

УДК 539.2

© 1990

ВЛИЯНИЕ БЛИЖНЕГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННЫЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР, ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ОСТАТОЧНОЕ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ

*Н. П. Кулиш, П. В. Петренко, С. П. Репецкий,
Т. Д. Шатный*

В однозонной модели диагонального беспорядка для бинарного сплава замещения получено общее решение задачи теории многократного рассеяния на случайном локализованном потенциале. Конфигурационно усредненная $\langle T \rangle$ -матрица рассеяния представляется разложением кластерного типа. Исследуется влияние ближнего упорядочения на электронный спектр, теплоемкость и остаточное электросопротивление при учете многократного рассеяния на двухчастичном кластере (на парах атомов) для когерентного потенциала, удовлетворяющего условию одноузельного приближения. Выражения для плотности электронных состояний и электропроводности (с учетом рассеяния на парах) представлены в аналитическом виде.

Метод когерентного потенциала в настоящее время является одним из наиболее эффективных методов исследования энергетических спектров и различных физических свойств упорядоченных и неупорядоченных систем простых и переходных элементов.

Исследование электронной структуры бинарных неупорядоченных сплавов представлено целым рядом работ [1-4], использующих различные методы обобщения приближения когерентного потенциала. Трудности последовательного развития теории неупорядоченных сплавов связаны с проблемой учета многократного рассеяния электронов на случайном потенциале при наличии статистических межатомных корреляций. Как показали численные расчеты [5], обобщения приближения когерентного потенциала, использующие разложения по кумулянтным средним [6], а также кластерные обобщения [7], применяющие самосогласование, приводят к появлению нефизических полюсов функции Грина, связанных с неточным суммированием рядов теории рассеяния, и требуют определенных приемов устранения этих особенностей. Задача самосогласованного приближения, учитывающего рассеяние на кластерах и удовлетворяющего условию аналитичности, решается в работе [8] (приближение «блуждающего кластера»). Однако применение этого приближения при учете рассеяния даже на простейшем кластере (на паре атомов) является довольно сложным. Это дает основание для дальнейшего развития также других методов обобщения приближения когерентного потенциала.

В настоящей работе в однозонной модели диагонального беспорядка получено общее решение для T -матрицы рассеяния, представляющее собой разложение кластерного типа, учитывающее все многократные рассеяния на случайном потенциале бинарного неупорядоченного сплава замещения. Итерационная процедура выделения в T -матрице процессов многократного рассеяния на различных узлах позволила получить рекуррентные формулы для вкладов, соответствующих рассеянию на различных кластерах. Конфигурационное усреднение с учетом статистических межатомных корреляций проводится в представлении случайных чисел заполнения. Исследуется сходимость полученного разложения для $\langle T \rangle$ -

матрицы рассеяния для когерентного потенциала, удовлетворяющего условию одноузельного приближения. Исследование влияния ближнего упорядочения на электронный энергетический спектр и электропроводность сплава проводится с использованием аналитического выражения для $\langle T \rangle$ -матрицы рассеяния, полученного при учете многократного рассеяния на двухчастичном кластере (на парах атомов). На основе полученных результатов и модельного описания s -зоны сплава Cu—Al (в пренебрежении $s-d$ гибридизацией) показана возможность расчета эффектов влияния ближнего упорядочения, сопоставимых по величине с экспериментальными данными.

1. Модель диагонального беспорядка

Рассмотрим бинарный неупорядоченный сплав замещения $A_x B_{y=1-x}$ -Гамильтониан, описывающий в представлении Ванье одноэлектронные состояния сплава в однозонной модели диагонального беспорядка, можно представить в виде [1]

$$H = \tilde{H} + V, \quad \tilde{H} = \sum_n \sigma |n\rangle \langle n| + \sum_{m \neq n} h_{nm} |n\rangle \langle m|,$$

$$V = \sum_n (\epsilon_n - \sigma) |n\rangle \langle n| = \sum_n V_n, \quad (1)$$

где \tilde{H} — неслучайный трансляционно-инвариантный гамильтониан эффективного кристалла с когерентным потенциалом σ ; $|n\rangle$ — состояния Ванье; V — случайный диагональный потенциал возмущения (ϵ_n принимает значения ϵ_A или ϵ_B в зависимости от того, какой атом A или B находится в узле n).

Рассматривая для простоты обозначений вариант однозонного гамильтониана в модели сильной связи, предполагаем возможность обобщения результатов и на более сложную форму гамильтониана.

Как известно, оператор функции Грина электронных состояний в сплаве $G(E) = [E - H]^{-1}$ связан с оператором T -матрицы рассеяния на случайном потенциале возмущения $V = \sum_n V_n$ операторным равенством

$$G = \tilde{G} + \tilde{G} T \tilde{G}, \quad (2)$$

где

$$\tilde{G}(E) = [E - \tilde{H}]^{-1}, \quad T = [1 - V \tilde{G}]^{-1} V.$$

Используя для разложения T -матрицы

$$T = \sum_{n_1} T_{n_1} \quad (3)$$

многократно процедуру итерации соотношения

$$T_{n_1} = t_{n_1} + t_{n_1} \tilde{G} \sum_{n_2 \neq n_1} T_{n_2} \quad (4)$$

с последовательным выделением оператора T_{n_1} [3], где t_{n_1} — оператор одноцентровой матрицы рассеяния

$$t_{n_1} = [1 - V_{n_1} \tilde{G}]^{-1} V_{n_1}, \quad (5)$$

можем найти как промежуточное, так и полное решение для оператора T_{n_1}

$$T_{n_1} = T_{n_1}^{(k)} + \Delta T_{n_1}^{(k+1)} = T_{n_1}^{(N)} \quad (1 \leq k \leq N), \quad (6)$$

где

$$T_{n_1}^{(k)} = [1 - \sum_{n_1}^{(k)} \tilde{G}]^{-1} [t_{n_1} + \sum_{n_1}^{(k)}],$$

$$\Delta T_{n_1}^{(k+1)} = [1 - \Sigma_{n_1}^{(k)} \tilde{G}]^{-1} \sum_{\{n_2 \neq \dots \neq n_{k+1}\} \neq n_1} t_{n_1 n_2 \dots n_k} \tilde{G} T_{n_{k+1}},$$

$$\Sigma_{n_1}^{(k)} = \sum_{i=2}^k \sum_{\{n_2 \neq \dots \neq n_i\} \neq n_1} t_{n_1 n_2 \dots n_i}, \quad \Sigma_{n_1}^{(1)} = 0, \quad T_{n_1}^{(1)} = t_{n_1},$$

N — число атомов в сплаве, которое в термодинамическом пределе можно рассматривать как $N \rightarrow \infty$.

Выражение для $t_{n_1 n_2 \dots n_i}$ ($n_1 \neq n_2 \neq \dots \neq n_i$) определяется следующей рекуррентной формулой:

$$t_{n_1 n_2 \dots n_{i+1}} = t_{n_1 n_2 \dots n_i} \tilde{G} T_{n_{i+1}}^{(i)}, \quad (7)$$

где

$$T_{n_{i+1}}^{(i)} \{n_2 \dots n_i\} = [1 - \Sigma_{n_{i+1}}^{(i)} \{n_2 \dots n_i\} \tilde{G}]^{-1} [t_{n_{i+1}} + \Sigma_{n_{i+1}}^{(i)} \{n_2 \dots n_i\}],$$

$$\Sigma_{n_1}^{(p)} \{n_2 \dots n_k\} = \sum_{i=2}^p \sum_{\{m_2 \neq \dots \neq m_i\} \in \{n_2 \dots n_k\}} t_{n_1 m_2 \dots m_i} \quad (p \leq k),$$

$$t_{n_1 n_2} = t_{n_1} \tilde{G} T_{n_2}^{(1)} = t_{n_1} \tilde{G} t_{n_2}.$$

Определим еще одну сумму по выборкам индексов из набора $\{n_{k+1}; n_2 \dots n_k\}$, когда в каждом слагаемом обязательно присутствует индекс n_{k+1}

$$\Sigma_{n_1}^{(p)} \{n_{k+1}; n_2 \dots n_k\} = \sum_{i=2}^p \sum_{\{m_2 \neq \dots \neq m_i\} \in \{n_{k+1} \cap \{n_2 \dots n_k\}\}} t_{n_1 m_2 \dots m_i} \quad (p \leq k+1). \quad (8)$$

Найденное решение (6) для оператора T_{n_1} позволяет перейти к кластерному разложению, если использовать следующее переразложение:

$$T = \sum_{n_1} T_{n_1}^{(N)} = \sum_{n_1} T_{n_1}^{(1)} + \sum_{k=2}^N \sum_{n_1} [T_{n_1}^{(k)} - T_{n_1}^{(k-1)}] =$$

$$= \sum_{n_1} T_{n_1}^{(1)} + \sum_{k=2}^N \sum_{\{n_1 \neq \dots \neq n_k\}} [1 - \Sigma_{n_1}^{(k)} \tilde{G}]^{-1} [1 - \Sigma_{n_1}^{(k-1)} \tilde{G}]^{-1} t_{n_1 \dots n_k} [1 + \tilde{G} t_{n_1}] =$$

$$= \sum_{p=1}^N \sum_{\{n_1 \neq \dots \neq n_p\}} \tilde{T}_{n_1 \dots n_p}. \quad (9)$$

Выражение для $\tilde{T}_{n_1 \dots n_p}$ определяется с помощью выделения из слагаемых $[1 - \Sigma_{n_1}^{(k)} \tilde{G}]^{-1} [1 - \Sigma_{n_1}^{(k-1)} \tilde{G}]^{-1} t_{n_1 \dots n_k} [1 + \tilde{G} t_{n_1}]$ вкладов, связанных с рассеянием на k , $(k+1)$ и т. д. различных узлах. Суммируя соответствующие вклады (с числом узлов рассеяния, равным p), получим

$$\tilde{T}_{n_1 \dots n_p} = \sum_{k=2}^p \left\{ \sum_{q=0}^{p-k} \frac{\prod_{r=k}^{k+q-1} [\Sigma_{n_1}^{(k)} \{n_{r+1}; n_2 \dots n_r\} \tilde{G}] \prod_{v=k+q}^{p-1} [\Sigma_{n_1}^{(k-1)} \{n_{v+1}; n_2 \dots n_v\} \tilde{G}]}{\prod_{r=k}^{k+q} [1 - \Sigma_{n_1}^{(k)} \{n_2 \dots n_r\} \tilde{G}] \prod_{v=k+q}^p [1 - \Sigma_{n_1}^{(k-1)} \{n_2 \dots n_v\} \tilde{G}]} \right\} \times$$

$$\times t_{n_1 n_2 \dots n_k} [1 + \tilde{G} t_{n_1}], \quad (10)$$

Полагаем, что

$$\prod_{r=k}^{k-1} [\dots] \rightarrow 1, \quad \tilde{T}_{n_1} = T_{n_1}^{(1)} = t_{n_1}.$$

Кластерное разложение оператора T -матрицы

$$T = \sum_{p=1}^N \sum_{\{n_1 \neq \dots \neq n_p\}} \tilde{T}_{n_1 \dots n_p}$$

позволяет легко осуществить также и конфигурационное усреднение. Вводя случайные числа заполнения c_n^{λ} [9], принимающие значения 1

или 0, когда в узле n «есть» или «нет» атом λ , конфигурационно усредненную $\langle T \rangle$ -матрицу можно представить следующим соотношением:

$$\langle T \rangle = \sum_{p=1}^N \sum_{\substack{\{n_1 \neq \dots \neq n_p\} \\ \{\lambda_1, \dots, \lambda_p\} = A, B}} \tilde{T}_{\lambda_1(n_1) \dots \lambda_p(n_p)} \langle c_{n_1 \dots n_p}^{\lambda_1 \dots \lambda_p} \rangle, \quad (11)$$

где

$$c_{n_1 \dots n_p}^{\lambda_1 \dots \lambda_p} = \prod_{i=1}^p c_{n_i}^{\lambda_i}, \quad t_{\lambda}(n) = t_{\lambda} | n \rangle \langle n |.$$

Используя очевидное тождество

$$c_n^{\lambda} \equiv \langle c_n^{\lambda} \rangle + (c_n^{\lambda} - \langle c_n^{\lambda} \rangle) = \langle c_n^{\lambda} \rangle + (c_n^B - c_n^A)(\delta_B^{\lambda} - \delta_A^{\lambda}),$$

где $\langle c_n^{\lambda} \rangle = c^{\lambda} = c^A \delta_A^{\lambda} + c^B \delta_B^{\lambda}$, легко показать, что

$$\langle c_{n_1 \dots n_p}^{\lambda_1 \dots \lambda_p} \rangle = \Sigma' \left\{ \langle c_{n_1}^{\lambda_1} \rangle \dots \langle c_{n_p}^{\lambda_p} \rangle + \sum_{q=0}^p \langle \tilde{c}_{n_1 \dots n_q}^{\lambda_1 \dots \lambda_q} \rangle \prod_{i=q+1}^p \langle c_{n_i}^{\lambda_i} \rangle \right\}, \quad (12)$$

$$\langle \tilde{c}_{n_1 \dots n_q}^{\lambda_1 \dots \lambda_q} \rangle \equiv \langle (c_{n_1}^{\lambda_1} - c^{\lambda_1}) \dots (c_{n_q}^{\lambda_q} - c^{\lambda_q}) \rangle = \langle \tilde{c}_{n_1 \dots n_q}^{B \dots B} \rangle \prod_{i=1}^q (\delta_B^{\lambda_i} - \delta_A^{\lambda_i}), \quad \langle \tilde{c}_{n_i}^{\lambda_i} \rangle = 0, \quad (13)$$

Σ' — сумма по различным перестановкам одновременно верхних и нижних индексов, δ_A^{λ} — символ Кронекера, $c^A = x$, $c^B = y$.

Соотношение (12) полностью определяет функцию межатомных корреляций $\langle c_{n_1 \dots n_p}^{\lambda_1 \dots \lambda_p} \rangle$ различных узлов $\{n_1 \neq \dots \neq n_p\}$, линейно зависящую от параметров многочастичных межатомных корреляций $\langle \tilde{c}_{n_1 \dots n_q}^{B \dots B} \rangle$ ($2 \leq q \leq p$). В случае полностью разупорядоченной системы $\langle \tilde{c}_{n_1 \dots n_q}^{B \dots B} \rangle = 0$.

Таким образом, соотношения (7), (10)–(12) позволяют полностью решить проблему учета многократного рассеяния и многочастичных межатомных корреляций при расчете конфигурационно усредненной $\langle T \rangle$ -матрицы, а следовательно, и функции Грина

$$\langle G \rangle = \tilde{G} + \tilde{G} \langle T \rangle \tilde{G}.$$

Необходимо отметить, что полная функция Грина инвариантна относительно выбора когерентного потенциала. Однако при частичном решении задачи, т. е. при учете рассеяния на кластерах, включая k -частичный ($k < N$)

$$\langle T \rangle = \langle T^{(k)} \rangle + \langle \Delta T^{(k+1)} \rangle,$$

и особенно при численных расчетах на когерентный потенциал накладывается естественное требование сходимости используемого разложения для T -матрицы рассеяния или $\langle \Delta T^{(k+1)} \rangle \rightarrow 0$.

Особый интерес в связи с этим представляет одноузельное приближение когерентного потенциала ($\langle t_n(\sigma) \rangle = 0$), свойства которого подробно исследованы в ряде работ (см., например, [1, 2]). Являясь наилучшим одноузельным приближением, правильно передающим спектральные свойства в целом, рассматриваемое приближение когерентного потенциала обеспечивает аналитичность одноузельной функции Грина как функции Герглота $\langle G^{(1)} \rangle = \tilde{G}(\sigma)$ [8].

Вопрос сходимости одноузельного приближения можно исследовать как частный вопрос сходимости разложения для $\langle T \rangle$ -матрицы в целом

$$\langle T \rangle = \sum_{p=2}^N \sum_{\{n_1 \neq \dots \neq n_p\}} \langle \tilde{T}_{n_1 \dots n_p} \rangle. \quad (14)$$

Учитывая, что $\langle t \rangle = 0$, критерием сходимости может служить следующее условие малости [10]:

$$\gamma = \sum_{n \neq 0} |\langle t^2 \rangle \tilde{G}_{0n} \tilde{G}_{n0}| < 1, \quad (15)$$

где

$$\langle t^2 \rangle = xy (t_B - t_A)^2.$$

Критерий сходимости обуславливает применимость одноузельного приближения в таких простейших случаях, как малость концентрации примеси, малость случайного потенциала или недиагональной части функции Грина. Разложение (14) можно рассматривать как поправки к одноузельному приближению, учитывающие влияние многократного рассеяния и многочастичных межатомных корреляций (пропорциональные возрастающей степени по γ). Это позволяет расширить область применения одноузельного приближения когерентного потенциала (включая $\gamma \sim 1$).

Расчет рассеяния на многочастичных кластерах наиболее удобно проводить непосредственно на ЭВМ, однако задача рассеяния на простейших кластерах, например на двухчастичном, легко представима в аналитическом виде.

2. Плотность электронных состояний

Проведем расчет плотности электронных состояний с учетом рассеяния на двухчастичном кластере (на парах атомов). Предполагая малость параметра $\gamma < 1$ в одноузельном приближении когерентного потенциала, можно принять, что учет рассеяния на парах является достаточным для проведения исследования основных закономерностей влияния ближнего упорядочения на электронный спектр. При этом, конечно, не учитываются флуктуационные особенности на краях спектра [3].

Согласно формуле (10) (см. также Приложение),

$$\tilde{T}_{nm} = [1 - t_n \tilde{G} t_m \tilde{G}]^{-1} t_n \tilde{G} t_m [1 + \tilde{G} t_n].$$

Можно проверить также непосредственным суммированием, что \tilde{T}_{nm} действительно соответствует рассеянию на паре атомов

$$\tilde{T}_{nm} = t_n \tilde{G} t_m + t_n \tilde{G} t_m \tilde{G} t_n + t_n \tilde{G} t_m \tilde{G} t_n \tilde{G} t_m + \dots$$

Для проведения конфигурационного усреднения представим функцию парных корреляций (12) в виде

$$\langle c_{nm}^{\lambda_1 \lambda_2} \rangle = (x \delta_A^{\lambda_1} + y \delta_B^{\lambda_1}) (x \delta_A^{\lambda_2} + y \delta_B^{\lambda_2}) + \langle \tilde{c}_{nm}^{BB} \rangle (\delta_B^{\lambda_1} - \delta_A^{\lambda_1}) (\delta_B^{\lambda_2} - \delta_A^{\lambda_2}).$$

Параметры парной корреляции можно связать с параметрами ближнего порядка Каули [9]

$$\langle \tilde{c}_{nm}^{BB} \rangle = xy a_{nm}.$$

Конфигурационно усредненную $\langle T \rangle$ -матрицу можно определить в соответствии с выражением (11), выполняя суммирование по $\{\lambda_1, \lambda_2\}$ (с учетом символов Кронекера)

$$\langle T \rangle = xy (t_B - t_A) \times \sum_{\substack{n \\ m \neq n}} \frac{[a_{nm} + xy A_{nm}^2] \{ [1 - xy A_{nm}^2] A_{nm} |n\rangle \langle m| + [x - y] A_{nm}^2 |n\rangle \langle n| \}}{[1 - x^2 A_{nm}^2] [1 - y^2 A_{nm}^2] [1 + xy A_{nm}^2]}, \quad (16)$$

где

$$A_{nm} = \tilde{G}_{nm} (t_B - t_A), \quad A_{nm}^2 = A_{nm} A_{mn}.$$

При расчете $\langle T \rangle$ -матрицы учтено также, что $\langle t \rangle = x t_A + y t_B = 0$, а следовательно, $t_A = -y (t_B - t_A)$, $t_B = x (t_B - t_A)$.

Подставляя найденное выражение для $\langle T \rangle$ -матрицы в функцию Грина $\langle G \rangle = \tilde{G} + \tilde{G} \langle T \rangle \tilde{G}$, можно определить плотность электронных состояний, приходящуюся на один атом сплава [1]

$$g(E) = -\frac{1}{\pi N} \text{Sp Im} \langle G(E^+) \rangle = -\frac{2}{\pi N} \text{Im} \sum_n \left\{ \tilde{G}_{nn} + xy(t_B - t_A) \times \right. \\ \left. \times \sum_{m \neq n} \frac{[a_{nm} + xy A_{nm}^2] [1 - xy A_{nm}^2] A_{nm} [\tilde{G}^2]_{nm} + [x - y] A_{nm}^2 [\tilde{G}^2]_{nn}}{[1 - x^2 A_{nm}^2] [1 - y^2 A_{nm}^2] [1 + xy A_{nm}^2]} \right\}. \quad (17)$$

Выражения (16), (17) полностью соответствуют полученным ранее в работе [11], где, однако, не проводились спектральные исследования.

Для определения одноузельного когерентного потенциала можно использовать уравнение, являющееся одной из форм уравнения Совена

$$\sigma = y\delta \frac{1 + \sigma \tilde{G}_{nn}}{1 + (\sigma - x\delta) \tilde{G}_{nn}}, \quad (18)$$

где $\delta = \delta_B - \epsilon_A$, $\epsilon_A = 0$. Как показывают численные расчеты, уравнение (18) обладает хорошей сходимостью (включая края спектра) при использовании итерационных методов решения.

Для проведения численных расчетов аналогично [11] используется предложенная в работах [4, 12] следующая дисперсионная зависимость Фурье-представления интеграла перескока (h_{nm}):

$$\epsilon_k = W [1 + (kR_0)^2]^{-1}, \quad W < 0, \quad (19)$$

где W определяет ширину зоны; R_0 — характерная длина убывания интеграла перескока; k — волновой вектор, изменяющийся в пределах первой зоны Бриллюэна.

При таком моделировании электронного спектра предполагается исключительно качественное исследование основных закономерностей влияния ближнего упорядочения на электронный спектр сплава в рамках однозонной модели (например, s -зоны в пренебрежении $s-d$ гибридизацией). Учитывая закон дисперсии (19), можно представить явные выражения величин, входящих в уравнение когерентного потенциала (18), а также в формулу (17) плотности электронных состояний

$$\tilde{G}_{nn} = \frac{1}{(E - \sigma)} \left[1 + \frac{i}{4\pi} \frac{W}{(E - \sigma)} \left(\frac{v_0}{R_0^3} \right) b \right],$$

$$t_B - t_A = \delta [1 + (\sigma - x\delta) \tilde{G}_{nn}]^{-1}$$

$$A_{nm} = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{W(t_B - t_A)}{(E - \sigma)^2} \right] \left(\frac{v_0}{R_0^3} \right) \left(\frac{R_0}{R_{nm}} \right) \exp(i k_0 R_{nm}),$$

$$[\tilde{G}^2]_{nn} = \frac{1}{(E - \sigma)^2} \left[1 + \frac{i}{2\pi} \frac{W}{(E - \sigma)} \left(\frac{v_0}{R_0^3} \right) \left[b + \frac{W}{(E - \sigma)} \frac{c}{4b_0} \right] \right],$$

$$[\tilde{G}^2]_{nm} = \frac{1}{2\pi} \frac{W}{(E - \sigma)^2} \left(\frac{v_0}{R_0^3} \right) \left[\left(\frac{R_0}{R_{nm}} \right) + i \frac{W}{(E - \sigma)} \frac{1}{4b_0} \right] \exp(i k_0 R_{nm}),$$

$$b = b_0 - i \frac{R_0}{\pi} \left[2k_m + k_0 \ln \frac{k_m - k_0}{k_m + k_0} \right], \quad k_m = [6\pi^2/v_0]^{1/3},$$

$$b_0 = \sqrt{\frac{W}{(E - \sigma)}} - 1 = b'_0 + i b''_0, \quad k_0 = b_0/R_0 = k'_0 + i k''_0, \quad k''_0 > 0,$$

$$c = 1 + \frac{i}{\pi} \left[\frac{2k_m k_0}{k_m^2 - k_0^2} - \ln \frac{k_m - k_0}{k_m + k_0} \right],$$

v_0 — атомный объем. Приближение электронного спектра к реальному вблизи уровня Ферми можно осуществить соответствующим выбором параметров электронного спектра R_0 и W . Например, при небольших концентрациях примеси, используя предельный переход $y \rightarrow 0$ в выражении для плотности электронных состояний, можно получить следующие предельные соотношения (для основной компоненты сплава):

$$R_0^3 = [2\pi^2 E_F^{\lambda} g^{\lambda}(\mu) / (k_F^3 v_0) - 1] / k_F^3, \quad k_F^3 = 3\pi^2 Z^A / v_0, \\ W = -E_F^{\lambda} [1 + (k_F R_0)^2] / (k_F R_0)^2, \quad E_F^{\lambda} = \mu^A - W. \quad (20)$$

В применении к сплаву Cu—Al, имеющему ГЦК структуру, принимая значение энергии Ферми меди равным $E_F^{\lambda} = 1.48 \cdot 10^{-18}$ Дж [13], а также плотность электронных состояний меди на уровне Ферми $g^{\lambda}(\mu) = 1.68 \times 10^{18}$ Дж $^{-1}$ [14], на основе соотношений (20) можно получить следующую оценку значений параметров: $R_0 = 0.17$ ($4v_0$) $^{1/3}$, $W = -3.73 \cdot 10^{-18}$ Дж.

Уровень Ферми сплава (для низких температур) в рамках однозонной модели определяется соотношением

$$xZ^A + yZ^B = \int_{-\infty}^{\mu} g(E) dE, \quad (21)$$

где $Z^A = 1$, $Z^B = 3$ — валентности соответствующих компонент сплава.

Параметр рассеяния δ может быть определен на основе соотношения [11], полученного путем дифференцирования по концентрации соотношения (21) в предположении малости $y\delta$ и $y(d\delta/dx)$ (правило сумм Фриделя)

$$\delta(x) = \frac{W}{(b_F^2 + 1)} \left[\frac{2(Z^A - Z^B)}{3(xZ^A + yZ^B)} \frac{b_F^2}{(b_F^2 + 1)} \right] / \left[\frac{2(Z^A - Z^B)}{3(xZ^A + yZ^B)} \frac{b_F^2}{(b_F^2 + 1)} - 1 \right],$$

где

$$b_F^3 = 3\pi^2 (xZ^A + yZ^B) (R_0^3 / v_0).$$

3. Остаточное электросопротивление

Для расчета остаточного электросопротивления используется выражение для тензора электропроводности сплава $\sigma_{\alpha\beta}$ [12], полученное на основе метода Кубо

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2 \hbar}{4\pi N v_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{\partial f(E, \mu)}{\partial E} \right) \text{Sp} [K(v^{\alpha}, E^{+}, v^{\beta}, E^{-}) + \\ + K(v^{\alpha}, E^{-}, v^{\beta}, E^{+}) - K(v^{\alpha}, E^{+}, v^{\beta}, E^{+}) - K(v^{\alpha}, E^{-}, v^{\beta}, E^{-})], \quad (22)$$

где $f(E, \mu)$ — функция распределения Ферми, v^{α} — оператор α — компоненты скорости,

$$K(v^{\alpha}, E_1, v^{\beta}, E_2) = \langle v^{\alpha} G(E_1) v^{\beta} G(E_2) \rangle = v^{\alpha} \tilde{G}(E_1) v^{\beta} \tilde{G}(E_2) + \\ + v^{\alpha} \tilde{G}(E_1) v^{\beta} \tilde{G}(E_2) \langle T \rangle \tilde{G}(E_2) + v^{\alpha} \tilde{G}(E_1) \langle T \rangle \tilde{G}(E_1) v^{\beta} \tilde{G}(E_2) + \\ + \langle v^{\alpha} \tilde{G}(E_1) T \tilde{G}(E_1) v^{\beta} \tilde{G}(E_2) T \tilde{G}(E_2) \rangle.$$

Кластерное разложение позволяет легко осуществлять конфигурационное усреднение и произведения T -матриц

$$\langle TT \rangle = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{\{n_1 \neq \dots \neq n_p\}, \{m_1 \neq \dots \neq m_q\}} \sum_{\{\lambda_1, \dots, \lambda_p\}, \{\lambda'_1, \dots, \lambda'_q\}} T_{\lambda_1(n_1) \dots \lambda_p(n_p)} \tilde{T}_{\lambda'_1(m_1) \dots \lambda'_q(m_q)} \times \\ \times \left\langle c_{n_1 \dots n_p}^{\lambda_1 \dots \lambda_p} c_{m_1 \dots m_q}^{\lambda'_1 \dots \lambda'_q} \right\rangle,$$

где необходимо учитывать возможность одинаковых индексов, полагая $(c_{n_i}^{\lambda_i})^2 = c_{n_i}^{\lambda_i}$. Однако для достижения одинаковой степени точности при расчете электропроводности в произведении T -матриц можно сначала явно учесть рассеяние только на парах атомов (как в $\langle T \rangle$ -матрице)

$$TT = \sum_n \left\{ t_n t_n + \sum_{m \neq n} [t_n t_m + [t_n + t_m + \tilde{T}_{nm}] \tilde{T}_{nm} + \tilde{T}_{nm} [t_n + t_m + \tilde{T}_{nm}]] \right\},$$

а затем выполнить конфигурационное усреднение.

Принимая для упорядочения записи еще одно довольно общее предположение, что $\tilde{G}_{nm} = \tilde{G}_{mn}$ (или $\tilde{G}_k = \tilde{G}_{-k}$), из которого следует $[\tilde{G}v^\alpha \tilde{G}_{nm}] = -[\tilde{G}v^\alpha \tilde{G}]_{mn}$, представим расчет тензора электропроводности (при низких температурах) следующим выражением:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} = & \frac{e^2 \hbar}{2\pi N v_0} \operatorname{Re} \sum_n \left\{ -[[\tilde{G}^- - \tilde{G}^+] v^\alpha [\tilde{G}^- - \tilde{G}^+] v^\beta]_{nn} + \right. \\ & + 4xy (t_B - t_A) \sum_{m \neq n} \frac{[\alpha_{nm} + xy A_{nm}^2]}{[1 - x^2 A_{nm}^2][1 - y^2 A_{nm}^2][1 + xy A_{nm}^2]} \times \\ & \times \{ [1 - xy A_{nm}^2] A_{nm} [\tilde{G}^+ v^\alpha [\tilde{G}^- - \tilde{G}^+] v^\beta \tilde{G}^+]_{nm} + [x - y] A_{nm}^2 [\tilde{G}^+ v^\alpha [\tilde{G}^- - \tilde{G}^+] v^\beta \tilde{G}^+]_{nn} \} + \\ & + 4xy |t_B - t_A|^2 \sum_{m \neq n} \frac{[\alpha_{nm} + xy A_{nm}^2][1 - xy A_{nm}^2] A_{nm} [\tilde{G}^- v^\alpha \tilde{G}^+]_{mn} [\tilde{G}^+ v^\beta \tilde{G}^-]_{nm}}{[1 - x^2 A_{nm}^2][1 - y^2 A_{nm}^2][1 + xy A_{nm}^2][A_{nm} + A_{nm}^*]} - \\ & \left. - 2xy (t_B - t_A)^2 \sum_{m \neq n} \frac{[\alpha_{nm} + xy A_{nm}^2][1 - xy A_{nm}^2][\tilde{G}^+ v^\alpha \tilde{G}^+]_{mn} [\tilde{G}^+ v^\beta \tilde{G}^+]_{nm}}{[1 - x^2 A_{nm}^2][1 - y^2 A_{nm}^2][1 + xy A_{nm}^2]} \right\}_{E=\mu}, \quad (23) \end{aligned}$$

где

$$A_{nm} = \tilde{G}_{nm}^+ (t_B - t_A), \quad A_{nm}^* = (A_{nm})^*, \quad \tilde{G}^\pm = \tilde{G}(E^\pm).$$

Для закона дисперсии (19) можно также представить явные выражения следующих величин (считая, что $v_k^\alpha = \hbar^{-1} (\partial \varepsilon_k / \partial k^\alpha)$):

$$[[\tilde{G}^- - \tilde{G}^+] v^\alpha [\tilde{G}^- - \tilde{G}^+] v^\beta]_{nn} = -\frac{2v_0}{3\pi \hbar^2} \left[\frac{|E - \sigma|^2}{W \sigma''} \right] \frac{(b'_0)}{R_0} \delta^{\alpha\beta},$$

$$[\tilde{G}^+ v^\alpha [\tilde{G}^- - \tilde{G}^+] v^\beta \tilde{G}^+]_{nm} = i \frac{v_0}{6\pi \hbar^2} \frac{(E - \sigma^*)^2}{W (\sigma'')^2} \frac{(b'_0)^3}{R_0} \left[1 - i \frac{3W \sigma''}{2|E - \sigma|^2} \frac{1}{b'_0 b_0} \right] \delta^{\alpha\beta},$$

$$[\tilde{G}^+ v^\alpha [\tilde{G}^- - \tilde{G}^+] v^\beta \tilde{G}^+]_{nm} = i \frac{v_0}{6\pi \hbar^2} \frac{(E - \sigma^*)^2}{W (\sigma'')^2} \frac{b'_0 (b_0^*)^2}{R_0} \left\{ \frac{\sin(k'_0 R_{nm})}{(k'_0 R_{nm})} - \right.$$

$$\left. - \frac{i}{4b'_0 (b_0^*)^2} \frac{W \sigma''}{|E - \sigma|^2} \exp(i k'_0 R_{nm}) \left[2b_0 + \frac{W \sigma''}{|E - \sigma|^2} \left[\left(\frac{R_{nm}}{R_0} \right) - i \frac{3}{b_0} \right] \right] \right\} \exp(-k''_0 R_{nm}) \delta^{\alpha\beta},$$

$$[\tilde{G}^+ v^\alpha \tilde{G}^+]_{nm} = -i \frac{v_0}{4\pi \hbar} \frac{W}{(E - \sigma)^2 R_0^2} \exp(i k_0 R_{nm}) (\mathbf{e}^\alpha \cdot \mathbf{e}_{nm}),$$

$$[\tilde{G}^+ v^\alpha \tilde{G}^-]_{nm} = i \frac{v_0}{2\pi \hbar} \frac{(b'_0)^2}{\sigma'' R_0^2} \left[\cos(k'_0 R_{nm}) - \frac{\sin(k'_0 R_{nm})}{(k'_0 R_{nm})} - \right.$$

$$\left. - \frac{W \sigma''}{2|E - \sigma|^2 (b'_0)^2} \sin(k'_0 R_{nm}) \right] \frac{\exp(-k''_0 R_{nm})}{(k'_0 R_{nm})} (\mathbf{e}^\alpha \cdot \mathbf{e}_{nm}),$$

где $\mathbf{e}_{nm} = \mathbf{R}_{nm}/R_{nm}$, $\sigma = \sigma' + i\sigma''$, $\delta^{\alpha\beta}$ — символ Кронекера.

Электропроводность кристаллов кубической симметрии равна $\sigma_{\alpha\alpha} = \operatorname{Sp} [\sigma_{\alpha\beta}]/3$ и связана с удельным электросопротивлением $\rho = 1/\sigma_{\alpha\alpha}$. Можно полагать, что в одноузельном приближении функции Грина остаточное удельное электросопротивление определяется соотношением

$$\rho_0 = \frac{3\pi^2 \hbar}{e^2} \left[\frac{W \sigma''}{|E - \sigma|^2} \right] \frac{R_0}{(b'_0)^3} \Big|_{E=\mu}$$

и в первом приближении по концентрации удовлетворяет правилу Нордгейма $\rho_0 \sim xy$ (так как $\sigma'' \sim xy$). Учет поправок к одноузельному приближению описывает зависимость электропроводности от параметров ближнего порядка, что обусловлено изменением при ближнем упорядочении как времени релаксации, так и энергетического спектра электронов. Впервые это было проанализировано в работе [12] при условии малости параметра $(v_0/R_0^3) \ll 1$, которое, однако, не всегда выполнимо.

Полученные в общем виде результаты (10), (17), (23) отражают хорошо известное обстоятельство [3], что учет многократного рассеяния (когда $A_{sm} \sim 1$) приводит к существенному изменению полюсной структуры функции Грина, что как раз и обуславливает спектральные свойства, которые нельзя учесть в конечном порядке обычной теории возмущений. Важно отметить, что условие применимости одноузельного когерентного потенциала

$$\gamma = xy \sum_{n \neq 0} |A_{0n}|^2 \approx xy |A_{01}|^2 < 1$$

не исключает, а скорее предполагает необходимость в общем случае учета многократного рассеяния на парах атомов (величина $xy \leq 0.25$ для любого бинарного сплава). Кроме того, параметр γ , как правило, растет на краю спектра, что приводит к необходимости учета рассеяния на многочастичных кластерах в такой области спектра (рис. 1).

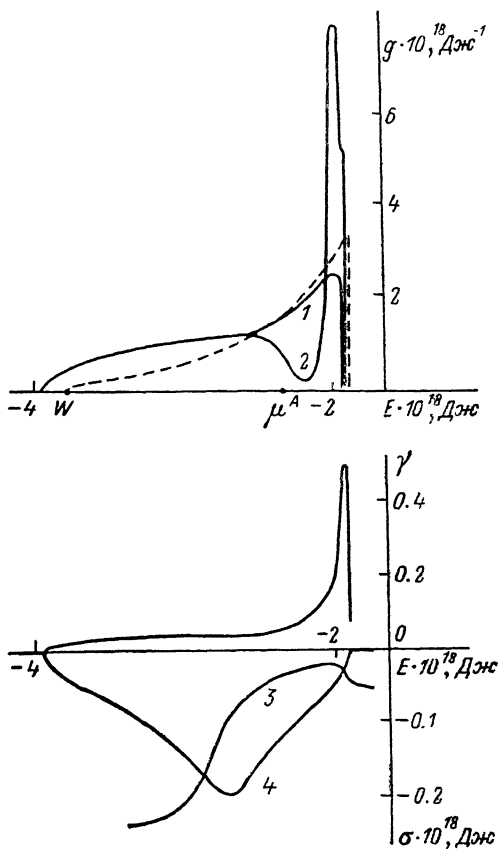


Рис. 1. Модельная плотность электронных состояний s -зоны (в пренебрежении $s-d$ гибридизацией) для сплава Cu_3Al .

1 — самосогласованное одноузельное приближение, 2 — учет многократного рассеяния на парах, 3 — $\text{Re } \sigma$, 4 — $\text{Im } \sigma$. Штрихи — чист ϵ ; медь.

На рис. 1, 2 представлены результаты численного моделирования s -зоны для сплава $\text{Cu}-\text{Al}$ с различной концентрацией примеси. В расчетах использовались реальные параметры ближнего порядка [15], соответствующие двум видам термомеханической обработки: отжиг ($\alpha_{01} < 0$) и деформация ($\alpha_{01} > 0$). Кроме того, для сплава стехиометрического состава Cu_3Al проводились расчеты с параметрами ближнего порядка, соответствующими упорядочению по типу $L1_2$. Как видно из рис. 1, для сплава Cu_3Al наблюдается расщепление энергетической зоны в области границы зоны Бриллюэна полностью упорядоченного сплава. Не совсем полное расщепление (несмотря на использование достаточно большого числа координационных сфер) связано с учетом только парных корреляций и пренебрежением многочастичными.

На рис. 2 в электронном спектре для отожженных образцов также наблюдается появление характерного провала, величина которого возрастает с увеличением степени ближнего порядка, что можно представить как тенденцию к расщеплению энергетической зоны при установлении дальнего порядка [16]. Уровень Ферми сплавов попадает в область наиболее существенных изменений электронного спектра, обусловленных ближним упорядочением (в область минимума для $\alpha_{01} < 0$ и максимума для $\alpha_{01} > 0$). Это будет приводить к существенно различному влиянию двух типов ближнего упорядочения на физические свойства сплавов.

На рис. 3 представлены результаты теоретического расчета электронной плотности состояний на уровне Ферми сплава в сравнении с экс-

периментальными значениями, полученными непосредственно из измерений низкотемпературной теплоемкости [14]. Численные расчеты показывают, что учет многократного рассеяния (по сравнению с двукратным)

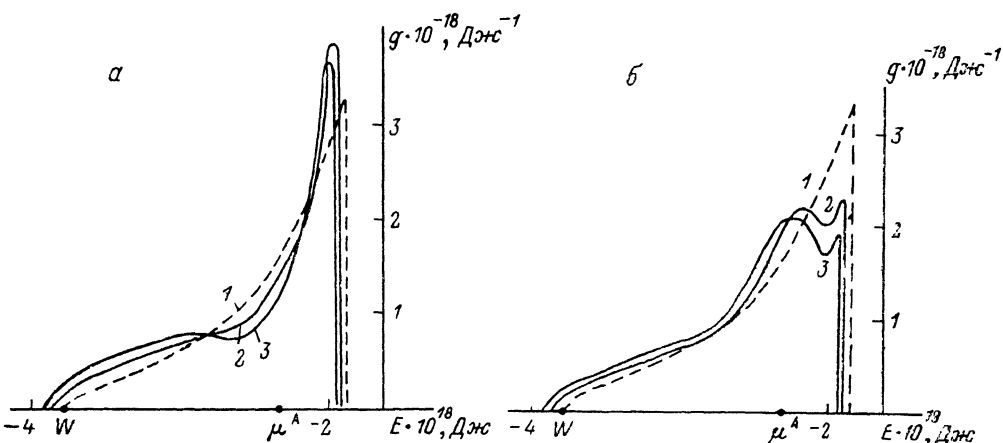


Рис. 2. Модельная плотность электронных состояний s -зоны (в пренебрежении $s-d$ гибридизацией) для сплавов $\text{Cu}-\text{Al}$ с различной обработкой.

a — отжиг, b — деформация. y (ат. % Al). 1 — 0, 2 — 10, 3 — 17.

приводит к лучшему согласию с экспериментом. Необходимо также отметить, что для описания немоногоного характера наблюдаемых концентрационных кривых рис. 3 (соответствующих характеру concentra-

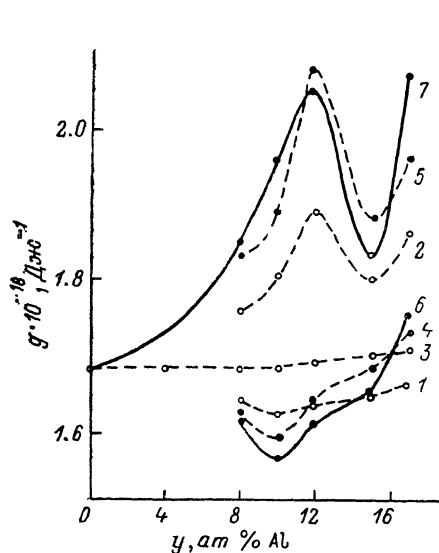


Рис. 3. Плотность электронных состояний на уровне Ферми для сплавов $\text{Cu}-\text{Al}$.

1, 2 — учет двукратного рассеяния; 3—5 — учет многократного рассеяния на парах; 6, 7 — эксперимент 1, 4, 6 — отожженные образцы; 3 — полностью разупорядоченные; 2, 5, 7 — деформированные.

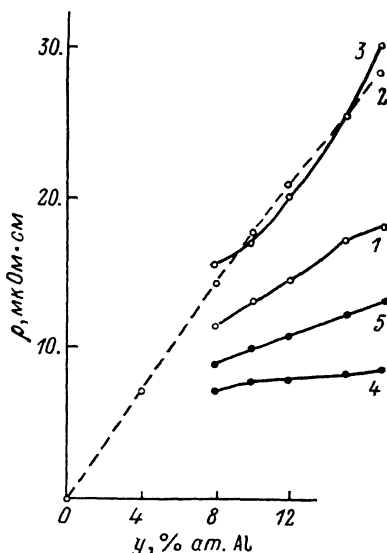


Рис. 4. Остаточное удельное электро- сопротивление сплавов $\text{Cu}-\text{Al}$.

1—3 — теория; 4, 5 — эксперимент. 1, 4 — отожженные образцы; 2 — полностью разупорядоченные; 3, 5 — деформированные.

ционного изменения теплоемкости сплава при определенной обработке) понадобился учет параметров Каули как минимум на трех координационных сферах.

На рис. 4 представлены результаты расчета остаточного удельного электросопротивления в сравнении с экспериментом [17]. Наблюдаемое расхождение абсолютных теоретических и экспериментальных значений

можно объяснить сделанными приближениями для энергетического спектра зоны проводимости в рамках рассматриваемой однозонной модели. Необходимо отметить, что относительное изменение электросопротивления с учетом эффектов влияния ближнего упорядочения находится в хорошем согласии с экспериментом. Электросопротивление деформированных образцов при расчете практически совпадает с величиной электросопротивления сплава в полностью разупорядоченном состоянии, что также подтверждается экспериментально. Это означает, что в деформированных образцах возникает такой тип ближнего упорядочения, при котором влияние ближнего порядка на двухчастичные электронные корреляции, а следовательно, и кинетические свойства сплава становится пренебрежимо малым.

Учитывая то обстоятельство, что проведенные численные расчеты носят скорее иллюстративный характер и что для реальных расчетов требуется более реалистичное моделирование электронного спектра, а также, по-видимому, выход за рамки учета рассеяния на парах, в Приложении представляем простейшие элементы кластерного разложения.

П Р И Л О Ж Е Н И Е

А) Расчет операторов $t_{n_1 \dots n_i}$ на основе рекуррентной формулы (7)

$$\begin{aligned} t_{n_1 n_2} &= t_{n_1} \tilde{G} t_{n_2}, \\ t_{n_1 n_2 n_3} &= t_{n_1 n_2} \tilde{G} [1 - t_{n_3} \tilde{G}]^{-1} [t_{n_3} + t_{n_2 n_3}], \\ t_{n_1 n_2 n_3 n_4} &= t_{n_1 n_2 n_3} \tilde{G} [1 - \Sigma_{n_4}^{(3)}(n_2 n_3) \tilde{G}]^{-1} [t_{n_4} + \Sigma_{n_4}^{(3)}(n_2 n_3)], \end{aligned}$$

и т. д.,

$$\Sigma_{n_4}^{(3)}(n_2 n_3) = t_{n_4 n_2} + t_{n_4 n_3} + t_{n_4 n_2 n_3} + t_{n_4 n_3 n_2}.$$

Б) Определение выражения для $\tilde{T}_{n_1 \dots n_p}$ ($p=2, 3, 4$) в соответствии с формулой (10)

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{n_1} &= t_{n_1}, \\ \tilde{T}_{n_1 n_2} &= \frac{1}{[1 - t_{n_1 n_2} \tilde{G}]} t_{n_1 n_2} [1 + \tilde{G} t_{n_1}], \\ \tilde{T}_{n_1 n_2 n_3} &= \left\{ \frac{\Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2; n_3) \tilde{G}}{[1 - \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2) \tilde{G}][1 - \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2 n_3) \tilde{G}]} t_{n_1 n_2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{[1 - \Sigma_{n_1}^{(3)}(n_2 n_3) \tilde{G}][1 - \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2 n_3) \tilde{G}]} t_{n_1 n_2 n_3} \right\} [1 + \tilde{G} t_{n_1}]. \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2; \dots) &= t_{n_1 n_2}, \\ \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2 n_3) &= t_{n_1 n_2} + t_{n_1 n_3}, \\ \tilde{T}_{n_1 n_2 n_3 n_4} &= \left\{ \frac{\Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2; n_3) \tilde{G} \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_4; \{n_2 n_3\}) \tilde{G}}{[1 - \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2) \tilde{G}][1 - \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2 n_3) \tilde{G}][1 - \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2 n_3 n_4) \tilde{G}]} t_{n_1 n_2} + \right. \\ &\quad + \frac{\Sigma_{n_1}^{(2)}(n_4; n_2 n_3) \tilde{G}}{[1 - \Sigma_{n_1}^{(3)}(n_2 n_3) \tilde{G}][1 - \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2 n_3) \tilde{G}][1 - \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2 n_3 n_4) \tilde{G}]} t_{n_1 n_2 n_3} + \\ &\quad + \frac{\Sigma_{n_1}^{(3)}(n_4; n_2 n_3) \tilde{G}}{[1 - \Sigma_{n_1}^{(3)}(n_2 n_3) \tilde{G}][1 - \Sigma_{n_1}^{(3)}(n_2 n_3 n_4) \tilde{G}][1 - \Sigma_{n_1}^{(2)}(n_2 n_3 n_4) \tilde{G}]} t_{n_1 n_2 n_3} + \\ &\quad \left. + \frac{1}{[1 - \Sigma_{n_1}^{(4)}(n_2 n_3 n_4) \tilde{G}][1 - \Sigma_{n_1}^{(3)}(n_2 n_3 n_4) \tilde{G}]} t_{n_1 n_2 n_3 n_4} \right\} [1 + \tilde{G} t_{n_1}], \end{aligned}$$

$$\Sigma_{n_1 \{n_i; \dots\}}^{(2)} = t_{n_1 n_4},$$

$$\Sigma_{n_1 \{n_2 n_3 n_4\}}^{(2)} = t_{n_1 n_2} + t_{n_1 n_3} + t_{n_1 n_4},$$

$$\Sigma_{n_1 \{n_i; n_2 n_3\}}^{(3)} = t_{n_1 n_4} + t_{n_1 \{n_4 n_2\}} + t_{n_1 \{n_4 n_3\}},$$

$$\Sigma_{n_1 \{n_2 n_3 n_4\}}^{(3)} = t_{n_1 n_2} + t_{n_1 n_3} + t_{n_1 n_4} + t_{n_1 \{n_2 n_3\}} + t_{n_1 \{n_2 n_4\}} + t_{n_1 \{n_3 n_4\}}$$

и т. д. По индексам в фигурных скобках предполагается симметризация, например $t_{n_1 \{n_2 n_3\}} = t_{n_1 n_2 n_3} + t_{n_1 n_3 n_2}$.

Список литературы

- [1] Эренрейх Г., Шварц Л. Электронная структура сплавов. М.: Мир, 1979. 200 с.
- [2] Elliott R. J., Krumhansl J. A., Leath P. L. // Rev. Mod. Phys. 1974. V. 46. P. 465—543.
- [3] Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А. Введение в теорию неупорядоченных систем. М.: Наука, 1982. 358 с.
- [4] Ведяев А. В. // ТМФ. 1977. Т. 31. № 3. С. 392—404.
- [5] Nickel B. G., Butler W. H. // Phys. Rev. Lett. 1973. V. 30. N 9. P. 373—377.
- [6] Nickel B. G., Krumhansl J. A. // Phys. Rev. 1971. V. B4. N 12. P. 4354—4363.
- [7] Butler W. H. // Phys. Lett. 1972. V. A39. N 3. P. 203—204.
- [8] Mills R., Ratanavararaksa P. // Phys. Rev. 1978. V. B18. N 10. P. 5291—5308.
- [9] Кривоглаз М. А. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов на флуктуационных неоднородностях в неидеальных кристаллах. Киев: Наукова думка, 1984. 288 с.
- [10] Ducastelle F., Gautier F. // J. Phys. 1976. V. F6, C 11. P. 2039—2062.
- [11] Грабовский Ю. Е., Кулиш Н. П., Петренко П. В., Репецкий С. П., Шатный Т. Д. // ДАН УССР, сер. А. 1989. № 7. С. 65—71.
- [12] Ведяев А. В., Грановский А. Б., Кондорский Е. И., Котельникова О. А. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 4. С. 961—967.
- [13] Stocks G. M., Williams R. W., Faulkner J. S. // Phys. Rev. 1971. V. B4. N 12. P. 4390—4405.
- [14] Грабовский Ю. Е., Кулиш Н. П., Пакчанин Л. М., Петренко П. В., Репецкий С. П. // Металлофизика. 1988. Т. 10. № 1. С. 114—116.
- [15] Зубченко В. С., Кулиш Н. П., Петренко П. В., Репецкий С. П., Татаров А. А. // ФММ. 1980. Т. 50. № 1. С. 113—122.
- [16] Бородачев С. М. // Изв. вузов, физика. 1978. № 5. С. 59—63.
- [17] Зубченко В. С., Кулиш Н. П., Петренко П. В., Репецкий С. П. // УФЖ. 1980. Т. 25, № 4. С. 541—545.

Киевский государственный университет
им. Т. Г. Шевченко

Поступило в Редакцию
4 августа 1988 г.
В окончательной редакции
16 октября 1989 г.