

# Теория колебательных возбуждений твердого раствора, учитывающая их рассеяние на многопримесных кластерах

© В.С. Виноградов

Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,  
119991 Москва, Россия

E-mail: vvs@sci.lebedev.ru

(Поступила в Редакцию 10 ноября 2004 г.)

Представлена теория колебательных возбуждений твердого раствора, учитывающая рассеяние возбуждений на многопримесных комплексах и способная описать сложную структуру его спектра. Основная особенность теории состоит в том, что на первом этапе производятся усреднение и Фурье-преобразование по координате примесного комплекса как целого, а на конечном — усреднение по межпримесным расстояниям в комплексе. Расчеты произведены в варианте, подобном приближению средней матрицы рассеяния, а также подобном приближению когерентного потенциала. Для иллюстрации теории рассчитаны спектр и диэлектрическая функция неупорядоченной линейной цепочки с одним и двумя атомами в элементарной ячейке. Результаты для колебательного спектра хорошо согласуются с компьютерными расчетами Дина.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 03-02-7110).

Проблема описания свойств элементарных возбуждений (электронов, экситонов, магнонов, фононов) в неупорядоченной среде продолжает оставаться актуальной поскольку не нашла еще полностью удовлетворительного решения. Основное препятствие на пути ее решения — это трудность корректного учета рассеяния возбуждений на многопримесных комплексах (кластерах). Для описания такого рассеяния использовались различные методы, однако ни один из них не привел к результатам, свободным от недостатков. Метод кластера, внедренного в эффективную среду, использовался в большом числе работ (см. обзоры [1,2]). Спектры, рассчитанные этим методом, отражают их сложную нерегулярную структуру, но весьма приближенным образом. Отступления, по-видимому, связаны с тем, что метод нарушает симметрию исходной решетки. Кроме того, в некоторых вариантах он приводит к неаналитической зависимости усредненной по пространству функции Грина. Приближение транслирующегося кластера, использованное в работах [3,4] совместно с формализмом дополненного пространства (augmented space formalism), не имеет этих недостатков. Однако этот метод не дает ясного и однозначного рецепта для выбора суммируемых диаграмм [2]. Кроме того, он чрезвычайно сложен для применений, и с его помощью рассмотрен только случай кластера из пары соседних примесей. В работе [5] применялся метод, называемый приближением динамического кластера (DCA). Этот метод скорее численный, чем аналитический, и, в частности, состоит в том, что при расчете интегралов по зоне Бриллюэна она делится на ячейки, а волновые векторы, соединяющие точки различных ячеек, заменяются волновыми векторами, соединяющими их центры. Метод содержит ограничение на симметрию кластеров. Она должна быть в определенном соответствии с симметрией зоны Бриллюэна. Спектры, рассчитанные этим методом, содержат большее количество деталей, чем те, которые получены

с помощью традиционного метода когерентного потенциала CPA-1 (CPA-1 — метод, учитывающий самосогласованным образом многократное рассеяние возбуждения на комплексе из одной примеси). Это продемонстрировано для случая большой концентрации примесей  $x = 0.5$ . К сожалению, в [5] не приводятся спектры для малых  $x$ , когда флуктуации в распределении примесей велики, и спектры наиболее нерегулярны. Сравнение таких спектров со спектрами, полученными компьютерным моделированием, позволило бы судить о том, как приближения метода сказываются на его способности воспроизвести их тонкие детали.

Наиболее привлекательным является диаграммный метод, так как он нагляден, позволяет оценивать и отбирать диаграммы, а также делать обобщения. С помощью этого метода были получены широко используемые сейчас соотношения CPA-1 [1,2]. Однако при применении этого метода к комплексам из двух и более примесей [6,7] были получены выражения для усредненной по распределению примесей функции Грина, имеющие неаналитическую зависимость от частоты [8]. Это приводило к неоднозначности или отрицательным значениям плотности состояний, а также другим нефизическим результатам. Более подробно все эти трудности теории описаны в обзорах [1,2]. Как показано и в данной работе, трудностей можно избежать, действуя иначе чем в предшествующих работах на этапе усреднения и Фурье-преобразования уравнений. Поясним это на примере простейшего двухпримесного комплекса. Сначала в ряде теории возмущений для функции Грина проводится обычная процедура отбора тех членов ряда (диаграмм), которые ответственны за рассеяние возбуждений (например, фононов) на паре примесей. Далее производится усреднение членов ряда и их перераспределение, приводящее к перенормировке взаимодействия и учету поправок многократного заполнения. Наконец, для получения решаемых уравнений

производится Фурье-преобразование. Обычно это преобразование производится по координате  $\mathbf{R}_{ij}$  — расстоянию между членами пары  $i, j$ . В результате получаются уравнения с отмененными выше недостатками. Вместо этого зафиксируем расстояние между членами пары  $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_{i'j'} = \dots$ , а усреднение и Фурье-преобразование будем производить по расстоянию между различными парами  $\mathbf{R}_{i'j'}$  или, что то же самое, координате, характеризующей положение кластера как целого. Эта процедура позволяет учесть наиболее сильные резонансные взаимодействия между колебательными модами удаленных одинаковых кластеров. Взаимодействием пар с различными  $\mathbf{R}_{ij}$  в приближении, учитывающим только парные комплексы, пренебрегается совсем, так как усреднение по  $\mathbf{R}_{ij}$ , производящееся на конечной стадии расчета, — процедура аддитивная. Однако и это более слабое взаимодействие может быть учтено, если перейти к комплексам из большего числа примесей. Например, комплекс из четырех примесей можно рассматривать как состоящий из двух пар, в частности, с неравными  $\mathbf{R}_{ij}$ . Процедура усложнения комплексов быстро сходится по крайней мере в случае сильных возмущений, когда возникают локализованные состояния. Как показывают результаты компьютерных расчетов Дина [9], достаточно учета комплексов из пяти примесей.

Описанная процедура может быть проведена как в несамосогласованном, так и в самосогласованном приближении.

1. Конкретные расчеты будем производить, пользуясь моделью кристаллической решетки. Будем считать, что при замещении атома решетки примесью происходит только изменение массы на величину  $\Delta m$ . Эффект такого возмущения зависит от частоты  $\omega$ . Удобно преобразовать его в форму, не зависящую от частоты. Тогда полученные результаты легко переносятся и на электронные системы. Для этого воспользуемся преобразованием, применявшемся в [10].

Уравнение колебаний решетки в матричной форме имеет вид

$$CW = \omega^2 [I + \delta\chi]W, \quad (1)$$

где  $W$  — вектор смещений решетки,  $C \equiv C_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ k & k' \end{pmatrix}$  — динамическая матрица, собственным значением которой является квадрат частоты  $\omega_j(\mathbf{y})^2$  собственных колебаний решетки с волновым вектором  $\mathbf{y}$  и номером ветви  $j$ ;  $l, k$  характеризуют соответственно положение элементарной ячейки и положение атома в ней;  $\alpha, \beta = x, y, z$  обозначают проекции смещений на оси координат;  $I$  — единичная матрица,  $\delta = \Delta m_{k_0}/m_{k_0}$  — относительное изменение массы атома  $k_0$  при замещении,  $\chi \equiv \delta_{\alpha\beta} \delta_{ll'} \delta_{kk'} \delta_{kk_0} \eta(l)$ ;  $\eta(l) = 1$ , если в ячейке  $l$  имеется примесь, в противном случае  $\eta(l) = 0$ .

Применим к (1) оператор  $[I + \delta\chi]^{-1}$ , который вследствие свойства  $\chi^2 = \chi$  равен  $I - \Delta\chi$ , где  $\Delta = \delta/(1 + \delta)$ . Получим  $[C - \omega^2 I]W = \Delta\chi CW$ . Соответствующее уравнение для функции Грина  $G^{(0)}$  имеет вид

$$LG^{(0)} = I\Delta\chi CG^{(0)} + I, \quad (2)$$

где  $L = C - \omega^2 I$ . Применим к (2) оператор  $L^{-1}$ , получим

$$G^{(0)} = g + g\Delta\chi CG^{(0)}, \quad (3)$$

где  $g$  — функция Грина решетки без примесей, удовлетворяющая уравнению  $Lg = I$ . И, наконец, подействовав на (3) оператором  $C$ , получим наше основное уравнение

$$F = f + f\Delta\chi F, \quad (4)$$

где  $f = Cg$ ,  $F = CG^{(0)}$ . В явном виде

$$f_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ k & k' \end{pmatrix} = N^{-1} \sum_{\mathbf{y}j} w_{\alpha} \left( k \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right) w_{\beta} \left( k' \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right)^* \times f_j(\mathbf{y}) \exp \left( 2\pi i \mathbf{y} \mathbf{x} \begin{pmatrix} l & l' \\ k & k' \end{pmatrix} \right), \quad (5)$$

где  $f_j(\mathbf{y}) = \omega_j(\mathbf{y})^2 / [\omega_j(\mathbf{y})^2 - \omega^2]$ ,  $w_{\alpha} \left( k \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right)$  — собственные векторы, подчиняющиеся условиям

$$\sum_j w_{\alpha} \left( k \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right) w_{\beta} \left( k' \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right)^* = \delta_{\alpha\beta} \delta_{kk'},$$

$$\sum_{\alpha\beta} w_{\alpha} \left( k \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j \end{matrix} \right. \right) w_{\alpha} \left( k' \left| \begin{matrix} \mathbf{y} \\ j' \end{matrix} \right. \right)^* = \delta_{jj'},$$

$N$  — число элементарных ячеек в периодически повторяющемся объеме. Выражение для  $g_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ k & k' \end{pmatrix}$  отличается от  $f_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} l & l' \\ k & k' \end{pmatrix}$  отсутствием  $\omega_j(\mathbf{y})^2$  в числителе суммируемого выражения.

Для расчета диэлектрической проницаемости нужна функция Грина  $G$ , подчиняющаяся уравнению  $(L - \omega^2 \delta\chi)G = I$  с возмущением, зависящем от частоты. Используя это уравнение, уравнение (2), а также свойства оператора  $\chi$ , можно получить связь  $G$  и  $G^{(0)}$

$$G = G^{(0)} - \Delta G^{(0)} \chi. \quad (6)$$

2. Проведем итерации уравнения (4) и изменим в получившемся ряде способ суммирования по промежуточным индексам. Для этого рассмотрим кластер из  $n$  элементарных ячеек произвольной формы и размера, где в положении  $k_0$  могут располагаться примеси. Вместо индекса  $l$  каждую ячейку будем нумеровать парой индексов  $(i, \mu)$ , где  $i$  характеризует положение кластера как целого, а  $\mu$  — положение элементарной ячейки в кластере. Будет также считать, что начало координат кластера  $i$  может находиться в любой ячейке решетки. Тогда при суммировании по  $i$  концы кластера отметят в  $n$  раз больше ячеек, чем имеется в решетке. Чтобы не было ошибки повторного счета, поставим перед каждой суммой по  $i$  коэффициент  $1/n$ . Далее отберем в ряде для  $F$  все члены, относящиеся к данному кластеру и просуммируем их. В результате получим

$$F \begin{pmatrix} l & l' \\ k & k' \end{pmatrix} = f \begin{pmatrix} l & l' \\ k & k' \end{pmatrix} + n^{-1} \sum_i \bar{f} \begin{pmatrix} l & l' \\ k & i \end{pmatrix} \bar{t}(i) \bar{f} \begin{pmatrix} i & l' \\ i & k' \end{pmatrix} + n^{-2} \sum_{ij} \bar{f} \begin{pmatrix} l & l' \\ k & i \end{pmatrix} \bar{t}(i) \bar{f}'(ij) \bar{t}(j) \bar{f} \begin{pmatrix} j & l' \\ j & k' \end{pmatrix} + \dots \quad (7)$$

Черточками над символами обозначаются строки, столбцы и матрицы в пространстве кластера. Так,

$$\bar{f} \left( \begin{array}{c|c} l & i \\ \hline k & \end{array} \right) \equiv f \left( \begin{array}{c|c} l & i\mu \\ \hline k & \end{array} \right), \quad \bar{f}' \left( \begin{array}{c|c} l' & \\ \hline k' & \end{array} \right) \equiv f \left( \begin{array}{c|c} i\mu & l' \\ \hline & k' \end{array} \right)$$

— строка и столбец из  $n$  элементов ( $\mu = 1, 2, \dots, n$ );  $\bar{f}(i) \equiv \Delta \bar{f}_\eta [\bar{I} - \Delta \bar{f}_\eta(ii)]^{-1}$ , где  $\bar{I} \equiv I \delta_{\mu\mu'}$ ,  $\bar{I}_\eta(i) \equiv I \eta(i\mu) \delta_{\mu\mu'}$ ,  $I$  — диагональная матрица в пространстве индексов поляризации; в частности, для трехмерной решетки  $I = \delta_{\alpha\beta}$ ,  $\alpha, \beta = x, y, z$ ;  $\bar{f}_\eta(ii) \equiv f(i\mu|i\mu') \eta(i\mu) \eta(i\mu')$ ;  $\bar{f}(ij) \equiv f(i\mu|i\mu')$  ( $\mu, \mu' = 1, 2, \dots, n$ );  $\bar{f}'(ij) = \bar{f}(ij)(1 - n\delta_{ij})$ . В пространстве  $d = 2, 3$  каждый матричный элемент вида  $f(i\mu|j\mu')$  в свою очередь является матрицей в пространстве индексов поляризации  $f(i\mu|j\mu') \equiv f_{\alpha\beta}(i\mu|j\mu')$ . Мы опускаем в приведенных выше выражениях индекс, характеризующий положение атома в ячейке, так как он везде одинаков и равен  $k_0$ . Множитель  $1 - n\delta_{ij}$  в  $\bar{f}'(ij)$  запрещает повторное рассеяние на кластере  $i$ , уже полностью учтенное в матрице  $\bar{f}(i)$ . Коэффициент  $n$  перед  $\delta$ -функцией появляется из-за того, что  $\delta$ -функция снимает одно суммирование по координате комплекса. Матрица  $\bar{f}(i)$  в (7) описывает многократное рассеяние возбуждения на комплексе  $i$ , а матрица  $\bar{f}'(ij)$  — его трансляцию от комплекса  $i$  к комплексу  $j$ .

Произведем усреднение ряда (7) по распределению примесей. Среднее от произведения матриц рассеяния представим в виде

$$\langle \bar{f}(i)\bar{f}(j) \dots \bar{f}(k) \rangle \cong \langle \bar{f}(i) \rangle \langle \bar{f}(j) \rangle \dots \langle \bar{f}(k) \rangle.$$

Это приближение, называемое приближением усредненной матрицы рассеяния (АТА), обеспечивает возможность суммирования ряда (7). В диаграммной технике оно соответствует отбрасыванию диаграмм рассеяния на комплексах с числом примесей, большим  $n$ , а также диаграмм, описывающих „обрастание“ нулевой функции Грина  $f_{\alpha\beta} \left( \begin{array}{c|c} l & l' \\ \hline k_0 & k_0 \end{array} \right)$ . Такие члены (диаграммы) возникают, например, в исходном среднем при совпадении индексов несоседних матриц  $\bar{f}(i)$ , например,  $i = k$ . Среднее по распределению примесей от  $\bar{f}(i)$  —  $\bar{\tau} = \langle \bar{f}(i) \rangle$  рассчитывается с помощью

$$\begin{aligned} \bar{\tau} &= \sum_{\eta(i1)=0,1} \sum_{\eta(i2)=0,1} \dots \\ &\dots \sum_{\eta(in)=0,1} (1-x)^n [x/(1-x)]^{(\eta(i1)+\eta(i2)+\dots+\eta(in))} - \bar{f}(i), \end{aligned} \quad (8)$$

где  $x$  — доля примесных атомов в решетке ( $0 \leq x \leq 1$ ).

Произведем Фурье-преобразование усредненного ряда (7)

$$\left\langle F \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \right\rangle = \sum_{l-l'} \left\langle F \left( \begin{array}{c|c} l & l' \\ \hline k & k' \end{array} \right) \right\rangle \exp \left[ -2\pi i \mathbf{y} \mathbf{x} \left( \begin{array}{c|c} l & l' \\ \hline k & k' \end{array} \right) \right]. \quad (9)$$

Получим

$$\begin{aligned} \left\langle \bar{F} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \right\rangle &= \bar{f} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \\ &+ \bar{f} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k_0 \end{array} \right) \bar{T}(\mathbf{y}) \bar{f} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k_0 & k' \end{array} \right), \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\bar{T}(\mathbf{y}) = n^{-1} [\bar{\tau}_\phi^{-1} - n^{-1} \bar{f}'_\phi]^{-1}, \quad (11)$$

$\bar{f}'_\phi = f \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k_0 & k_0 \end{array} \right) \bar{E} - n \bar{f}_\phi(ii)$ ,  $\bar{E}$  — матрица из  $n \times n$  одинаковых элементов  $I$ ,  $\bar{F} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) = F \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \bar{E}$ ,  $\bar{f} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) = f \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \bar{E}$ , матрицы  $\bar{f}_\phi(ii)$  и  $\bar{\tau}_\phi$  получаются из матриц  $\bar{f}(ii)$  и  $\bar{\tau}$  (8) соответственно заменой  $f(i\mu|j\mu') \rightarrow f(i\mu|j\mu') \exp(-i\phi_{\mu\mu'})$ , где  $\phi_{\mu\mu'} = 2\pi \mathbf{u} \mathbf{R}_{\mu\mu'}$  определяет изменение фазы при рассеянии,  $\mathbf{R}_{\mu\mu'} = \mathbf{R}_\mu - \mathbf{R}_{\mu'}$  — вектор, соединяющий ячейки  $\mu$  и  $\mu'$  кластера.

Определим собственно-энергетическую часть  $\bar{\Sigma}(\mathbf{y})$  уравнением

$$\begin{aligned} \left\langle \bar{F} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \right\rangle &= \bar{f} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \\ &+ \bar{f} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k_0 \end{array} \right) \bar{\Sigma}(\mathbf{y}) \left\langle \bar{F} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k_0 & k' \end{array} \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

Сопоставляя (10) и (12), получим

$$\bar{\Sigma}(\mathbf{y}) = n^{-1} [\bar{I} + \bar{\tau}_\phi \bar{f}_\phi]^{-1} \bar{\tau}_\phi, \quad (13)$$

где  $\bar{f}_\phi \equiv \bar{f}_\phi(ii)$ . Поскольку все элементы матрицы  $\left\langle \bar{F} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \right\rangle$  одинаковы, уравнение (10) можно также представить в виде

$$\begin{aligned} \left\langle F_{\alpha\gamma} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \right\rangle &= f_{\alpha\gamma} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \\ &+ f_{\alpha\beta} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k_0 \end{array} \right) T_{\beta\delta}(\mathbf{y}) f_{\delta\gamma} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k_0 & k' \end{array} \right), \end{aligned} \quad (14)$$

где  $T(\mathbf{y}) = \bar{u}' \bar{T}(\mathbf{y}) \bar{u}$ ;  $\bar{u}'$ ,  $\bar{u}$  — строка и столбец из  $n$  элементов  $I$  соответственно.  $T(\mathbf{y})$  можно также представить в виде  $T_{\beta\delta}(\mathbf{y}) = -d \ln(D(\mathbf{y})) / df_{\delta\beta} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k_0 & k_0 \end{array} \right)$ , где  $D(\mathbf{y})$  — детерминант матрицы  $\bar{M}(\mathbf{y}) = \bar{\tau}_\phi^{-1} - n^{-1} \bar{f}'_\phi$ ; отметим взаимобратное следование индексов  $\beta, \delta$  в матрицах  $f$  и  $T$ .

Функцию  $\left\langle F_{\alpha\gamma} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \right\rangle$  можно также выразить через собственно-энергетическую часть

$$\begin{aligned} \left\langle F_{\alpha\gamma} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \right\rangle &= f_{\alpha\gamma} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k' \end{array} \right) \\ &+ f_{\alpha\beta} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k & k_0 \end{array} \right) \Sigma_{\beta\delta}(\mathbf{y}) \left\langle F_{\delta\gamma} \left( \begin{array}{c|c} \mathbf{y} & \\ \hline k_0 & k' \end{array} \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

Из (14) и (15) следует, что

$$\Sigma(\mathbf{y}) = T(\mathbf{y}) \left[ I + f \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ k_0 & k_0 \end{pmatrix} T(\mathbf{y}) \right]^{-1}.$$

Здесь все величины — матрицы в пространстве индексов поляризации.

Итак, получены уравнения (14), (15), в которых учитывается многократное когерентное рассеяние возбуждений на  $n$ -примесном кластере, а также наиболее сильное резонансное взаимодействие между колебательными модами удаленных друг от друга одинаковых кластеров.

3. Уравнения (14), (15) и аналогичные им выведены с учетом рассеяния на  $n$ -примесных кластерах в несамосогласованном приближении. Назовем его модифицированным АТА, АТАМ- $n$ . Для того чтобы вывести уравнения самосогласованного приближения, воспользуемся соотношением (13). Введем обозначение  $\bar{\sigma}(\bar{f}_\phi) = n\bar{\Sigma}$ , где отмечена явно зависимость от матрицы  $\bar{f}_\phi$ , образованной из затравочной функции Грина  $f$ . Уравнение (13) эквивалентно ряду

$$\bar{\sigma}(\bar{f}_\phi) = \bar{\tau}(\bar{f}_\phi) - \bar{\sigma}(\bar{f}_\phi)\bar{f}_\phi\bar{\sigma}(\bar{f}_\phi) - \dots, \quad (16)$$

где  $\bar{\tau}(\bar{f}_\phi) \equiv \bar{\tau}_\phi$ . Этот ряд можно трактовать следующим образом. Собственно-энергетическая часть  $\bar{\sigma}(\bar{f}_\phi)$  получается, если из „голой“ собственно-энергетической части  $\bar{\tau}(\bar{f}_\phi)$  вычитать поправки многократного заполнения, образуемые всевозможными расщеплениями линий взаимодействия [1,2]. Рис. 1 поясняет этот процесс на простейшем примере диаграмм рассеяния на однопримесном комплексе. Суммы всех диаграмм в первой и второй колонке суммируются к выражениям, приведенным в первой строке таблицы. Остальные колонки (2, 3, ...) представляют собой поправки многократного заполнения. Сумма диаграмм с двумя неприводимыми частями суммируются к  $\bar{\sigma}(\bar{f}_\phi)\bar{f}_\phi\bar{\sigma}(\bar{f}_\phi)$  и т.д. В самосогласованном приближении собственно-энергетическая часть зависит от полной функции Грина, т.е.  $\bar{\sigma}(\langle\bar{F}_\phi\rangle)$ , и к диаграммам рис. 1 добавляются диаграммы с внутренними вставками типа тех, которые приведены в колонке 1 рис. 2. Перенесем члены колонки 1 в левую часть равенства и прибавим их к членам левой колонки. Из-за внутренних вставок аргумент  $\bar{\sigma}$  заменится на  $\bar{\Gamma}_\phi = [\bar{I} - \langle\bar{F}_\phi\rangle\bar{\sigma}(\bar{\Gamma}_\phi)]^{-1}\langle\bar{F}_\phi\rangle$ . Аналогичным образом заменяются аргументы в функции  $\bar{\sigma}$  во всех членах ряда. Свернув ряд и вернувшись к форме (13), получим

$$\bar{\sigma}(\bar{\Gamma}_\phi) = [\bar{I} + \bar{\tau}(\langle\bar{F}_\phi\rangle)\langle\bar{F}_\phi\rangle]^{-1} \bar{\tau}(\langle\bar{F}_\phi\rangle). \quad (17)$$

Чтобы найти  $\bar{\sigma}(\langle\bar{F}_\phi\rangle)$ , выразим  $\langle\bar{F}_\phi\rangle$  через  $\bar{\Gamma}_\phi$ . Получим  $\langle\bar{F}_\phi\rangle = \bar{\Gamma}_\phi [\bar{I} + \bar{\sigma}(\bar{\Gamma}_\phi)\bar{\Gamma}_\phi]^{-1}$ . Подставив последнее выражение в правую часть (17) и сделав замену  $\bar{\Gamma}_\phi \rightarrow \langle\bar{F}_\phi\rangle$ , окончательно получим

$$\bar{\Sigma}(\mathbf{y}) = n^{-1} [\bar{I} + \bar{\tau}(\bar{F}'_\phi)\bar{F}'_\phi]^{-1} \bar{\tau}(\bar{F}'_\phi), \quad (18)$$

где  $\bar{F}'_\phi = \langle\bar{F}_\phi\rangle [\bar{I} + n\bar{\Sigma}(\mathbf{y})\langle\bar{F}_\phi\rangle]^{-1}$ ,  $\bar{\Sigma}(\mathbf{y}) \equiv \bar{\Sigma}(\langle\bar{F}'_\phi\rangle)$ . Таким образом, модифицированные соотношения самосогласо-

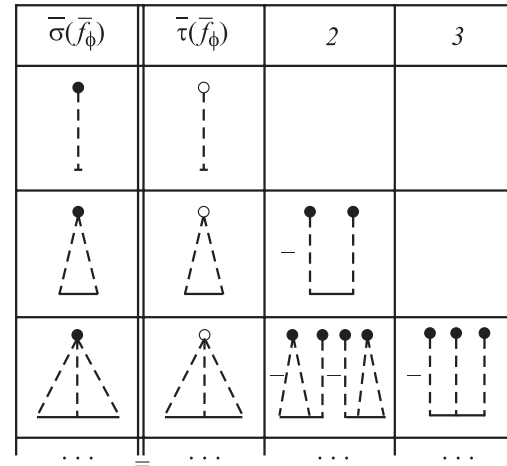


Рис. 1. Диаграммы „голой“ и „одетой“ собственно-энергетических частей (первая и вторая колонка соответственно) в несамосогласованном однопримесном приближении (АТАМ-1). В колонках, обозначенных 2, 3, ..., приведены диаграммы поправок многократного заполнения, содержащие 2, 3, ... неприводимых части.

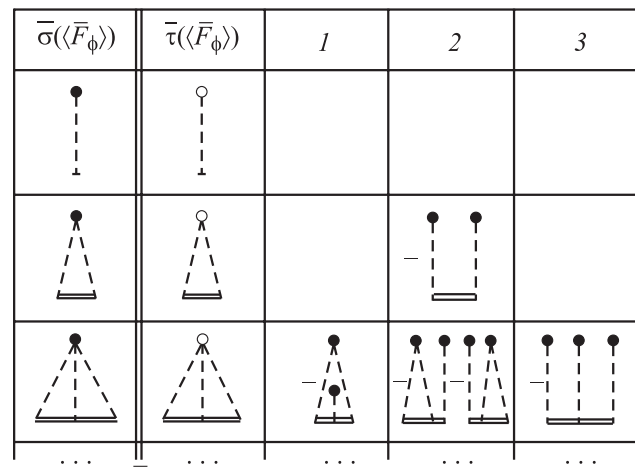


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но в самосогласованном однопримесном приближении (СРАМ-1). В колонке, обозначенной цифрой 1, приведены диаграммы с внутренними вставками.

ванного приближения (СРАМ- $n$ ) получаются из соотношений АТАМ- $n$  (13) заменой в правой его части  $\bar{f}_\phi \rightarrow \bar{F}'_\phi$ . При  $n = 1$  формулы (18) переходят в формулы СРА-1 [1,6]. Отметим, что соотношения СРАМ- $n$  (18) и СРА- $n$  [7] существенно отличаются, хотя получены сходными методами. Соотношения СРА- $n$  [7] связывают кластеры разной формы и размера, соотношения СРАМ- $n$  связывают кластеры, отличающиеся лишь трансляцией, что делает их схожими с кластерами ТСА [3,4].

Для того чтобы получить окончательные выражения для функций Грина, их следует усреднить по межпримесным расстояниям  $|\mathbf{R}_{\mu\mu'}|$  в кластере. При этом нет необходимости учитывать кластеры очень большого

размера. Например, для аккуратного описания колебательного спектра сплава достаточно учитывать кластеры с размерами не больше среднего межпримесного расстояния  $|\mathbf{R}_{\mu\mu'}| \leq (a/x)^{1/d}$ , где  $a$  — постоянная решетки,  $d = 1, 2, 3$  — размерность пространства.

4. Далее для иллюстрации рассчитаем плотность колебательных мод линейной одноатомной цепочки, учитывая лишь двухпримесные кластеры. Усреднение по размеру комплекса  $|\mathbf{R}_{12}| = (r+1)a$  произведем, используя функцию распределения  $P(r) = x(1-x)^r$  ( $\sum_{r=0, \dots, \infty} P(r) = 1$ ), имеющую смысл вероятности найти пару примесей на расстоянии  $(r+1)a$  со свободным от других примесей промежутком между ними. Тогда

$$\langle\langle F(\mathbf{y}) \rangle\rangle = \sum_{r=0, \dots, \infty} P(r) \langle F(\mathbf{y}, r) \rangle, \quad (19)$$

где вторые треугольные скобки означают усреднение по  $R_{12}$ . Поскольку при росте  $r$  функция  $\langle F(\mathbf{y}, r) \rangle$  быстро стремится к функции  $\langle F(\mathbf{y}) \rangle$  однопримесного кластера, для вычисления суммы (19) было достаточно рассчитать функции  $\langle F(\mathbf{y}, r) \rangle$  при значениях  $r = 0, 1, \dots, r_{\max}$ ,  $r_{\max} = 4$ . С помощью (19) получим плотность колебательных мод  $\rho(\omega^2) = (N\pi)^{-1} \text{Im} (\sum_{\mathbf{y}} \langle\langle G^{(0)}(\mathbf{y}) \rangle\rangle)$ , где  $\langle\langle G^{(0)}(\mathbf{y}) \rangle\rangle = \langle\langle F(\mathbf{y}) \rangle\rangle / \omega(\mathbf{y})^2$ . На рис. 3 приведен результат расчета для  $(m + \Delta m)/m = 1/3$  ( $\Delta = -2$ );  $x = 0.1$  и коэффициента затухания  $\varepsilon = 2 \text{Im} (\omega/\omega_0)^2 = 0.01$ . По оси ординат отложена спектральная функция  $\rho(\omega^2)$  в безразмерном виде  $\sigma(\nu)$ , где  $\nu = (\omega/\omega_0)^2$ ,  $\omega_0$  — наибольшая частота в спектре решетки;  $\sigma(\nu)$  нормирована так, что  $\int_0^\infty \sigma(\nu) d\nu = 1$ . Пики, отмеченные буквами  $B, G$

(обозначения работы [9]), обязаны колебательным модам пары примесей на ближайшем расстоянии ( $r = 0$ ), а полоса  $\nu = 1.7-2$  — модам одиночных примесей ( $A$ ) и примесных пар с  $r > 0$ . Для тех же условий, но коррелированного распределения примесей функция  $\sigma(\nu)$  была рассчитана в работе [11]. Положения пиков на рис. 3 согласуются с положениями одно- и двухпримесных пиков в спектрах работы [9], полученных прямым компьютерным расчетом для неупорядоченной линейной цепочки из 8000 атомов.

Поскольку расчет плотности состояний для случая многопримесных кластеров ( $n > 2$ ) требует много компьютерного времени, вместо плотности состояний рассчитывалась функция  $\Delta(\mathbf{y}, \omega) = \pi^{-1} \text{Im} (\langle\langle G(\mathbf{y}, \omega) \rangle\rangle)$  для отдельных значений волнового вектора  $\mathbf{y}$ . Функция  $\langle G \rangle$  рассчитывалась с использованием матричного соотношения  $\langle G \rangle = \langle G^{(0)} \rangle - \langle G^{(0)} \rangle \Sigma$ , которое можно получить из (6) и (15). На рис. 4 приведены кривые для функции  $\Delta(\mathbf{y}, \omega)$  в безразмерной форме  $\sigma(\lambda, \nu)$  для  $n = 3$ ,  $x = 0.2$ ,  $\lambda \equiv 2ya = 0.1$  и  $0.9$  соответственно. Остальные параметры имеют те же значения, что и для кривой на рис. 1. Усреднение по межпримесным расстояниям  $|\mathbf{R}_{1,2}| = (r+1)a$  и  $|\mathbf{R}_{2,3}| = (q+1)a$  производилась с использованием функции распределения  $P(r, q) = P(r)P(q)$ . Функции Грина  $\langle G(\mathbf{y}, r, q) \rangle$  рассчитывались для значений  $r = 0, 1, \dots, r_{\max}$ ,  $q = 0, 1, \dots, q_{\max}$ ,

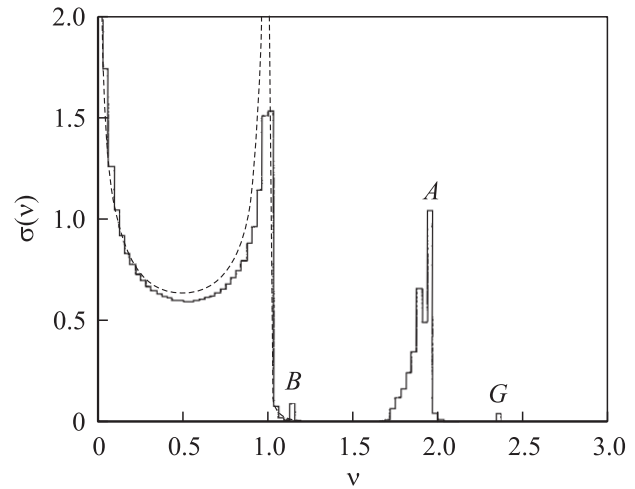


Рис. 3. Спектральная функция  $\sigma(\nu)$  линейной неупорядоченной цепочки (в безразмерных единицах) с учетом кластеров из  $n = 1, 2$  примесей (сплошная линия),  $n = 0$  (штриховая линия). Доля примесных атомов  $x = 0.1$ , отношение масс примесного и основного атомов  $(m + \Delta m)/m = 1/3$  ( $\Delta = -2$ ), коэффициент затухания  $\varepsilon = 0.01$ ,  $\nu = (\omega/\omega_0)^2$ .

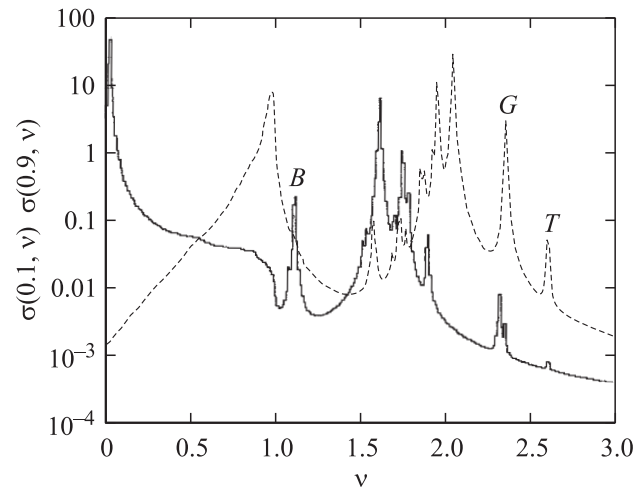


Рис. 4. Мнимая часть функции Грина  $\sigma(\lambda, \nu)$  в зависимости от  $\nu = (\omega/\omega_0)^2$  для двух значений волнового вектора  $\mathbf{y}$ . Учитывались кластеры из  $n = 1-3$  примесей;  $x = 0.2$ ,  $\lambda \equiv 2ya = 0.1$  и  $0.9$ ; остальные параметры имеют те же значения, что и для рис. 3;  $\sigma(0.1, \nu)$  (сплошная линия),  $\sigma(0.9, \nu)$  (штриховая линия).

$r_{\max} = q_{\max} = 4$ . Пик  $T$  обязан высокочастотной моде колебаний тройки примесей на ближайшем расстоянии, остальные обозначения имеют тот же смысл, что и для рис. 3. Расстояния между пиками кривых  $\sigma(0.1, \nu)$ ,  $\sigma(0.9, \nu)$  позволяют судить о ширинах примесных зон соответствующих мод.

Используя функцию  $\langle G \rangle$  можно также рассчитать диэлектрическую функцию. Для кубического кристалла, а также для линейной цепочки с двумя ионами в

элементарной ячейке и массами  $m_1$ ,  $m_2$  она имеет вид

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + (\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) / \left\{ 1 - (\omega/\omega_0)^2 [1 - (m_2/(m_1 + m_2))\Sigma]^{-1} \right\}, \quad (20)$$

где  $\varepsilon_0$ ,  $\varepsilon_\infty$  — статическая и высокочастотные диэлектрические константы,  $\omega_0$  — частота оптически активных колебаний решетки без примесей. Спектр функции  $\varepsilon(\omega)$  также был рассчитан для линейной цепочки. Он содержит меньше деталей, чем спектры функций  $\sigma(\nu)$ ,  $\sigma(\lambda, \nu)$ .

Данные расчеты производились в приближении АТАМ. Применение СРАМ требует значительно больших затрат компьютерного времени, и такие расчеты пока не производились. Следует однако заметить, что АТАМ- $n$  дает достаточно хорошее описание спектров при  $x \sim 0.1-0.3$ , как можно заключить из сравнения данных расчетов с расчетами [9]. Заметим также, что АТАМ- $n$  учитывает внутренние вставки („гнездовые диаграммы“), описывающие рассеяние на кластерах из  $(n - 1)$  и менее примесей.

Итак, предложен новый способ учета рассеяния элементарных возбуждений на многопримесных комплексах. Его применение позволяет описать сложную структуру спектров этих возбуждений в неупорядоченной среде. Соотношения теории свободны от недостатков многих предыдущих теорий (нарушение трансляционной симметрии, нефизические зависимости физических величин). Соотношения теории выведены как в несогласованном (типа АТА), так и в самосогласованном приближении (типа СРА). Результаты теории проиллюстрируются расчетом спектра колебательных мод в одномерных моделях твердых растворов.

## Список литературы

- [1] R.J. Elliott, J.A. Krumhansl, P.L. Leath. *Rev. Mod. Phys.* **46**, 3, 465 (1974).
- [2] A. Gonis. *Green Functions for Ordered and Disordered Systems*. In the series *Studies in Mathematical Physics* / Eds E. van Gresen and E.M. De-Jager. North-Holland, Amsterdam (1992). 685 p.
- [3] R.L. Mills, P. Ratanavararaksa. *Phys. Rev. B* **18**, 20, 5291 (1978).
- [4] T. Kaplan, P.L. Leath, L.J. Gray, H.W. Diehl. *Phys. Rev. B* **21**, 10, 4230 (1980).
- [5] M. Jarrell, H.R. Krishnamurthy. *Phys. Rev. B* **63**, 12, 125 102 (2001).
- [6] R.N. Aiyer, R.J. Elliott, J.A. Krumhansl, P.L. Leath. *Phys. Rev.* **181**, 3, 1006 (1969).
- [7] B.G. Nickel, J.A. Krumhansl. *Phys. Rev. B* **4**, 12, 4354 (1971).
- [8] W.H. Butler, B.G. Nickel. *Phys. Rev. Lett.* **30**, 9, 373 (1973).
- [9] P. Dean. *Proc. Roy. Soc. A* **260**, 1301, 263 (1961).
- [10] А.М. Косевич. *Основы механики кристаллической решетки*. Наука, М. (1972). 280 с.
- [11] В.С. Виноградов. *Краткие сообщения по физике* 2, 11 (2002). [V.S. Vinogradov. *Bulletin of the Lebedev Physics Institute* 2, 8 (2002)].