

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



Б-897

9/II-75

P2 - 8697

2047/2-75

Х.Брэтер, В.Б.Приезжев

КОЛЕБАНИЯ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ
ДВУХАТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ

1975

P2 - 8697

Х.Брэттер, В.Б.Приезжев

КОЛЕБАНИЯ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ
ДВУХАТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ

*Направлено в *physica status solidi**

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Бретер Х., Приезжев В.Б.

P2 - 8697

Колебания разупорядоченной двухатомной цепочки

Методом когерентного потенциала вычислен спектр частот частично упорядоченной двухатомной цепочки, в которой степень разупорядоченности определяется концентрацией атомов одного сорта в подрешетке другого сорта. Энергетические щели исчезают задолго до возникновения полного беспорядка. Сравнивается плотность состояния, вычисленная методом когерентного потенциала, с точным колебательным спектром марковской цепочки для одних и тех же значений параметра ближнего порядка.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1975

Braeter H., Priezzhev V.B.

P2 - 8697

Vibrational Spectrum of Disordered Diatomic Chain

The vibrational spectrum of a linear diatomic chain with long range order is calculated in the coherent potential approximation. Defect bands are formed inside the gap between acoustical and optical bands and outside the bottom of the optical band. The energy gap disappears long before the chain becomes completely disordered. The density of states calculated in the coherent potential approximation is compared with the exact vibrational spectrum of the Markov chain for the same values of the short-range order parameter.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research

Dubna 1975

1. Введение

Колебательный спектр одномерной цепочки, состоящей из атомов двух сортов, расположенных в узлах цепочки случайным образом, изучался во многих работах /см., напр., /1-6//. В работе Дина /2/ спектр полностью разупорядоченной цепочки из 8000 атомов был получен в результате точных машинных расчетов, в работе /4/ применялось приближение когерентного потенциала /CPA/. Частично разупорядоченная цепочка с ближним порядком /марковская цепочка/ определяется вероятностью $W(W < \frac{1}{2})$ нахождения атома одного сорта в узле с номером $m+1$, при условии, что в предыдущем узле с номером m находится атом того же сорта. Колебание двухатомной цепочки, разупорядоченной таким образом, изучалось в работе /7/ методом Дина для цепочки из 8000 атомов. Распространение метода CPA на этот случай не производилось.

Частично разупорядоченная двухатомная цепочка с дальним порядком /немарковская цепочка/ состоит из двух подрешеток и определяется вероятностью с нахождения атома данного сорта в чужой подрешетке. Применение метода CPA для такой цепочки не связано с принципиальными трудностями. Возникает вопрос о влиянии дальнего порядка на динамические свойства разупорядоченной цепочки. В настоящей работе этот вопрос решается в рамках CPA. Спектр частот немарковской цепочки находится методом CPA для различных значений c . Затем используется связь между параметрами дальнего и ближнего порядков и производится сравнение спектров марковской цепочки, вычисленной методом Дина в работе /7/, со спектром немарковской цепочки, полученным

в рамках СРА для разных значений c . Попутно производится вычисление спектра частот в приближении средней t -матрицы^{/8/}. Вычисленный в этом приближении спектр при малой степени разупорядоченности сравнивается с результатами работы^{/9/}, в которой спектр частот вычислялся для случая, когда два атома в упорядоченной двухатомной цепочке меняются местами.

В п.2 описывается приближение средней t -матрицы и излагается метод когерентного потенциала в применении к указанной выше задаче.

В п.3 обсуждаются численные результаты, полученные на ЭВМ. Для удобства справок в *Приложении* приведены формулы для гриновской функции упорядоченной цепочки, используемой в тексте.

2. Неупорядоченная двухатомная цепочка

Рассмотрим две одномерные решетки с периодом a , находящиеся на относительном расстоянии $a/2$ друг от друга. Объединим пары соседних узлов в ячейку так, чтобы в одной ячейке находилось по одному узлу из первой и второй подрешеток. Нумерацию узлов будем производить с помощью величин $R_{\ell, a}$, где ℓ - номер ячейки ($1 < \ell < N$) и a - номер подрешетки. Пусть имеется два сорта атомов с массами M_1 и M_2 по N атомов каждого сорта. Расположение атомов можно описать числами заполнения $c_{\ell a}^{(i)}$ такими, что

$$c_{\ell a}^{(i)} = \begin{cases} 1, \text{ если в узле } R_{\ell a} \text{ атом } M_i, \\ 0 \text{ в другом случае.} \end{cases} \quad /1/$$

Пусть взаимодействуют только атомы, являющиеся ближайшими соседями. Силовую постоянную, которую будем считать не зависящей от сорта атомов, обозначим f . Функция Грина $G(\omega)$ для неупорядоченной цепочки определяется из уравнения

$$G(\omega) = P(\omega) + P(\omega)(L^0 - L)G(\omega); \quad /2/$$

здесь $P(\omega)$ - фурье-образ функции Грина упорядоченной решетки, определенной в *Приложении*, а L^0 и L - динамические матрицы упорядоченной и неупорядоченной решеток, соответственно. По определению динамической матрицы и вследствие /1/ имеем:

$$(L^0 - L)_{\ell\ell'aa'} = \sum_i c_{\ell a}^{(i)} (M_a - M_i) \omega^2 \delta_{\ell\ell'} \delta_{aa'}. \quad /3/$$

Такой вид возмущения $(L^0 - L)$ допускает представление $G(\omega)$ в виде^{/10/}:

$$G(\omega) = P(\omega) + P(\omega)T(\omega)P(\omega), \quad /4/$$

где

$$T(\omega) = \sum_{\ell, a} T_{\ell a} = \sum_{\ell, a} t_{\ell a} (1 + P \sum_{\ell', a' \neq \ell, a} T_{\ell' a'}) \quad /5/$$

и

$$t_{\ell a} = \sum_i \frac{c_{\ell a}^{(i)} (M_a - M_i) \omega^2}{1 - (M_a - M_i) \omega^2 P_{\ell\ell aa}}. \quad /6/$$

Итерируя /5/, получим:

$$T = \sum_{\ell a} t_{\ell a} (1 + P \sum_{\ell' a' \neq \ell, a} t_{\ell' a'}^+ P \sum_{\ell'' a'' \neq \ell', a'} t_{\ell'' a''}^+ \dots). \quad /7/$$

Усреднение /4/ по всем конфигурациям дает:

$$\bar{G}(\omega) = P(\omega) + P(\omega)\bar{T}(\omega)P(\omega). \quad /8/$$

Введем собственную энергию $\Sigma(\omega)$ гриновской функции $\bar{G}(\omega)$ следующим образом:

$$\bar{G}(\omega) = P(\omega) + P(\omega)\Sigma(\omega)\bar{G}(\omega). \quad /9/$$

Из сравнения /8/ и /9/ следует соотношение:

$$\Sigma(\omega)\bar{G}(\omega) = \bar{T}(\omega)P(\omega). \quad /10/$$

А. Приближение средней t -матрицы

Уравнения /4/-/10/ являются точными. Проведем теперь приближенное усреднение T -матрицы, учитывая, что атомы M_1 и M_2 распределены случайным образом в каждой подрешетке:

$$\tilde{T}(\omega) = \sum_{l\alpha} \tilde{t}_{l\alpha}(\omega) (1 + P(\omega)) \sum_{l'\alpha' \neq l, \alpha} \tilde{T}_{l'\alpha'}(\omega). \quad /11/$$

Проведенное приближение называется одноузельным /и будет в дальнейшем обозначаться волнистой чертой сверху, в отличие от точного усреднения, которое будем обозначать прямой чертой сверху/.

Пользуясь равенством $\sum_{l'\alpha' \neq l\alpha} \tilde{T}_{l'\alpha'} = T - T_{l\alpha}$, уравнение /11/ легко привести к виду

$$\tilde{T}_{l\alpha} = \frac{\tilde{t}_{l\alpha}}{1 + \tilde{t}_{l\alpha} P_{ll\alpha\alpha}} (1 + P\tilde{T}). \quad /12/$$

Подставляя /12/ в /10/ и учитывая /4/, получим:

$$\tilde{\Sigma}(\omega) = \sum_{l\alpha} \tilde{\sigma}_{l\alpha}(\omega) = \sum_{l\alpha} \frac{\tilde{t}_{l\alpha}}{1 + \tilde{t}_{l\alpha} P_{ll\alpha\alpha}}. \quad /13/$$

Напомним, что сделанное приближение для $\tilde{T}(\omega)$ справедливо при малых концентрациях примесей /8/. Уравнения /2/, /9/ и /13/ показывают, что в данном приближении $\tilde{G}(\omega)$ можно интерпретировать как функцию Грина $\tilde{G}(\omega)$, определяемую эффективной динамической матрицей \tilde{L} :

$$\tilde{L} = L^0 - \sum_{l\alpha} \tilde{\sigma}_{l\alpha}. \quad /14/$$

Заметим, что из-за конфигурационного усреднения функции $\tilde{c}_{l\alpha}^{(i)}$ и $\tilde{G}(\omega)$ обладают трансляционной симметрией упорядоченной двухатомной цепочки. Очевидно, что величины $\tilde{c}_{l_2}^{(1)} = \tilde{c}_{l_1}^{(2)} \equiv c$ являются концентрацией атомов сорта 1 /2/ в подрешетке 2 /1/. Трансляционная инвариантность дает возможность провести фурье-преобразование уравнения /9/, которое с учетом /13/ имеет вид:

$$\tilde{G}_{\alpha\beta}(k, \omega) = P_{\alpha\beta}(k, \omega) + \sum_{\gamma=1}^2 P_{\alpha\gamma}(k, \omega) \tilde{\sigma}_{\gamma} G_{\gamma\beta}(k, \omega), \alpha, \beta=1, 2. /15/$$

Решая /15/ относительно $\tilde{G}_{11}(k, \omega)$ и $\tilde{G}_{22}(k, \omega)$, получим:

$$G_{11}(k, \omega) = \frac{\frac{\omega^2 - X_2}{M_1} - \frac{1}{M_1 M_2} \tilde{\sigma}_2}{[\omega^2 - \omega_1^2(k)] [\omega^2 - \omega_2^2(k)] - \frac{\omega^2 - X_2}{M_1} \tilde{\sigma}_1 - \frac{\omega^2 - X_1}{M_2} \tilde{\sigma}_2 + \frac{\tilde{\sigma}_1 \tilde{\sigma}_2}{M_1 M_2}}, \quad /16/$$

$$G_{22}(k, \omega) = \frac{\frac{\omega^2 - X_1}{M_2} - \frac{1}{M_1 M_2} \tilde{\sigma}_1}{[\omega^2 - \omega_1^2(k)] [\omega^2 - \omega_2^2(k)] - \frac{\omega^2 - X_2}{M_1} \tilde{\sigma}_1 - \frac{\omega^2 - X_1}{M_2} \tilde{\sigma}_2 + \frac{\tilde{\sigma}_1 \tilde{\sigma}_2}{M_1 M_2}}.$$

Интегрирование функций $\tilde{G}_{11}(k, \omega)$ и $\tilde{G}_{22}(k, \omega)$ выполняется так же, как и в идеальном случае /см. /П.10/, П.11/:

$$\tilde{G}_{ll11}(\omega) = \frac{\frac{\omega^2 - X_2}{M_1} - \frac{1}{M_1 M_2} \tilde{\sigma}_2}{z^{1/2} (z - X_1)^{1/2} (z - X_2)^{1/2} (z - X_T)^{1/2}} \quad /17/$$

$$\tilde{G}_{ll22}(\omega) = \frac{\frac{\omega^2 - X_1}{M_2} - \frac{1}{M_1 M_2} \tilde{\sigma}_1}{z^{1/2} (z - X_1)^{1/2} (z - X_2)^{1/2} (z - X_T)^{1/2}},$$

где

$$z = \frac{X_T}{2} + \sqrt{\left(\frac{2\omega^2 - X_T}{2}\right)^2 - \frac{\omega^2 - X_2}{M_1} \tilde{\sigma}_1 - \frac{\omega^2 - X_1}{M_2} \tilde{\sigma}_2 + \frac{\tilde{\sigma}_1 \tilde{\sigma}_2}{M_1 M_2}} \quad /18/$$

Б. Приближение когерентного потенциала

Расширение теории на случай больших концентраций атома сорта 1/2/, в подрешетке 2/1/ требует применения метода когерентного потенциала /4,10/. В п. 2А в рамках одноузельного приближения была вычислена средняя гриновская функция $\tilde{G}(\omega)$. При этом в качестве отправного пункта теории возмущений /П.11/ использовалась гриновская функция упорядоченной цепочки $P(\omega)$. Чтобы улучшить одноузельное приближение, проведем следующую итерационную процедуру: возьмем в качестве исходной гриновской функции функцию $\tilde{G}^{(1)}(\omega) \equiv \tilde{G}(\omega)$ с собственной энергией $\tilde{\Sigma}^{(1)}(\omega) \equiv \tilde{\Sigma}(\omega)$, определенную равенствами /15/ и /13/, соответственно. Вычислим в одноузельном приближении новую усредненную по всем конфигурациям гриновскую функцию $\tilde{G}^{(2)}(\omega)$. На следующем шаге мы возьмем $\tilde{G}^{(2)}(\omega)$ в качестве исходной гриновской функции и т.д. Для n -ого шага итерации можем написать:

$$\tilde{G}^{(n)}(\omega) = \tilde{G}^{(n-1)}(\omega) + \tilde{G}^{(n-1)}(\omega) E^{(n)}(\omega) \tilde{G}^{(n)}(\omega), \quad /19/$$

$n = 1, 2, \dots,$

где $\tilde{G}^{(0)}(\omega) \equiv P(\omega)$; $E^{(1)}(\omega) \equiv \tilde{\Sigma}^{(1)}(\omega)$.

Система /19/ итерируется до тех пор, пока собственная энергия $E^{(n)}(\omega)$ гриновской функции $\tilde{G}^{(n)}(\omega)$ не становится меньше заданной малой величины.

Проделав итерацию в явном виде, получим после простых, но громоздких преобразований для $\tilde{G}_{\ell\ell 11}^{(n)}(\omega)$ и $\tilde{G}_{\ell\ell 22}^{(n)}$ выражения, которые имеют ту же форму, что и $\tilde{G}_{\ell\ell 11}^{(1)}(\omega)$ и $\tilde{G}_{\ell\ell 22}^{(1)}(\omega)$ /см./17/ и /18/ с той лишь разницей, что $\tilde{\sigma}_a^{(n)}(\omega)$ имеет теперь более сложный вид:

$$\tilde{\sigma}_a^{(n)}(\omega) = \sum_n E_a^{(n)}(\omega), \quad /20/$$

где $E_a^{(n)}(\omega)$ определена выражением:

$$E_a^{(n)}(\omega) = \frac{\tilde{t}_a^{(n-1)}(\omega)}{1 + \tilde{t}_a^{(n-1)}(\omega) \tilde{G}_{\ell\ell aa}^{(n-1)}(\omega)} \quad /21/$$

причем

$$\tilde{t}_a^{(n-1)}(\omega) = \sum_i \tilde{c}_a^{(i)} \frac{M_a \omega^2 - \tilde{\sigma}_a^{(n-1)}(\omega) - M_i \omega^2}{1 - (M_a \omega^2 - \tilde{\sigma}_a^{(n-1)}(\omega) - M_i \omega^2) \tilde{G}_{\ell\ell aa}^{(n-1)}(\omega)}. \quad /22/$$

Из /21/ следует, что $E^{(n)}(\omega) \rightarrow 0$, если $\tilde{t}_a^{(n-1)}(\omega) \rightarrow 0$. Плотность состояний дается формулой

$$D(\omega^2) = -\frac{1}{\pi N} \text{Im Tr MG} = -\frac{1}{\pi} \text{Im Tr} \sum_a \sum_i M_i \tilde{G}_{11aa}^{(i)}. \quad /23/$$

Вместо /23/ можно написать

$$D(\omega^2) = -\text{Im} \left(\sum_a \sum_i \tilde{c}_{1a}^{(i)} M_i \tilde{G}_{11aa}^{(i)} / \pi \right), \quad /24/$$

где $\tilde{G}_{11aa}^{(i)}$ - гриновская функция, усредненная по всем конфигурациям при дополнительном условии, что в выделенном узле R_{1a} находится атом сорта (i).

Возможность вычисления функции $\tilde{G}_{11aa}^{(i)}$ основана на следующем: в приближении одного узла L имеет вид /14/; и, следовательно, при вычислении $\tilde{G}_{11aa}^{(i)}$ мы должны в силовой матрице в элементе \tilde{L}_{11aa} выделенного узла просто заменить $(M_a \omega^2 - \tilde{\sigma}_a)$ на M_i . Поэтому имеем:

$$\tilde{G}_{11aa}^{(i)} = \tilde{G}_{11aa} + \tilde{G}_{11aa} \tau_{11aa}^{(i)} \tilde{G}_{11aa}, \quad /25/$$

где

$$\tau_{11aa}^{(i)} = \frac{M_a \omega^2 - \tilde{\sigma}_a - M_i \omega^2}{1 - (M_a \omega^2 - \tilde{\sigma}_a - M_i \omega^2) \tilde{G}_{11aa}},$$

Учитывая равенство $\sum_i \tilde{c}_{1a}^{(i)} \tilde{G}_{11aa}^{(i)} = \tilde{G}_{11aa}$, получаем

из /25/ после усреднения:

$$\sum_i \tilde{c}_{1a}^{(i)} \tau_{11aa}^{(i)} = 0. \quad /26/$$

Теперь из /24/ и /25/ с учетом /26/ следует:

$$D(\omega^2) = \text{Im} \left(-\sum_a \left(M_a - \frac{\tilde{\sigma}_a}{\omega^2} \right) \tilde{G}_{11aa} / \pi \right). \quad /27/$$

Выражение /27/ используется для вычисления плотности состояний в приближении как средней t -матрицы, так и когерентного потенциала.

3. Численные результаты

На рис. 1 изображена плотность состояний $D(\omega^2)$ в

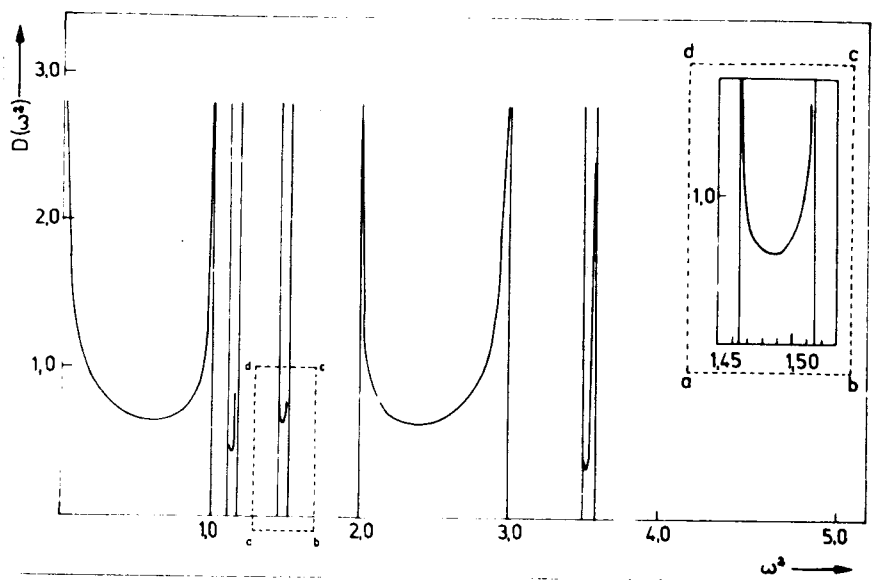


Рис. 1. Плотность состояний в приближении средней t -матрицы $M_1/M_2 = 2$, $c = 0,05$.

приближении средней t -матрицы при значениях $M_1/M_2=2$ и $c = 0,05$. Как видно из рисунка, в спектре частот появляются три дополнительных узких зоны. Поскольку концентрация c мала, можно сравнить полученные результаты с данными работы /9/. В этой работе изучалась двухатомная упорядоченная цепочка, в которой имеется один дефект: 2 атома массы M_1 и M_2 , находящиеся на расстоянии R , переставлены местами. В результате в спектре частот появляется три локальных частоты - одна отщепляется от верхнего края акустической зоны, вторая - от нижнего оптической зоны и третья - от верхнего края оптической зоны. Величина отщепления локальной частоты от края зоны зависит от расстояния R . Сравнение этих результатов с результатами нашей работы показывает, что в случае малой концентрации дефектные зоны лежат в области возможных изменений соответствующих локальных частот. Из рисунка видно, что структура дефектных зон, получающихся в приближении средней t -матрицы, качественно совпадает со структурой акустической и оптической зон.

На рис. 2 изображена плотность состояний $D(\omega^2)$ в

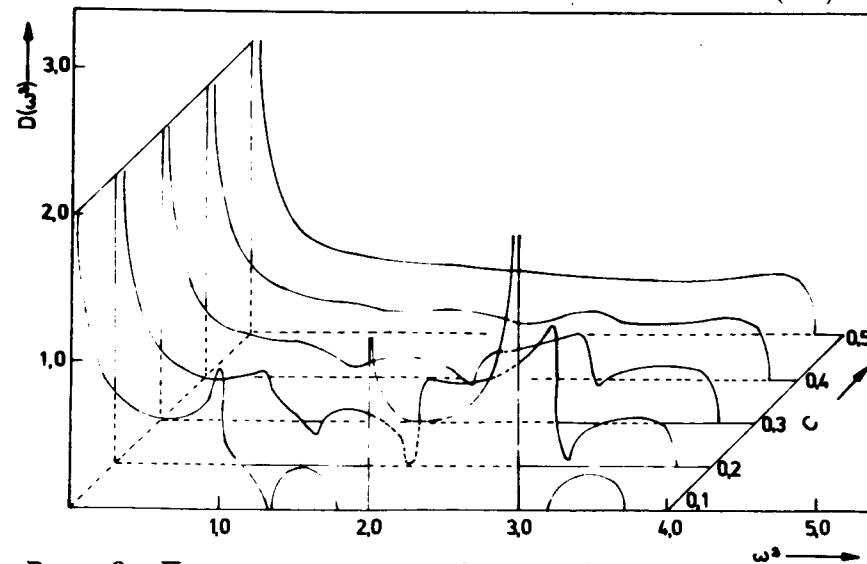


Рис. 2. Плотность состояний в приближении когерентного потенциала для различных значений концентрации c . $M_1/M_2 = 2$.

приближении когерентного потенциала для различных концентраций и для соотношения масс $M_1/M_2 = 2$. Из рисунка видно, что с увеличением беспорядка происходит расширение примесных зон; при концентрации $c > 0,3$ щели между зонами исчезают. При концентрации $c = 0,5$ мы имеем полностью неупорядоченную двухатомную цепочку. Расчет $D(\omega^2)$ для такой цепочки методом СРА производился в работе ^{/4/}. Спектры частот полностью неупорядоченной цепочки из одинакового числа атомов двух сортов, полученные в ^{/4/} и настоящей работе, идентичны. В работе ^{/3/} методом Дина ^{/1,2/} был рассчитан спектр частот двухатомной частично упорядоченной цепочки с ближним порядком, который определялся вероятностью W /см. *Введение/*. Была получена зависимость $D(\omega^2)$ для значений $W = 0,125; 0,25; 0,375$ при соотношении масс $M_1/M_2 = 2$. На рис. 3а, в, с приведены результаты работы ^{/1/} и настоящей работы для одних и тех же значений параметра ближнего порядка σ /см., напр. ^{/12/} /:

$$\sigma = (1 - 2W) = 1 - 4c(1 - c). \quad /28/$$

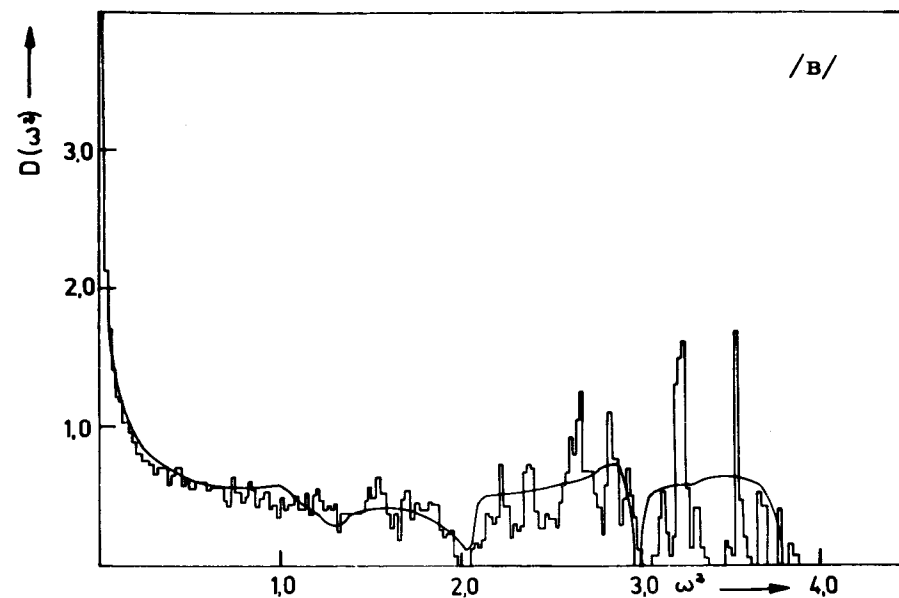
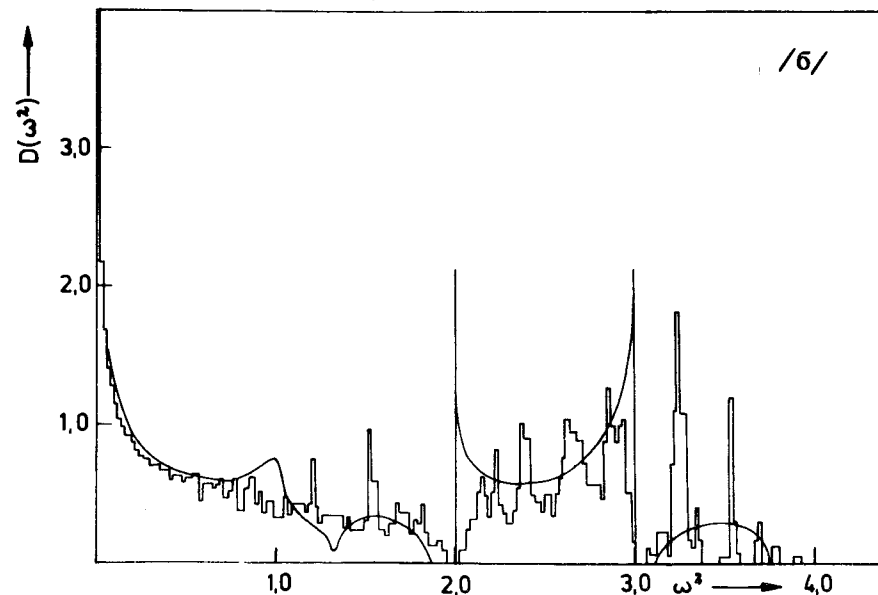
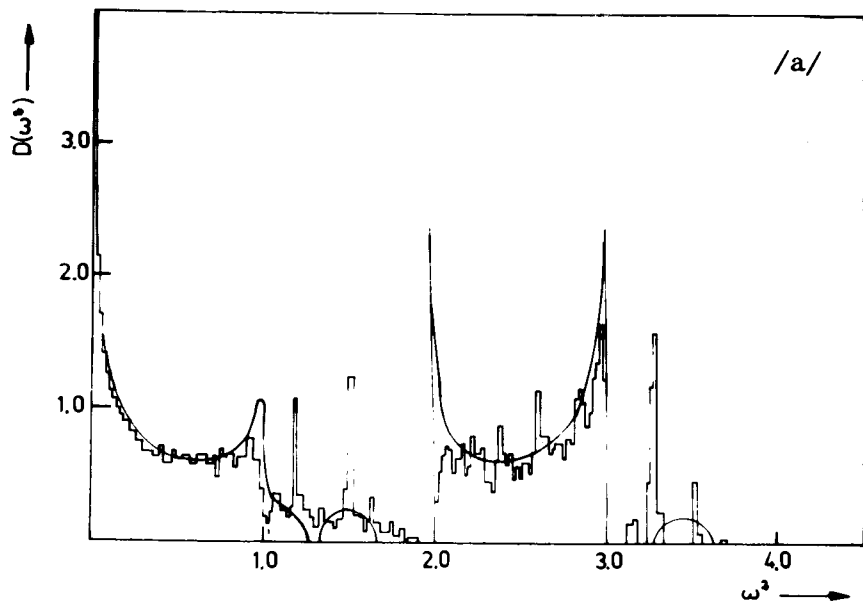


Рис. 3. Гистограмма - плотность состояний марковской цепочки из работы ^{/7/}. Гладкая линия - плотность состояний, полученная в данной работе при различных значениях параметра W . а/ $W = 0,125$; в/ $W = 0,250$; с/ $W = 0,375$.

Как видно из рисунков, основные черты зависимости $D(\omega^2)$ для обеих моделей находятся в хорошем согласии. Это означает, что в рамках СРА не обнаружено заметного влияния дальнего порядка на колебательный спектр неупорядоченной двухатомной цепочки, т.е. колебательный спектр такой решетки определяется в основном ближним порядком.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Уравнение для нахождения собственных частот идеальной двухатомной цепочки, состоящей из $2N$ атомов, имеет вид:

$$e_a^j(k) \omega_j^2(k) = \sum_{\beta} e_{\beta}^j(k) \sum_{\rho'} \frac{1}{\sqrt{M_a M_{\beta}}} \Phi_{\rho\rho' a\beta} e^{-ikR_{\rho}} \quad /П.1/$$

Здесь $e_a^j(k)$ - вектор поляризации, $\Phi_{\rho\rho' a\beta}$ - матрица силовых постоянных.

Закон дисперсии для взаимодействия только между ближайшими соседями дается формулой

$$\omega_{1,2}^2(k) = \frac{1}{2} X_T \pm [X_T^2 - 4X_1 X_2 \sin^2(\frac{1}{2} \cdot k a)]^{1/2}, \quad /П.2/$$

где

$$X_T = \frac{2f}{M_1} + \frac{2f}{M_2}; \quad X_1 = \frac{2f}{M_1}; \quad X_2 = \frac{2f}{M_2}. \quad /П.3/$$

Здесь f - силовая постоянная.

Плотность состояний фононов $\rho(\omega^2)$ можно представить в виде:

$$D(\omega^2) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \cdot \frac{X_T - 2\omega^2}{\omega(X_T - \omega^2)^{1/2} (X_1 - \omega^2)^{1/2} (X_2 - \omega^2)^{1/2}}, & \text{если } 0 < \omega^2 < X_1 \\ & \text{или } X_2 < \omega^2 < X_T \\ 0 & \text{если } X_1 < \omega^2 < X_2 \\ & \text{или } \omega^2 > X_T. \end{cases}$$

/П.4/

В формуле /П.4/ следует брать положительные значения корней. Функция Грина определяется обычным образом /11/:

$$G_{\rho\rho' a\beta}(t-t') = \frac{i}{h} \theta(t-t') \langle [u_{\rho a}(t) u_{\rho' \beta}(t')] \rangle. \quad /П.5/$$

Фурье-образ $P_{\rho\rho' a\beta}(\omega)$ гриновской функции идеальной цепочки $P_{\rho\rho' a\beta}(t)$ находится из уравнения движения

$$i \delta_{\rho\rho'} \delta_{a\beta} = \sum_{\rho'' a''} M_a \omega^2 i \delta_{\rho\rho''} \delta_{aa''} - \Phi_{\rho\rho'' a a''} P_{\rho'' \rho' a \beta} \quad /П.6/$$

и имеет вид

$$P_{\rho\rho' a\beta}(\omega) = \frac{1}{N \sqrt{M_a M_{\beta}}} \sum_{j,k} \frac{e_a^{j*}(k) e_{\beta}^j(k)}{\omega^2 - \omega_j^2(k) + i\epsilon} e^{-ik(R_{\rho} - R_{\rho'})} \quad /П.7/$$

Условия ортонормированности векторов поляризации приводит к следующим соотношениям:

$$e_1^{j*}(k) e_1^j(k) = \frac{\omega_j^2(k) - X_2}{2\omega_j^2(k) - X_T}$$

/П.8/

$$e_2^{j*}(k) e_2^j(k) = \frac{\omega_j^2(k) - X_1}{2\omega_j^2(k) - X_T}$$

$$e_1^{j*}(k) e_2^j(k) = \frac{1}{2} (X_1 X_2)^{1/2} \frac{1 + e^{ika}}{2\omega_j^2(k) - X_T}$$

Используя эти соотношения, получим:

$$P_{\ell\ell 11}(\omega) = \frac{1}{NM_1} \sum_k \frac{\omega^2 - X_2}{[\omega^2 - \omega_1^2(k)][\omega^2 - \omega_2^2(k)]} \quad /П.9/$$

$$P_{\ell\ell 22}(\omega) = \frac{1}{NM_2} \sum_k \frac{\omega^2 - X_1}{[\omega^2 - \omega_1^2(k)][\omega^2 - \omega_2^2(k)]}$$

$$P_{\ell\ell 12}(\omega) = P_{\ell\ell 21}^*(\omega) = -\frac{1}{2N} \left(\frac{X_1 X_2}{M_1 M_2} \right)^{1/2} \sum_k \frac{1 + e^{ika}}{[\omega^2 - \omega_1^2(k)][\omega^2 - \omega_2^2(k)]}$$

Заменяя в /П.9/ суммирование интегрированием, напишем

$$P_{\ell\ell 11}(\omega) = \frac{1}{M_1} \frac{a}{2\pi} \int_0^{2\pi/a} \frac{\omega^2 - X_2}{[\omega^2 - \omega_1^2(k)][\omega^2 - X_T + \omega_1^2(k)]} dk \quad /П.10/$$

$$= \frac{1}{M_1} \int_0^{X_1} \frac{\omega^2 - X_2}{(\omega^2 - \omega_1^2)(\omega^2 - X_T + \omega_1^2)} D(\omega_1^2) d\omega_1^2$$

Интегралы в /П.10/ вычисляются путем продолжения в комплексную плоскость с последующим контурным интегрированием. Окончательно получаем

$$P_{\ell\ell 11}(\omega) = \frac{\omega^2 - X_2}{M_1} \frac{1}{\omega(\omega^2 - X_1)^{1/2} (\omega^2 - X_2)^{1/2} (\omega^2 - X_T)^{1/2}} \quad /П.11/$$

$$P_{\ell\ell 22}(\omega) = \frac{\omega^2 - X_1}{M_2} \frac{1}{\omega(\omega^2 - X_1)^{1/2} (\omega^2 - X_2)^{1/2} (\omega^2 - X_T)^{1/2}}$$

Квадратные корни в /П.11/ следует выбирать положительными.

Литература

1. P. Dean. Proc. Roy. Soc (London), A254, 507 (1960).
2. P. Dean. Proc. Roy. Soc. (London), A260, 263 (1961).
3. D.N. Payton, V.M. Visscher. Phys. Rev., 154, 802 (1967).
4. D.W. Taylor. Phys. Rev., 156, 1017 (1967).
5. J.S. Langer. J. Math. Phys., 2, 584 (1961).
6. R.W. Davies, J.S. Langer. Phys. Rev., 131, 163 (1963).
7. D.N. Payton, V.M. Visscher. Phys. Rev., 175, 1201 (1968).
8. R.J. Elliott, D.W. Taylor. Proc. Roy. Soc. (London), A296, 161 (1967).
9. A.A. Maradudin, P. Masur, E.W. Montroll and H.H. Weiss, Rev. Mod. Phys., 30, 175 (1958).
10. B. Velicky, S. Kirkpatrick and H. Ehrenreich. Phys. Rev., 175, 747 (1968).
11. Д.Н. Зубарев. УФН, 71, 71 /1960/.
12. K. Huang. Statistical Mechanics (Wiley, New York), p. 335.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 марта 1975 года.