СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

P17 - 9361

О.О.Сушкова, В.К.Федянин

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ФОНОНАМИ В УПОРЯДОЧИВАЮЩИХСЯ БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ

1975

P17 - 9361

О.О.Сушкова, В.К.Федянин

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ФОНОНАМИ В УПОРЯДОЧИВАЮЩИХСЯ БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ

В работах [I-4] предложен подход к теории идеальных и неидеальных (примесных) бинарных систем, основой которого является метод функций Грина и корреляционных функций. Однако при этом не учитывалось влияние колебаний самой кристаллической решетки. В действительности следует ожидать, что фононная подсистема играет заметную роль, приводя к перенормировке обменного интеграла, сдвигу T_c и т.д., и, в свою очередь, явления в упорядочивающейся подсистеме приводят к перенормировке фононных частот и модификации равновесных положений ионов.

В настоящей статье мы рассмотрим общую постановку задачи, а также остановимся на влиянии упорядочивающейся подсистемы на фононный спектр частот. Для того, чтобы получить достаточно обозримые результаты, воспользуемся методом, предложенным в свое время в [5] и развитым впоследствии применительно к магнитной задаче Изинга в [6]. Колебания решетки будут рассмотрены в псевдогармоническом приближении [7], дающем возможность использовать сформулированный в [2] подход к проблеме упорядочения.

Запишем полный гамильтониан системы следующим образом:

$$\hat H = \hat H_a + \hat H_{ph},$$

где $\hat H_a$ - гамильтониан упорядочивающейся подсистемы, $\hat H_{ph}$ - гамильтониан фононной подсистемы. Согласно работе [2], при учете взаимодействия между ближайшими соседями для $\hat H_a$ получим

$$\hat H_a = -\sum_{\alpha\beta} v_{BB}(\vec R_\alpha - \vec R_\beta) - \sum_{\alpha\beta} v(\vec R_\alpha - \vec R_\beta)\hat n_\alpha - \sum_{\alpha\beta} v(\vec R_\alpha - \vec R_\beta)\hat n_\beta +$$
$$+ \sum_{\alpha\beta} v(\vec R_\alpha - \vec R_\beta)\hat n_\alpha \hat n_\beta + \sum_{\alpha\beta} v(\vec R_\alpha - \vec R_\beta)\hat n_\beta \hat n_\alpha, \qquad (I)$$

или

$$\hat{H}_a = -\sum_{\alpha\beta} v'(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) - \sum_{\alpha\beta} v(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta)\hat{\gamma}(\hat{n}_\alpha,\hat{n}_\beta), \tag{2}$$

$$v'(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) = v_{BB}(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) + \frac{1}{2}v(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta),$$

$$\hat{\gamma}(\hat{n}_\alpha,\hat{n}_\beta) = -\hat{n}_\alpha\hat{n}_\beta - \hat{n}_\beta\hat{n}_\alpha + \hat{n}_\alpha + \hat{n}_\beta - \frac{1}{2}.$$

Гамильтониан фононной подсистемы можно записать в виде

$$\hat{H}_{ph} = \sum_\alpha \frac{P_\alpha^2}{2M_A}\hat{n}_\alpha + \sum_\beta \frac{P_\beta^2}{2M_A}\hat{n}_\beta + \sum_\beta \frac{P_\beta^2}{2M_B}(1-\hat{n}_\beta) + \sum_\alpha \frac{P_\alpha^2}{2M_B}(1-\hat{n}_\alpha) + \sum_{\alpha\beta}\varphi(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta). \tag{3}$$

$\varphi(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta)$ – парный потенциал взаимодействия. В формулах (I)-(3)

$$R_f^\nu = f^\nu + u_f^\nu, \quad \nu = 1,2,3; \quad f=\alpha,\beta, \quad f^\nu = \langle R_f^\nu\rangle \tag{4}$$

u_f^ν – ν-ая компонента смещения f-го иона из положения равновесия.

Таким образом, $\varphi(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta)$, $v'(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta)$ и $v(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta)$ являются операторами по смещениям u_f^ν. Полный гамильтониан системы с учетом (I)-(3) приобретает вид

$$\hat{H} = -\sum_{\alpha\beta} v'(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) + \sum_{\alpha\beta}\varphi(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) - \sum_{\alpha\beta} v(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta)\hat{\gamma}(\hat{n}_\alpha,\hat{n}_\beta) + \sum_\alpha \frac{P_\alpha^2}{2M_B} + \sum_\beta \frac{P_\beta^2}{2M_B} + \sum_\alpha P_\alpha^2\left(\frac{1}{2M_A}-\frac{1}{2M_B}\right)\hat{n}_\alpha + \sum_\beta P_\beta^2\left(\frac{1}{2M_A}-\frac{1}{2M_B}\right)\hat{n}_\beta. \tag{5}$$

Аппроксимируем гамильтониан (5) следующим модельным гамильтонианом:

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\tau_{\alpha\beta}^{\nu\mu} x_{\alpha\beta}^\nu x_{\alpha\beta}^\mu - \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta}\hat{\gamma}(\hat{n}_\alpha,\hat{n}_\beta) + \sum_\alpha \frac{P_\alpha^2}{2M_B} + \sum_\beta \frac{P_\beta^2}{2M_B} + \sum_\alpha P_\alpha^2\left(\frac{1}{2M_A}-\frac{1}{2M_B}\right)\hat{n}_\alpha + \sum_\beta P_\beta^2\left(\frac{1}{2M_A}-\frac{1}{2M_B}\right)\hat{n}_\beta, \tag{6}$$

где $x_{\alpha\beta}^\nu = u_\alpha^\nu - u_\beta^\nu$; $\tau_{\alpha\beta}^{\nu\mu}$, $t_{\alpha\beta}$ – вариационные параметры, подлежащие определению.

Тогда

$$\langle\hat{H}-\hat{H}^{(0)}\rangle = \sum_{\alpha\beta}\langle\varphi(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) - v'(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta)\rangle_{ph} - \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\tau_{\alpha\beta}^{\nu\mu}\langle x_{\alpha\beta}^\nu x_{\alpha\beta}^\mu\rangle_{ph} - \sum_{\alpha\beta}\langle\hat{\gamma}(\hat{n}_\alpha,\hat{n}_\beta)\rangle_a \langle v(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) - t_{\alpha\beta}\rangle_{ph}. \tag{7}$$

Для определения вариационных параметров имеем два уравнения, которые следуют из условия минимума модельной свободной энергии /6,7/

$$\tau_{\alpha\beta}^{\nu\mu} - \nabla_\alpha^\nu\nabla_\alpha^\mu\tilde{\varphi}(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) + \nabla_\alpha^\nu\nabla_\alpha^\mu\tilde{v}'(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) + \nabla_\alpha^\nu\nabla_\alpha^\mu\tilde{v}(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta)\langle\hat{\gamma}\rangle = 0,$$
$$\tilde{v}(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) - t_{\alpha\beta} = 0, \tag{8}$$

причем потенциалы с тильдой определены следующим образом:

$$\tilde{v}(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) \equiv \langle v(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta)\rangle_{ph} = \exp\left[\frac{1}{2}\sum_{\nu\mu}\langle x_{\alpha\beta}^\nu x_{\alpha\beta}^\mu\rangle_{ph}\nabla_\alpha^\nu\nabla_\alpha^\mu\right]v(\vec{R}_\alpha-\vec{R}_\beta) \tag{9}$$

и т.д.

Гамильтониан $\hat{H}^{(0)}$ с определенными по (8) значениями $t_{\alpha\beta}$ и $\tau_{\alpha\beta}^{\nu\mu}$ отвечает приближению невзаимодействующих фононной и упорядочивающейся подсистем, силовые константы и обменные интегралы в которых, однако, перенормированы по (8), причем эффекты ангармонизма колебаний ионов учтены во всех порядках разложения по смещениям в пренебрежении неупругими процессами (эффектами затухания) /7/.

Для упорядочивающейся подсистемы по стандартной методике/2/ можно построить систему уравнений для антикоммутаторных функций Грина G_j, которая будет включать в себя и функции Грина "смешанного типа"

$$\mathcal{J}_0 = \sum_i \langle\langle \hat{a}_f v(\vec{R}_f-\vec{R}_{g_i}) | \hat{a}_f^+\rangle\rangle_\omega; \quad \mathcal{J}_1 = \langle\langle \hat{a}_f \sum_i v(\vec{R}_f-\vec{R}_{g_i})\hat{n}_{g_i} | \hat{a}_f^+\rangle\rangle_\omega$$

и т.д. Здесь g_i нумерует узлы, ближайшие к узлу f, усреднение проводится с полным гамильтонианом (I). Если, далее, в системе уравнений для G_j, y_1 постулировать расцепление

$$y_0 = \sum_i \langle\langle \hat a_f v(\vec R_f - \vec R_{g_i}) | \hat a_f^+ \rangle\rangle_\omega \to \langle \sum_i v(\vec R_f - \vec R_{g_i}) \rangle G_0, \qquad (10)$$

$$y_1 = \langle\langle \hat a_f \sum_i v(\vec R_f - \vec R_{g_i}) \hat n_{g_i} | \hat a_f^+ \rangle\rangle_\omega \to \langle \sum_i v(\vec R_f - \vec R_{g_i}) \rangle G_1$$

и т.д., то мы приходим к системе уравнений для гриновских функций, использованных в работе /2/, в которой обменная константа v учитывает эффекты взаимодействия с фононами по (8) и (9). Это приводит к системе точных алгебраических уравнений для корреляционных функций /2/, в коэффициентах которой необходимо лишь заменить обменную константу v на функцию температуры и параметров системы $\tilde v(\vec R_\alpha - \vec R_\beta)$, которая определяется по формуле (9). Естественно, что и эффекты взаимодействия с фононами в рамках тех или иных аппроксимаций (они обсуждались в /2/), можно рассмотреть, если в соответствующих формулах для корреляционных функций в этих аппроксимациях заменить v на $\tilde v(\vec R_\alpha - \vec R_\beta)$ по (9) .

Таким образом, нам необходимо знание парных корреляторов $\langle x_{\alpha\beta}^\nu x_{\alpha\beta}^\mu \rangle_{ph}$ для ν- и μ-компонент разностей смещений в соседних узлах α и β . Остановимся кратко на методике получения соответствующей системы уравнений.

Согласно (6) для фононной подсистемы модельный гамильтониан

$$\hat H_{ph}^{(\nu)} = \sum_\alpha \frac{p_\alpha^2}{2M_B} + \sum_\beta \frac{p_\beta^2}{2M_B} + \sum_\alpha \frac{\Delta M}{2M_A M_B} p_\alpha^2 \hat n_\alpha + \sum_\beta \frac{\Delta M}{2M_A M_B} p_\beta^2 \hat n_\beta^+ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} r_{\alpha\beta}^{\nu\mu} x_{\alpha\beta}^\nu x_{\alpha\beta}^\mu , \qquad (11)$$

$$\Delta M = M_B - M_A .$$

Введем функции Грина

$$\langle\langle u_l^\nu(\alpha_1) | u_m^\mu(\alpha) \rangle\rangle \equiv g_{lm}^{\nu\mu}(\alpha_1, \alpha),$$
$$\langle\langle u_l^\nu(\alpha) | u_m^\mu(\beta) \rangle\rangle \equiv g_{lm}^{\nu\mu}(\alpha, \beta), \qquad (12)$$
$$\langle\langle u_l^\nu(\beta) | u_m^\mu(\alpha) \rangle\rangle \equiv g_{lm}^{\nu\mu}(\beta, \alpha),$$
$$\langle\langle u_l^\nu(\beta_1) | u_m^\mu(\beta) \rangle\rangle \equiv g_{lm}^{\nu\mu}(\beta_1, \beta),$$

l, m – индексы узлов, которые имеют радиус-векторы

$$l^\nu(\alpha) = \overline{l^\nu(\alpha)} + u_l^\nu(\alpha),$$
$$m^\mu(\alpha) = \overline{m^\mu(\alpha)} + u_m^\mu(\alpha).$$

и т.д.

Постулируя теперь, что

$$\langle\langle p_l^\nu(\alpha_1) \hat n_\alpha | u_m^\mu(\alpha) \rangle\rangle \to \bar n_\alpha \langle\langle p_l^\nu(\alpha_1) | u_m^\mu(\alpha) \rangle\rangle$$
$$\langle\langle p_l^\nu(\beta_1) \hat n_\beta | u_m^\mu(\beta) \rangle\rangle \to \bar n_\beta \langle\langle p_l^\nu(\beta_1) | u_m^\mu(\beta) \rangle\rangle$$

и т.д.,

несложно получить для введенных функций Грина уравнения

$$\omega g_{lm}^{\nu\mu}(\alpha_1, \alpha; \omega) = i C_1 \langle\langle p_l^\nu(\alpha_1) | u_m^\mu(\alpha) \rangle\rangle_\omega ,$$
$$\omega g_{lm}^{\nu\mu}(\alpha, \beta; \omega) = i C_1 \langle\langle p_l^\nu(\alpha) | u_m^\mu(\beta) \rangle\rangle_\omega , \qquad (13)$$
$$\omega g_{lm}^{\nu\mu}(\beta, \alpha; \omega) = i C_2 \langle\langle p_l^\nu(\beta) | u_m^\mu(\alpha) \rangle\rangle_\omega ,$$
$$\omega g_{lm}^{\nu\mu}(\beta_1, \beta, \omega) = i C_2 \langle\langle p_l^\nu(\beta_1) | u_m^\mu(\beta) \rangle\rangle_\omega ,$$

$$C_1 = \frac{1}{M_B} + \bar n_\alpha \frac{\Delta M}{M_A M_B} = \frac{x_A}{M_A} + \frac{x_B}{M_B} + \frac{\Delta M}{M_A M_B} x_A S,$$
$$C_2 = \frac{1}{M_B} + \bar n_\beta \frac{\Delta M}{M_A M_B} = \frac{x_A}{M_A} + \frac{x_B}{M_B} - \frac{\Delta M}{M_A M_B} x_A S, \qquad (14)$$

причем в последних равенствах использованы соотношения (6) работы /2/ .

Функции Грина, стоящие в правой части уравнений (I3), подчиняются, в свою очередь, некоторым уравнениям. Например,

$$\omega \langle\langle P_\ell^{\nu}(\alpha_1) | U_m^{\mu}(\alpha) \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2\pi}\delta_{\ell m}\delta_{\nu\mu} - i\sum_{m'\mu'} r_{\ell m'}^{\nu\mu'}\left[\langle\langle U_\ell^{\mu'}(\alpha_1) | U_m^{\mu}(\alpha)\rangle\rangle_\omega - \langle\langle U_{m'}^{\mu'}(\beta) | U_m^{\mu}(\alpha)\rangle\rangle_\omega\right]$$

Подставляя подобные уравнения в систему (I3), получим

$$\omega^2 g_{\ell m}^{\nu\mu}(\alpha_1,\alpha;\omega) = c_1\Big[\frac{i\delta_{\ell m}\delta_{\nu\mu}}{2\pi} + \sum_{m'\mu'} r_{\ell m'}^{\nu\mu'}(\alpha_1,\beta)\big[g_{\ell m}^{\mu'\mu}(\alpha_1,\alpha;\omega) - g_{m'm}^{\mu'\mu}(\beta,\alpha;\omega)\big]\Big],$$

$$\omega^2 g_{\ell m}^{\nu\mu}(\alpha,\beta,\omega) = c_2\sum_{m'\mu'} r_{\ell m'}^{\nu\mu'}(\alpha,\beta_1)\big[g_{\ell m}^{\mu'\mu}(\alpha,\beta;\omega) - g_{m'm}^{\mu'\mu}(\beta_1,\beta;\omega)\big],$$

$$\omega^2 g_{\ell m}^{\nu\mu}(\beta,\alpha;\omega) = c_2\sum_{\ell'\nu'} r_{\ell'\ell}^{\nu'\nu}(\alpha_1,\beta)\big[g_{\ell m}^{\nu'\mu}(\beta,\alpha;\omega) - g_{\ell' m}^{\nu'\mu}(\alpha_1,\alpha;\omega)\big], \tag{I5}$$

$$\omega^2 g_{\ell m}^{\nu\mu}(\beta_1,\beta,\omega) = c_2\Big[\frac{i\delta_{\ell m}\delta_{\nu\mu}}{2\pi} + \sum_{\ell'\nu'} r_{\ell'\ell}^{\nu'\nu}(\alpha,\beta_1)\big[g_{\ell m}^{\nu'\mu}(\beta_1,\beta;\omega) - g_{\ell' m}^{\nu'\mu}(\alpha,\beta;\omega)\big]\Big].$$

Разложим теперь функции Грина в ряд Фурье :

$$g_{\ell m}^{\nu\mu}(\alpha_1,\alpha;\omega) = \frac{2}{N}\sum_{\vec q} g_1^{\nu\mu}(\vec q,\omega)\, e^{i\vec q(\vec\ell(\alpha_1)-\vec m(\alpha))},$$

$$g_{\ell m}^{\nu\mu}(\alpha,\beta;\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\vec q} g_2^{\nu\mu}(\vec q,\omega)\, e^{i\vec q(\vec\ell(\alpha)-\vec m(\beta))}, \tag{I6}$$

$$g_{\ell m}^{\nu\mu}(\beta,\alpha;\omega) = \frac{1}{N}\sum_{\vec q} g_3^{\nu\mu}(\vec q,\omega)\, e^{i\vec q(\vec\ell(\beta)-\vec m(\alpha))},$$

$$g_{\ell m}^{\nu\mu}(\beta_1,\beta,\omega) = \frac{2}{N}\sum_{\vec q} g_4^{\nu\mu}(\vec q,\omega)\, e^{i\vec q(\vec\ell(\beta_1)-\vec m(\beta))},$$

а затем по собственным векторам $e_j^{\nu}(\vec q)$:

$$\sum_j e_j^{\nu}(\vec q)\, e_j^{\mu}(\vec q) = \delta_{\nu\mu}, \quad \sum_\nu e_j^{\nu}(\vec q)\, e_{j'}^{\nu}(\vec q) = \delta_{jj'},$$

и поставим задачу на определение собственных значений двух матриц, $\mathcal{D}_1^{\nu\mu'}$ и $\mathcal{D}_2^{\nu\mu'}(\vec q)$:

$$\sum_{\mu'} \mathcal{D}_1^{\nu\mu'} e_j^{\mu'} = \omega_j^2 e_j^{\nu}, \qquad \sum_{\mu'} \mathcal{D}_2^{\nu\mu'}(\vec q)\, e_j^{\mu'} = \omega_j^2(\vec q)\, e_j^{\nu}, \tag{I7}$$

$$\sum_{\mu'} \mathcal{D}_1^{\nu\mu'} = \sum_{m'\mu'} r_{\ell m'}^{\nu\mu'}, \qquad \sum_{\mu'} \mathcal{D}_2^{\nu\mu'}(\vec q) = \sum_{m'\mu'} r_{\ell m'}^{\nu\mu'} e^{i\vec q(\vec m'(\beta)-\vec\ell(\alpha))}. \tag{I8}$$

Тогда для функций Грина $g_i^{jj'}$ получаем:

$$g_1^{jj'} = \frac{i}{2\pi}\delta_{jj'}\left(\frac{A_1}{\omega^2-\omega_1^2} - \frac{B_1}{\omega^2-\omega_2^2}\right),$$

$$g_2^{jj'} = g_3^{jj'} = \frac{i}{\pi}\delta_{jj'} A_2\left(\frac{1}{\omega^2-\omega_1^2} - \frac{1}{\omega^2-\omega_2^2}\right), \tag{I9}$$

$$g_4^{jj'} = \frac{i}{2\pi}\delta_{jj'}\left(\frac{A_3}{\omega^2-\omega_1^2} - \frac{B_3}{\omega^2-\omega_2^2}\right).$$

Здесь

$$\omega_1^2 = \frac{c_1+c_2}{2}\omega_j'^2 - \frac{1}{2}\sqrt{(c_1-c_2)^2\omega_j'^4 + 4c_1c_2\omega_j^4},$$

$$\omega_2^2 = \frac{c_1+c_2}{2}\omega_j'^2 + \frac{1}{2}\sqrt{(c_1-c_2)^2\omega_j'^4 + 4c_1c_2\omega_j^4}, \tag{20}$$

$$A_1 = \frac{c_1}{2R}\left(\frac{c_2-c_1}{2}\omega_j'^2 + R\right),$$

$$B_1 = \frac{c_1}{2R}\left(\frac{c_2-c_1}{2}\omega_j'^2 - R\right),$$

$$A_2 = \frac{\omega_j^2 c_1 c_2}{2R}, \tag{21}$$

$$A_3 = \frac{c_2}{2R}\left(\frac{c_1-c_2}{2}\omega_j'^2 + R\right),$$

$$B_3 = \frac{c_2}{2R}\left(\frac{c_1-c_2}{2}\omega_j'^2 - R\right), \qquad R = \frac{1}{2}\sqrt{(c_1-c_2)^2\omega_j'^4 + 4c_1c_2\omega_j^4}.$$

По формулам (I6)-(2I) можно определить исходные функции Грина (I2), по ним найти спектральные интенсивности (6), а затем и искомые средние $\langle x^{\nu}_{\alpha\beta} x^{\mu}_{\alpha\beta} \rangle$:

$$\langle x^{\nu}_{\ell m}(\alpha,\beta)\, x^{\mu}_{\ell m}(\alpha,\beta)\rangle = \frac{2}{N}\sum_{\vec q, j} e^{\nu}_{j}(\vec q)\, e^{\mu}_{j}(\vec q)\times$$
$$\times\Big[\frac{1}{\omega_1}\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta\omega_1}{2}\Big(\frac{A_1+A_3}{2} - A_2\cos\vec q\,(\vec\ell(\alpha)-\vec m(\beta))\Big) - \qquad (22)$$
$$-\frac{1}{\omega_2}\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta\omega_2}{2}\Big(\frac{B_1+B_3}{2} - A_2\cos\vec q\,(\vec\ell(\alpha)-\vec m(\beta))\Big)\Big].$$

В заключение обсудим уравнения (20), определяющие перенормированный за счет процесса упорядочения фононный спектр частот. При учете взаимодействия ближайших соседей и при условии, что обменный интеграл линейно зависит от изменения межатомного расстояния [6], вместо (20) получим уравнения:

$$\omega_1^2(\vec q) = z\tilde\varphi''(\ell)\frac{(\vec e_j\vec\ell)^2}{\ell^2}\Big[\frac{x_A}{M_A}+\frac{x_B}{M_B}-\sqrt{\frac{(\Delta M)^2}{M_A^2M_B^2}x_A^2 s^2(1-\cos^2\vec q\vec\ell_j)+\Big(\frac{x_A}{M_A}+\frac{x_B}{M_B}\Big)^2\cos^2\vec q\vec\ell_j}\,\Big], \qquad (23)$$

$$\omega_2^2(\vec q) = z\tilde\varphi''(\ell)\frac{(\vec e_j\vec\ell)^2}{\ell^2}\Big[\frac{x_A}{M_A}+\frac{x_B}{M_B}+\sqrt{\frac{(\Delta M)^2}{M_A^2M_B^2}x_A^2 s^2(1-\cos^2\vec q\vec\ell_j)+\Big(\frac{x_A}{M_A}+\frac{x_B}{M_B}\Big)^2\cos^2\vec q\vec\ell_j}\,\Big]. \qquad (23)$$

Частота ω_1 соответствует акустическим колебаниям, а ω_2 - оптическим, в чем нетрудно убедиться, рассмотрев предельный случай $\vec q \to 0$. Если нас интересует полностью упорядоченная структура, то, полагая $s=1$, $x_A = x_B = \frac{1}{2}$, получим оптические и акустические ветви частот для системы частиц с неравными массами M_A и M_B, которые в одномерном случае совпадают с частотами, найденными в [9] для цепочки из двух сортов частиц с чередованием ABABAB ...

Остановимся теперь на температурах $T > T_c$, при этом $s = 0$ и система полностью разупорядочена. В этом случае разделение

кристаллической решетки на подрешетки α и β (см. [2]) теряет смысл и мы должны описывать данную ситуацию на основе гамильтониана

$$\hat H = -\frac{1}{2}\sum_{fg} v_{BB}(\vec R_f-\vec R_g) - \sum_{fg} v(\vec R_f-\vec R_g)\hat\nu + \frac{1}{2}\sum_{fg}\varphi(\vec R_f-\vec R_g) + \qquad (24)$$
$$+\sum_f\frac{P_f^2}{2M_B} + \sum_f P_f^2\Big(\frac{1}{2M_A}-\frac{1}{2M_B}\Big)\hat n_f, \quad \hat\nu = \hat n_f - \hat n_f\hat n_g.$$

Проделывая теперь выкладки, полностью аналогичные приведенным выше, найдем модельный гамильтониан, вариационные параметры и т.д. Однако вместо четырех фононных функций Грина, введенных выше, теперь естественно рассматривать только одну: $\langle\langle u_f^{\nu} | u_g^{\mu}\rangle\rangle \equiv g_{fg}^{\nu\mu}$. Дальнейшие вычисления при прежних предположениях приводят, очевидно, к следующему уравнению для частот:

$$\omega_j^2(\vec q) = c z\tilde\varphi''(\ell)\frac{(\vec e_j\vec\ell)^2}{\ell^2}(1-\cos\vec q\vec\ell_j),$$
$$c = \frac{x_A}{M_A}+\frac{x_B}{M_B},$$

т.е. имеет место перенормировка только акустических фононов. Из формул (23) следует, что даже при $T \geqslant T_c$ имеются как бы две ветви частот: акустическая и оптическая. Однако только что приведенные рассуждения показывают, что частоты ω_2 должны быть отброшены: остается лишь ω_1. (Здесь возникает ситуация в определенном смысле эквивалентная той, которая рассмотрена в [9], когда делается предельный переход $M_A \to M_B$). Подобная ситуация имеет место в β-латуни. Экспериментальное изучение фононного спектра β-латуни проведено в [8]. В согласии с предсказаниями теории при $T < T_c$ наблюдается четкое разделение на акустические и оптические фононные пики, которые при $T > T_c$ переходят в один широкий пик. В случае равных масс $M_A = M_B$, когда в системе не может быть упорядочения, два уравнения (23) переходят в одно [9].

Отметим, что развитый в настоящей работе подход позволяет в принципе рассмотреть сдвиг критической температуры под влиянием взаимодействия с фононами, а также эффекты ангармонизма и некоторые другие вопросы, на которых мы здесь останавливаться не будем.

Литература

1. О.О.Сушкова, В.К.Федянин. ОИЯИ, Дубна, Р4-8952, 1975.
2. О.О.Сушкова, В.К.Федянин. ОИЯИ, Дубна, Р4-8953, 1975.
3. О.О.Сушкова, В.К.Федянин. ОИЯИ, Дубна, Р17-9359, 1975.
4. О.О.Сушкова, В.К.Федянин, ОИЯИ, Дубна, Р17-9360 , 1975.
5. С.В.Тябликов, Г.Конвент. ОИЯИ, Дубна, Р4-3794; Phys.Lett.,27A, 130, 1968.
6. В.А.Загребнов, В.К.Федянин. ТМФ, 10, 127, 1972; В.А.Загребнов, В.К.Федянин. Изв.АН СССР, сер.физическая, 7, 1972.
7. D.Hooton, O Phil.Mag., 46, 422, 1955; T.Kochler, Phys.Rev.Lett. 17, 89, 1966; M.Cohen, R.Martin, The Pseudoharmonic Theory of Lattice Vibrations, preprint,1966.
8. G.Gilat, G.Dolling, Phys.Rev., 138, A1053, 1965.
9. Л.Бриллюэн, М.Пароди. Распространение волн в периодических структурах. ИЛ, Москва, 1959.

Рукопись поступила в издательский отдел
8 декабря 1975 года.