^2>_{ph} = \frac{1}{\beta A_1} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{A_1}{A_2}} \right].$$

Для случая $A_1 = A_2 = A$

$$\langle (X)^2 \rangle_{ph} = \frac{1}{4\beta A_1}[1+\frac{A_1}{A_2}] = \frac{1}{2\beta A} .$$

Из /4/, /5/ и /7/ видно, что частота $\omega^2_{\vec{q}j}$ зависит теперь через A_1, A_2 и M_0 от парной корреляционной функции $\langle n_i n_j \rangle_{ad}$ и от покрытия $\theta = \langle n_i \rangle$. Заметим, что последнее входит и в $\langle n_i n_j \rangle_{ad}$ - смотри ниже, - и зависит от внешнего давления p и T [1,3]. Чтобы решить уравнение /7/ для частот ω, прежде всего надо задать функции $\phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$, $J(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$ и воспользоваться некоторым приближением для $\langle n_i \rangle_{ad}$ и $\langle n_i n_j \rangle_{ad}$ /i, j - ближайшие соседи/.

Разложим $\phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$, $J(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$ по смещениям атомов поверхности u_i^α из положения равновесия в случае, когда взаимосвязью между чистой поверхностью и системой адатомов пренебрегается, и ограничимся гармоническими членами

$$J(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = J_0 + \sum_\alpha b^\alpha_{ij} Y^\alpha_{ij} + \frac{1}{2}\sum_\alpha c^{\alpha\alpha}_{ij} Y^\alpha_{ij} Y^\alpha_{ij} ,$$

$$\phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \phi_0 + \frac{1}{2}\sum_\alpha B^{\alpha\alpha}_{ij} Y^\alpha_{ij} Y^\alpha_{ij} . \qquad /9/$$

J_0 - эффективное взаимодействие между хемисорбированными адатомами на жесткой решетке $(J_0 > 0)$, $Y^\alpha_{ij} = u^\alpha_i - u^\alpha_j$.

Если включить теперь взаимодействие между этими подсистемами, то колебания будут происходить около новых положений равновесия, но без изменения формы ячейки. Подстановкой

$$Y^\alpha_{ij} = \tilde{X}^\alpha_{ij} + X^\alpha_{ij}$$

в /9/ получим разложение ϕ и J по смещениям из этих новых положений равновесия.

$$J(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = J_0 + \sum_\alpha [b^\alpha_{ij} \tilde{X}^\alpha_{ij} + \frac{1}{2} c^{\alpha\alpha}_{ij} (\tilde{X}^\alpha_{ij})^2] +$$

$$+ \sum_\alpha [b^\alpha_{ij} + c^{\alpha\alpha}_{ij} \tilde{X}^\alpha_{ij}] X^\alpha_{ij} + \frac{1}{2}\sum_\alpha c^{\alpha\alpha}_{ij} (X^\alpha_{ij})^2 , \qquad /10/$$

$$\phi(\vec{R}_i - \vec{R}_j) = \phi_0 + \frac{1}{2}\sum_\alpha B^{\alpha\alpha}_{ij} (\tilde{X}^\alpha_{ij})^2 + \sum_\alpha B^{\alpha\alpha}_{ij} \tilde{X}^\alpha_{ij} X^\alpha_{ij} +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_\alpha B^{\alpha\alpha}_{ij} (X^\alpha_{ij})^2 .$$

Из /10/ нетрудно найти среднее от $J(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$ по гамильтониану H_{ph} /2/.

$$\langle J(\vec{R}_i - \vec{R}_j)\rangle_{ph} \equiv \tilde{J}(\vec{i}-\vec{j}) = J_0 + \sum_\alpha [b^\alpha_{ij} \tilde{X}^\alpha_{ij} + \frac{1}{2} c^{\alpha\alpha}_{ij} (\tilde{X}^\alpha_{ij})^2] + \qquad /11/$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_\alpha c^{\alpha\alpha}_{ij} \langle (X^\alpha_{ij})^2 \rangle_{ph} ,$$

где корреляционная функция смещений $\langle (X^\alpha_{ij})^2 \rangle_{ph}$ определяется /8/. $\tilde{X}^\alpha_{ij}$ определяется заданием внешнего давления p, которое можно выразить через средние силы [5]. При наших предположениях должно выполняться соотношение $\tilde{X}^\alpha_{ij} = \tilde{X}^\alpha_{\ell 0} = \tilde{X}_0 \frac{\ell^\alpha}{a}$ для любой пары ближайших соседей. Введем еще следующие обозначения

$$||B^{\alpha\beta}_{01}|| = ||B^{\alpha\beta}_{03}|| = +\begin{pmatrix} B_1 & 0 \\ 0 & B_2 \end{pmatrix} \qquad ||c^{\alpha\beta}_{01}|| = ||c^{\alpha\beta}_{03}|| = +\begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$||B^{\alpha\beta}_{02}|| = ||B^{\alpha\beta}_{04}|| = +\begin{pmatrix} B_2 & 0 \\ 0 & B_1 \end{pmatrix} \qquad ||c^{\alpha\beta}_{02}|| = ||c^{\alpha\beta}_{04}|| = +\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & c \end{pmatrix}$$

$$||b^\alpha_{01}|| = -||b^\alpha_{03}|| = +\begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \qquad ||b^\alpha_{02}|| = -||b^\alpha_{04}|| = +\begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix}, \qquad /12/$$

тогда

$$p = -\frac{1}{4v}\sum_{\ell\alpha} [B^{\alpha\alpha}_{0\ell} \tilde{X}^\alpha_{\ell 0} + \langle n_0 n_\ell \rangle_{ad} (-b^\alpha_{0\ell} + c^{\alpha\alpha}_{0\ell} \tilde{X}^\alpha_{\ell 0})]\ell^\alpha$$

и для $\tilde{X}_0$ имеем следующее выражение:

$$\tilde{X}_0 = \frac{-\frac{vp}{a} + b\psi}{B_1 + c\psi} = \frac{-\frac{vp}{a} + b\psi}{A_1}, \qquad /13/$$

где $\psi = \langle n_i n_j \rangle_{ad}$ - парная корреляционная функция системы адатомов. С учетом /13/ можно переписать перенормированные взаимодействия между ближайшими адатомами в виде

$$\langle J(\vec{R}_i - \vec{R}_j)\rangle_{ph} = \tilde{J} = J_0 - b\tilde{X}_0 + \frac{c}{2}(\tilde{X}_0)^2 + \frac{c}{2}\langle (X)^2\rangle_{ph}. \qquad /14/$$

Если учесть /9/-/13/, то уравнения /5/ для перенормированных силовых параметров запишутся как

$$A_1 = B_1 + c\psi, \qquad /15/$$
$$A_2 = B_2.$$

Из соотношений /15/ видно, что знание парной корреляционной функции ψ при любых p и T /для любых покрытий θ / весьма существенно для анализа поведения спектра поверхностных колебаний.

АППРОКСИМАЦИИ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ СИСТЕМЫ АДАТОМОВ

Чтобы определить перенормированные частоты и силовые параметры решетки из /7/ и /15/, надо пользоваться какими-либо аппроксимациями /1-4/. Проанализируем эти уравнения в следующих аппроксимациях:

1/ Молекулярное поле

$$\psi = \langle nn\rangle = \langle n\rangle^2,$$

где

$$\langle n\rangle = \frac{1}{2}\{1 - \mathrm{tgh}\frac{\beta}{2}[\nu' + 4\kappa(\langle n\rangle - \frac{1}{2})]\}, \quad \nu' = \nu_0 + 2\kappa$$

и ν_0, κ определяются формулами /4/ и /14/;

2/ Квазихимическое приближение

$$\psi = \langle nn\rangle = \frac{(1-K)\,2\langle n\rangle - 1 \pm \sqrt{4(1-K)\langle n\rangle[\langle n\rangle - 1] + 1}}{2(1-K)}, \quad K = e^{-\beta\kappa}$$

$\langle n\rangle$ определяется из уравнения

$$r^2 = 4(\langle n\rangle - \frac{1}{2})^2 + e^{-\beta\kappa}[1 - 4(\langle n\rangle - \frac{1}{2})^2],$$

$$e^{\beta\nu'} = [\frac{r + 1 - 2\langle n\rangle}{r - 1 + 2\langle n\rangle}]^2[\frac{\langle n\rangle}{1 - \langle n\rangle}].$$

3/ Полиномиальное расцепление

$$\langle n\rangle = \sum_{k=0}^{4} C_4^k \langle n\rangle^k (1 - \langle n\rangle)^{4-k} N_k; \quad N_k = [1 + \exp\beta(\nu_0 + k\kappa)]^{-1},$$

$$\psi = \langle nn\rangle = \sum_{k=0}^{4} \frac{k}{4} C_4^k \langle n\rangle^k (1 - \langle n\rangle)^{4-k} N_k.$$

Последние две аппроксимации учитывают эффекты ближнего порядка, первая - нет.

4/ Можно показать, что при заполнениях поверхности $\langle n\rangle \lesssim 0{,}2$ или в случае сильного отталкивания $\kappa^{-1} \ll \beta$, $\kappa > 0$ для всех приближений можно считать, что

$$\psi = \langle nn\rangle = \langle n\rangle^2 e^{-\beta\kappa}, \quad \kappa \equiv \tilde{J}. \qquad /16/$$

Если учесть /13/, /14/, то уравнение для центральной константы связи A_1 /15/ принимает вид $(\beta\tilde{J} \gg 1)$

$$A_1 = B_1 + c\langle n\rangle^2 \exp\{-\beta[J_0 + b\frac{vp}{aB_1} + \frac{c}{2}(\frac{vp}{aB_1})^2 + \frac{c}{2}\langle (X)^2\rangle_{ph}]\}, \qquad /17/$$

если в выражении для $\tilde{X}_0$ мы пренебрежем ψ.

Для случая слабого отталкивания $\beta\tilde{J} \ll 1$ и небольшого покрытия подстановкой /16/ в /15/ получим

$$A_1 = B_1 + c\langle n\rangle^2 \exp\{-\beta[J_0 - b(-\frac{vp}{a} + b\psi)(B_1 + c\psi)^{-1}]\}.$$

Здесь учтены только первые члены в разложении $\tilde{J}$. Это выражение можно преобразовать к виду

$$A_1^2 - A_1[B_1 + \lambda + \bar{\kappa}(-J_0 + \frac{b^2}{c})] + \bar{\kappa} b(\frac{vp}{a} + \frac{bB_1}{c}) = 0 ,$$

/18/

$$\lambda = c\langle n\rangle^2, \quad \bar{\kappa} = c\beta\langle n\rangle^2 ,$$

если в экспоненте положить в соответствии с /15/ $\langle nn\rangle = \frac{A_1 - B_1}{c}$.

Когда можно считать, что $\tilde{X}_0$=O, то

$$A_1 = B_1 + c\langle n\rangle^2 \exp\{-\beta J_0 - \frac{\beta c}{2}\langle (X)^2\rangle_{ph}\}. \qquad /19/$$

Анализ поведения спектра /7/ требует, естественно, использования ЭВМ; в случае малых покрытий $(0 \leq \theta \leq 0{,}2)$, либо сильного отталкивания $(\kappa^{-1} \ll \beta)$ анализ, как это видно из /17/-/19/, сильно упрощается.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Федянин В.К. Метод корреляционных функций в модели Изинга , изд-во Тартусского государственного университета, 1971; ЭЧАЯ,1978, т. 9, вып. 4.*
2. *Загребнов В.А., Федянин В.К. ТМФ, 1972, 1О, с. 127.*
3. *Федянин В.К. I Всесоюзная конференция по поверхностным явлениям. Изд.-во ЛГУ, Л., 1973, с. 25.*
4. *Марадудин А.А., Монтролл Э., Вейсс Дж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, изд-во "Мир", М., 1965.*
5. *Федянин В.К. В сб.: "Статистическая физика и квантовая теория поля" под ред. академика Н.Н.Боголюбова. "Наука", М., 1973.*

Рукопись поступила в издательский отдел
22 мая 1979 года.