

Размер оптимального примесного кластера и поправки многократного заполнения в теории рассеяния колебательных возбуждений в твердом растворе

© В.С. Виноградов

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

E-mail: vvs@sci.lebedev.ru

(Поступила в Редакцию 15 января 2007 г.
В окончательной редакции 2 апреля 2007 г.)

Получено выражение для корреляционной длины L , определяющей размер области твердого раствора, в которой рассеяние возбуждений происходит когерентным образом. Корреляционная длина зависит от доли примесных атомов в твердом растворе x и от размерности решетки d . При физическом анализе одночастичных процессов рассеяния в твердом растворе и в расчетах достаточно учитывать кластеры с числом ячеек n , укладывающихся в корреляционный объем L^d . Теоретический анализ иллюстрируется расчетом спектральных функций твердого раствора при различных значениях x и n .

Рассчитываются поправки многократного заполнения (multiple-occupancy corrections — полиномы по степеням x) к диаграммам рассеяния. Для этого используется метод последовательного отщепления линий взаимодействия в диаграммах для собственно энергетической части. Ранее метод применялся в случае рассеяния на одной примеси. В данной работе проверена его эффективность в случае рассеяния на многопримесном кластере. Метод полезен для анализа и оценки вкладов отдельных диаграмм рассеяния.

Работа выполнена при поддержке программы Президиума РАН „Квантовые наноструктуры“.

PACS: 63.20.Pw, 63.50.+x

1. Теоретические исследования элементарных возбуждений (электронов, экситонов, магнонов, фононов) в твердых растворах и других неупорядоченных средах имеют уже длинную историю. Их развитие отражается в большом числе работ, среди которых имеются обзоры [1–3] и монографии [4,5]. В работах получены существенные методические результаты. Разработана диаграммная техника для усредненной по пространству функции Грина, позволяющая в принципе корректно учитывать многократное рассеяние возбуждений на примесях и применимая во всей области составов твердого раствора ($0 \leq x \leq 1$) [1,6]. В ряде случаев были просуммированы бесконечные ряды диаграмм. Это случаи рассеяния на одной примеси в несамосогласованном (average t -matrix approximation, АТА-1) и самосогласованном (coherent potential approximation, CPA-1) приближениях. Результаты расчетов в обоих приближениях сравнивались с экспериментальными данными и результатами численного моделирования [7]. Были отмечены расхождения, которые связывались с отсутствием учета в теории рассеяния возбуждений на кластерах с числом примесей $n > 1$ [1,4,5]. Первые попытки учета рассеяния на кластерах $n \geq 2$ в рамках диаграммного метода [8,9] привели к нефизическим результатам [10]. Для решения этой задачи применялись также другие методы. Одним из них является метод кластера, внедренного в эффективную среду. Хотя этот метод в некоторых вариантах давал физически разумные результаты, с теоретической точки зрения он неудовлетворителен, поскольку связан с нарушением трансляционной инвариантности усреднен-

ной функции Грина [1,5]. В работах [11,12] для решения задачи применялся специальный диаграммный метод, названный авторами приближением транслирующегося кластера (ТКА). Метод не нарушает трансляционную инвариантность среды. Однако этот метод не дает ясного и однозначного рецепта для отбора суммируемых диаграмм [5]. Кроме того, он чрезвычайно сложен для применения, и с его помощью рассмотрен только случай кластера из пары соседних примесей. В работе [13] применялся метод, названный авторами приближением динамического кластера (DCA). Этот метод, скорее численный, чем аналитический, состоит, в частности, 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 ограничения 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 метода CPA-1. Это продемонстрировано для случая большой концентрации примесей $x = 0.5$. К сожалению, в [13] не приводятся спектры для малых x , когда флуктуации в распределении примесей велики, а спектры наиболее нерегулярны. Расчет и анализ таких спектров позволил бы лучше судить о возможностях метода.

В работах [14–16] при рассмотрении рассеяния фононов на кластере из n ячеек в решетке использовался новый способ усреднения по положениям примесей.

Сначала производилось усреднение по положению кластера как целого, а потом по положениям частиц в кластере. Соотношения теории не содержат нефизических зависимостей. Результаты расчета колебательного спектра неупорядоченной линейной цепочки хорошо согласуются с результатами компьютерного моделирования [7].

В работах [14–16] не освещен, однако, ряд важных вопросов.

1) Каковы при данном составе x размер (n) и форма кластера, оптимального для физического анализа и расчета?

2) Какой вид в данной теории имеют поправки многократного заполнения (multiple-occupancy corrections, ПМЗ) и каким способом их можно рассчитать?

2. Для анализа и иллюстраций будем использовать простейшую модель кристаллической решетки — линейную цепочку с одним атомом в элементарной ячейке. Результаты легко обобщаются на более сложные решетки.

Будем считать, что при замещении атома решетки примесью происходит только изменение массы на величину Δm . Эффект такого возмущения зависит от частоты ω . Удобно преобразовать его в форму, не зависящую от частоты. Тогда полученные результаты легко переносятся и на электронные системы. Для этого воспользуемся преобразованием, применявшимся в [17].

Уравнения колебаний решетки в матричной форме имеют вид

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

где $W \equiv W(l)$ — вектор смещений решетки; $C \equiv C(l, l')$ — динамическая матрица, собственным значением которой является квадрат частоты $\omega(\mathbf{y})^2$ собственных колебаний решетки с волновым вектором \mathbf{y} , а l характеризуют положение элементарной ячейки; I — единичная матрица в пространстве l ; $\delta = \Delta m/m$ — относительное изменение массы атома при замещении; $\chi \equiv \delta_{ll'}\eta(l)$; $\eta(l) = 1$, если в ячейке l имеется примесь, в противном случае $\eta(l) = 0$.

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

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

где $L = C - \omega^2I$. Применив 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

$$f(l'l') = N^{-1} \sum_{\mathbf{y}} f(\mathbf{y}) \exp(2\pi i \mathbf{y} \chi(l'l')), \quad (5)$$

где $f(\mathbf{y}) = \omega(\mathbf{y})^2/[\omega(\mathbf{y})^2 - \omega^2]$, N — число элементарных ячеек в периодически повторяющемся объеме. Выражение $g(l'l')$ отличается от $f(l'l')$ отсутствием $\omega(\mathbf{y})^2$ в числителе суммируемого выражения.

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

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

3. Сравним выражения для соответствующих диаграмм, полученных методом работ [15,16] и традиционным. В [15,16] сначала проводятся итерации уравнения (4) и в каждом члене ряда изменяется способ суммирования по промежуточным индексам. Рассматривается кластер из n элементарных ячеек произвольной формы и размера, в каждой ячейке которого находится примесь. Вместо индекса l каждая ячейка нумеруется парой индексов (i, μ) , где i характеризует положение кластера как целого, а μ — положение элементарной ячейки в кластере. Считается также, 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, перед каждой суммой по i ставится коэффициент $1/n$. Если отобрать в ряде для F все члены, относящиеся к данному кластеру, и просуммировать их, то получится

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

Здесь черточками над символами обозначаются строки, столбцы и матрицы в пространстве кластера. Так, $\bar{f}(l|i) \equiv f(l|i\mu)$, $\bar{f}(i|l') \equiv f(i\mu|l')$ — строка и столбец из n элементов ($\mu = 1, 2, \dots, n$); $\bar{t}(i) \equiv \Delta \bar{I}_\eta [\bar{I} - \Delta \bar{f}_\eta(ii)]^{-1}$, где $\bar{I} \equiv \delta_{\mu\mu'}$, $\bar{I}_\eta(i) \equiv \eta(i\mu)\delta_{\mu\mu'}$; $\bar{f}_\eta(ii) \equiv f(i\mu|i\mu')\eta(i\mu)\eta(i\mu')$; $\bar{f}(ij) \equiv f(i\mu|j\mu')$ ($\mu, \mu' = 1, 2, \dots, n$); $\bar{f}'(ij) = \bar{f}(ij)(1 - n\delta_{ij})$. Множитель $(1 - n\delta_{ij})$ в $\bar{f}'(ij)$ запрещает повторное рассеяние на кластере i , уже полностью учтенное в матрице $\bar{t}(i)$. Коэффициент n перед δ -функцией появляется из-за того, что δ -функция снимает одно суммирование по координате комплекса. Матрица $\bar{t}(i)$ в (7) описывает многократное рассеяние возбуждения на кластере i , а матрица $\bar{f}'(ij)$ — его трансляцию от кластера i кластеру 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 $f(l')$. Такие члены (диаграммы) возникают, например, в исходном среднем при совпадении индексов не соседних 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

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

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

Произведем Фурье-преобразование усредненного ряда (7)

$$\langle F(\mathbf{y}) \rangle = \sum_{l'} \langle F(l') \rangle \exp[-2\pi i \mathbf{y} \mathbf{x}(l')]. \quad (9)$$

После ряда преобразований, которые подробно описаны в [15,16], получим уравнение

$$\langle F(\mathbf{y}) \rangle = f(\mathbf{y}) + f(\mathbf{y})\Sigma(\mathbf{y})\langle F(\mathbf{y}) \rangle, \quad (10)$$

где скалярная собственно энергетическая часть $\Sigma(\mathbf{y})$ выражается через матричную $\bar{\Sigma}(\mathbf{y})$ с помощью соотношения $\Sigma(\mathbf{y}) = \bar{u}' \bar{\Sigma}(\mathbf{y}) \bar{u}$; \bar{u}' , \bar{u} — строка и столбец из n единиц. Матрица $\bar{\Sigma}(\mathbf{y})$ имеет вид

$$\bar{\Sigma}(\mathbf{y}) = n^{-1} [\bar{f} + \bar{\tau}_\phi \bar{f}_\phi]^{-1} \bar{\tau}_\phi, \quad (11)$$

где матрицы $\bar{f}_\phi(ii)$ и $\bar{\tau}_\phi$ получаются из матриц $\bar{f}(ii)$ и $\bar{\tau}$ (8) соответственно заменой $f(i\mu|i\mu') \rightarrow f(i\mu|i\mu') \exp(-i\phi_{\mu\mu'})$, где $\phi_{\mu\mu'} = 2\pi \mathbf{y} \mathbf{R}_{\mu\mu'}$ определяет изменение фазы при рассеянии, $\mathbf{R}_{\mu\mu'} = \mathbf{R}_\mu - \mathbf{R}_{\mu'}$ — вектор, соединяющий ячейки μ и μ' кластера.

Соотношения (10), (11) представляют собой уравнения для функции Грина, выведенные с учетом рассеяния на n — примесных кластерах в несамосогласованном приближении, названном в [16] АТАМ- n , т.е. модифицированном АТА. Чтобы получить соотношения модифицированного самосогласованного приближения (СРАМ- n), следует в (11) сделать замену $\bar{f}_\phi \rightarrow \bar{F}_{\phi'}$, где

$$\bar{F}_{\phi'} = \langle \bar{F}_\phi \rangle [\bar{I} + n \bar{\Sigma}(\mathbf{y}) \langle \bar{F}_\phi \rangle]^{-1}. \quad (12)$$

Здесь $\bar{\Sigma}(\mathbf{y}) \equiv \bar{\Sigma}(\langle \bar{F}_{\phi'} \rangle)$ в отличие от (11), где $\bar{\Sigma}(\mathbf{y}) \equiv \bar{\Sigma}(\langle \bar{f}_\phi \rangle)$.

Более подробно вывод уравнений самосогласованного приближения изложен в [16].

4. Сравним теперь выражения для $\Sigma(\mathbf{y})$, рассчитанные с помощью (11) и традиционным методом. В случае АТАМ-2 легко получить замкнутое выражение для $\Sigma(\mathbf{y})$. Оно имеет вид

$$\Sigma(\mathbf{y}) = (1/2)xt [\Psi(a)(1 + \cos(\varphi_{12})) + \Psi(-a)(1 - \cos(\varphi_{12}))], \quad (13)$$

где $\Psi(a) = [1 - (1-x)a] / [1 - a + x(b+a) - x(1-x) \times a(b+a)]$, $a = tf(12)(f(12) = f(21))$, $b = tf(0)$, $t = \Delta[1 - \Delta f(0)]^{-1}$, $\varphi_{12} = 2\pi \mathbf{y} \mathbf{x}(12)$.

Разложив (13) по параметру взаимодействия Δ до членов порядка Δ^6 , получим

$$\Sigma(\mathbf{y}) = x\Delta + x^2(1-x)\Delta^3 f(12)^2 + x^2(1-x)^2 \Delta^4 f(12)^3 \cos(\varphi_{12}) + x^2(1-x)^2 \Delta^5 f(12)^4 + x^2(1-x)^2 (1-x^2) \Delta^6 f(12)^5 \cos(\varphi_{12}) \dots \quad (14)$$

Так как нас сейчас интересует рассеяние на парах примесей, в этом выражении мы пренебрегли многократным рассеянием на одной примеси, положив $t = \Delta$. При последующем анализе нас будут интересовать первые два члена ряда (14). Остальные будут рассматриваться в связи с ПМЗ позже.

При усреднении ряда для (4) получим выражение для $\Sigma(\mathbf{y})$, отличающееся от второго члена (14) заменой $f(12)^2$ на сумму $f(12)^2 \rightarrow \sum_{(1-2)} f(12)^2$, где суммирование производится по всем $\mathbf{x}(12) \neq 0$.

Одним из способов приведения выражения (14) к выражению с суммой по $\mathbf{x}(12)$ является усреднение (14) по расстоянию $\mathbf{x}(12)$. Возьмем функцию распределения $P(r) = Ax(1-x)^r$, имеющую смысл вероятности найти пару примесей на расстоянии $(r+1)a$ (a — постоянная решетки) со свободным от других примесей промежутком между ними. Из условия нормировки $\sum_{r=0}^N P(r) = 1$ получим $A = x^{-1}[1 - (1-x)^N]^{-1}$, где N — число элементарных ячеек в периодически повторяющемся объеме.

Первый член в (14) не меняется при усреднении, так как не зависит от $\mathbf{x}(12)$. Среднее от второго члена удобно вычислять, переходя к Фурье-представлению (5). Производя суммирование по r , при условии $N \gg 1$, $(1-x)^N \ll 1$ получим для среднего

$$\langle \langle f(12)f(21) \rangle \rangle = x\pi N^{-2} \sum_{\mathbf{y}, \mathbf{y}'} f(\mathbf{y})f(\mathbf{y}')\Phi(\varphi - \varphi'), \quad (15)$$

где

$$\Phi(\varphi) = \pi^{-1} \frac{\cos(\varphi) - \exp(-\gamma)}{\sin(\varphi)^2 + [\cos(\varphi) - \exp(-\gamma)]^2},$$

$$\varphi = 2\pi \mathbf{y} a, \quad \gamma = \ln[1/(1-x)].$$

При $\gamma \ll 1$ разность $\Phi(\varphi) - \Phi(\pi)$ близка по свойствам к δ -функции: $\Phi(\varphi) - \Phi(\pi) \approx \delta(\varphi)$. Используя это свойство, в (15) можно выполнить одно интегрирование по импульсам. Возвращаясь после этого к координатному представлению, получим

$$\begin{aligned} \langle\langle f(12)f(21) \rangle\rangle &= (1/2)x \left[\sum_{(1-2)} f(12)^2 - f(0)^2 \right] \\ &= (1/2)x \sum_{x(12) \neq 0} f(12)^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Итак, в приближении $n = 2$ для членов, описывающих рассеяние на паре примесей, получаем вес $(1/2)x$, меньший требуемого и равного единице.

В случае $n > 2$ выражение для $\Sigma(\mathbf{y})$ в рассматриваемом приближении можно получить, производя разложение правой части формулы (11) по \bar{r}_ϕ . Получим выражение вида (14), в котором $f(12)f(21)$ заменяется на $(2/3)[f(12)f(21) + f(13)f(31) + f(23)f(32)]$. Усредняя это выражение по $x(12), x(13)$, получим $(2/3)\langle\langle f(12)f(21) + f(13)f(31) + f(23)f(32) \rangle\rangle = 2\langle\langle f(12)f(21) \rangle\rangle$, т.е. в приближении $n = 3$ вес рассеяния на парах увеличивается в 2 раза по сравнению с весом в приближении $n = 2$. В случае кластера с произвольным числом ячеек n получим увеличение коэффициента в $\frac{n!}{n(n-2)!} = n-1$ раза, и вес членов рассеяния на парах составит величину $(1/2)(n-1)x$. Чтобы члены рассеяния на парах примесей имели правильный вес, число ячеек в кластере должно быть

$$n = 1 + 2/x. \quad (17)$$

В приведенном выше рассмотрении предполагалось, что число ячеек в кластере n меньше числа ячеек периодичности повторяющегося объема N . Это предположение требовало проведения процедуры усреднения, чтобы эффективно заполнить кластером весь объем N . Можно, однако, действовать по-другому, избегая процедуры усреднения. Из вида выражения для $\Phi(\varphi)$ (15) следует, что в решетке с долей примесей x импульс \mathbf{y} сохраняется с точностью до величины $(\Delta\mathbf{y})_\gamma \approx (\pi a)^{-1}\gamma$, где $\gamma \approx x$ при $x \ll 1$. С другой стороны, минимальный шаг \mathbf{y} связан с величиной периодического „объема“ N . В одномерном случае $\Delta\mathbf{y} = (aN)^{-1}$. Очевидно, не имеет смысла выбирать $\Delta\mathbf{y}$ слишком малым. Достаточно, чтобы $\Delta\mathbf{y} \leq (\Delta\mathbf{y})_\gamma$. Отсюда имеем

$$N \geq \pi/\gamma \approx \pi/x. \quad (18)$$

Таким образом, получим, что число ячеек в плотном кластере должно быть $n = N \geq \pi/x$. Аналогичный результат можно получить при рассмотрении двух- и трехмерных решеток. Линейный размер кластера с числом ячеек n в решетке размерности d имеет величину $L \sim (\pi/x)^{1/d}a$, где a — постоянная решетки. Величину L можно рассматривать как корреляционную длину

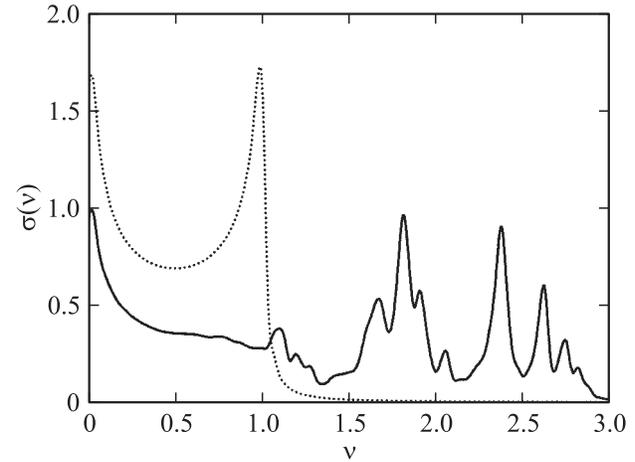


Рис. 1. Плотность колебательных мод $\sigma(v)$ линейной неупорядоченной цепочки (в безразмерных единицах) с учетом кластеров из $n = 6$ ячеек (сплошная линия) и $n = 0$ (пунктирная линия). Доля примесных атомов $x = 0.5$; отношение масс примесного и основного атомов $(m + \Delta m)/m = 1/3$ ($\Delta = -2$); коэффициент затухания $\varepsilon = 0.05$; $v = (\omega/\omega_0)^2$.

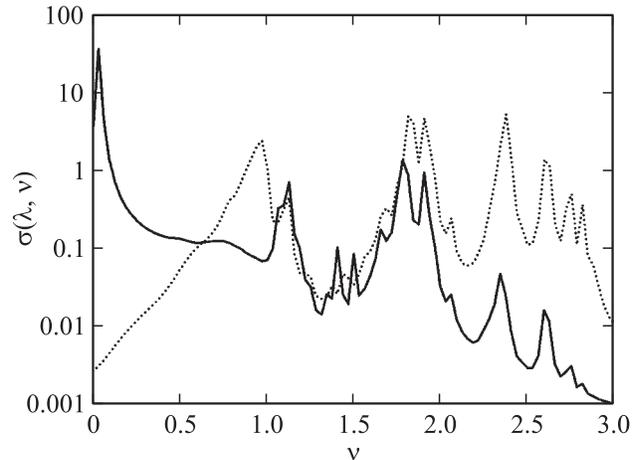


Рис. 2. Мнимая часть функции Грина $\sigma(\lambda, v)$ в зависимости от $v = (\omega/\omega_0)^2$ для двух значений волнового вектора \mathbf{y} . Учитывались кластеры из $n = 10$ ячеек; $x = 0.3$; $\lambda \equiv 2\mu a = 0.1$ и 0.9 ; остальные параметры имеют те же значения, что и для рис. 1. Сплошная линия — $\sigma(0.1, v)$, пунктирная — $\sigma(0.9, v)$.

в рассматриваемой задаче. Отсюда следует, что для правильного описания явлений рассеяния возбуждений в твердом растворе достаточно рассматривать плотные кластеры размера L . Этот физический результат чрезвычайно важен для численных расчетов, так как позволяет на порядки сократить число учитываемых в решетке ячеек. Для иллюстрации произведен расчет плотности колебательных мод линейной одноатомной цепочки $\sigma(v)$ в зависимости от $v = (\omega/\omega_0)^2$, где ω_0 — наибольшая частота в спектре решетки. Использовались безразмерные единицы, нормировка $\int_0^\infty \sigma(v)dv = 1$, а также значения параметров $\varepsilon = 2 \text{Im}(\omega/\omega_0)^2 = 0.05$,

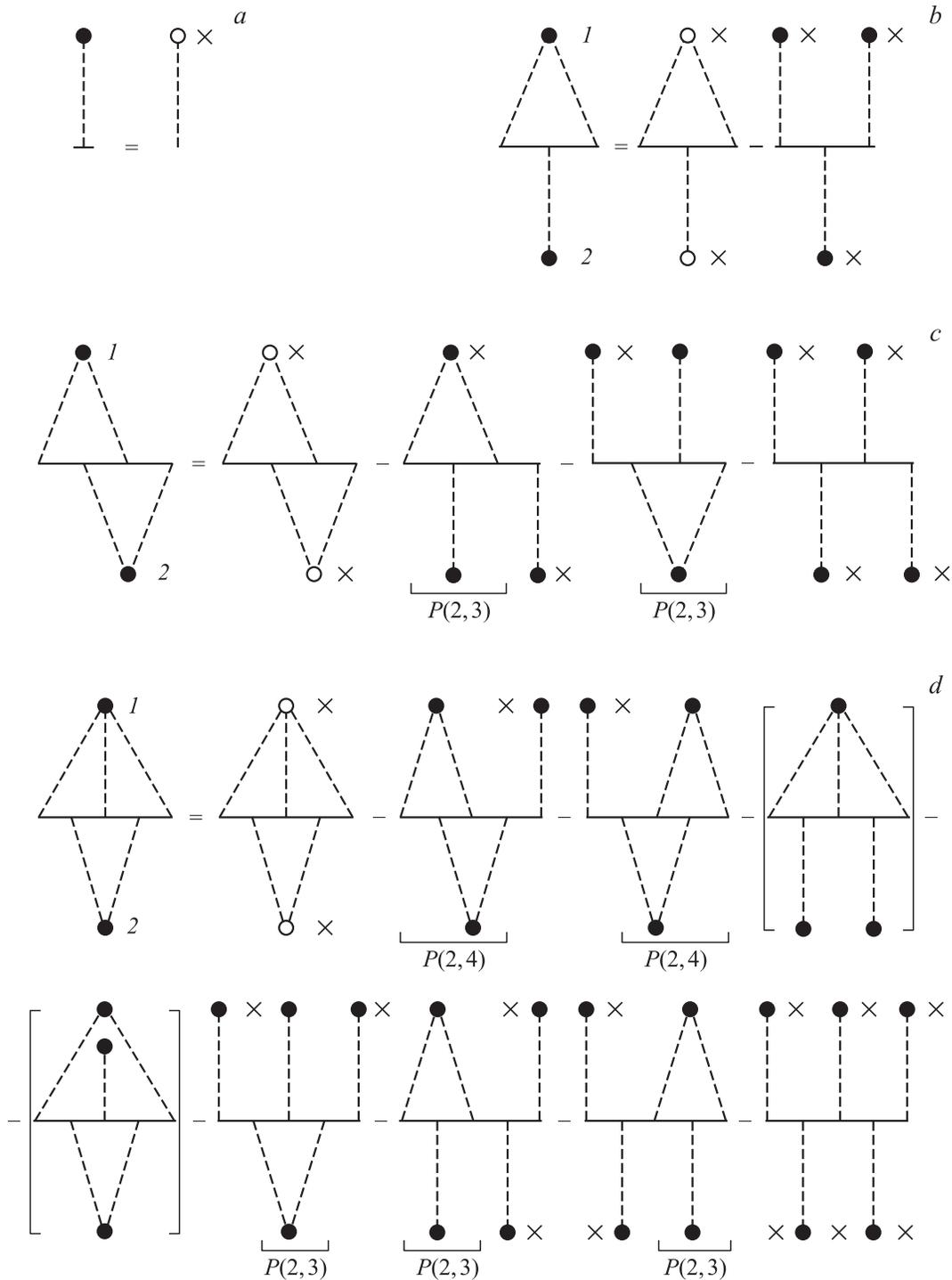


Рис. 3. Диаграммы, иллюстрирующие процедуру расчета поправок многократного заполнения в случае рассеяния возбуждений на кластере из двух ячеек (1, 2). Сплошные линии — линии распространения $f(12)$ и $f(21)$, штриховые — линии взаимодействия Δ . Темные и светлые кружки обозначают соответственно диаграммы, учитывающие и не учитывающие поправки.

$(m + \Delta m)/m = 1/3$, $x = 0.5$ ($n = 6$) (рис. 1). Были также рассчитаны в безразмерных единицах мнимые части функций Грина (6) $\sigma(\lambda, \nu)$ для значений волнового вектора $\lambda \equiv 2ya = 0.1$ и 0.9 соответственно. Остальные параметры имели значения $\varepsilon = 0.02$, $(m + \Delta m)/m = 1/3$, $x = 0.3$ ($n = 10$) (рис. 2). Рассчитанные зависимости

находятся в хорошем согласии с результатами компьютерного эксперимента Дина для неупорядоченной линейной цепочки из 8000 атомов [7].

В предшествующей работе [16] расчеты были произведены не для оптимальных значений числа ячеек в кластере n .

5. ПМЗ возникают в теории при снятии ограничений в суммах по решетке и описываются полиномами по степеням x вида $P(n, q)$, где n — число ячеек в кластере, q — число линий взаимодействия в диаграмме. Если ПМЗ не учитывать должным образом, то можно получить нефизические результаты. Рассмотрим простейший пример, когда под знаком суммы \sum_{ij} содержится коррелятор $\langle \eta(i)\eta(j) \rangle$. При проведении суммирования надо различать случаи, когда $i \neq j$ и когда $i = j$. В первом случае коррелятор равен x^2 , а во втором — x . Эти ограничения можно учесть автоматически, если представить коррелятор в виде

$$\begin{aligned} \langle \eta(i)\eta(j) \rangle &= \langle \eta(i)\eta(j) \rangle \delta_{ij} + \langle \eta(i)\eta(j) \rangle (1 - \delta_{ij}) \\ &= x \delta_{ij} + x^2 (1 - \delta_{ij}) = x(1 - x) \delta_{ij} + x^2. \end{aligned}$$

Полином $P(1, 2) = x(1 - x)$ описывает ПМЗ для диаграммы двукратного рассеяния на одной примеси. Для диаграммы q -кратного рассеяния на одной примеси этот полином имеет вид $P(1, q) = x(1 - x)^{q-1}$. В общем случае вид полиномов $P(n, q)$ зависит от того, какое приближение используется (АТА или СРА) и какое число ячеек n в кластере учитывается. Правило получения полиномов ПМЗ основывается на уравнении (11), записанном в несколько иной форме. Разрешив уравнение (11) относительно $\bar{\tau}(\bar{f}_\phi) \equiv \bar{\tau}_\phi$ и производя разложение по $\bar{\sigma}(\bar{f}_\phi) = n\bar{\Sigma}$, получим

$$\bar{\sigma}(\bar{f}_\phi) = \bar{\tau}(\bar{f}_\phi) - \bar{\sigma}(\bar{f}_\phi) \bar{f}_\phi \bar{\sigma}(\bar{f}_\phi) - \dots \quad (19)$$

Этот ряд можно трактовать следующим образом. Выражение для неприводимой „обросшей“ (т.е. учитывающей ПМЗ) диаграммы $\bar{\sigma}(\bar{f}_\phi)$ получается из „голой“ собственно энергетической части $\bar{\tau}(\bar{f}_\phi)$ вычитанием диаграмм, полученных всевозможными расщеплениями линий взаимодействия. При этом неприводимые фрагменты вычитаемых диаграмм (множители $\bar{\sigma}(\bar{f}_\phi)$ во втором и последующих членах в правой части (19)) не должны содержать число вершин m , большее того, которое диктуется принятым приближением. Например, в приближении АТА- n должно быть $m \leq n$. Выше были приведены выражения для полиномов ПМЗ в случае АТА-1. В случае АТА-2 они имеют на первый взгляд менее закономерный вид. Однако они также получают методом расщепления. Проиллюстрируем это на примере диаграмм, составляющих выражение (14). Первый член в (14) описывает однократное рассеяние на примеси (диаграмма a на рис. 3) и не содержит ПМЗ. Соответствующий полином $P(1, 1) = x$. Второй член в (14) представляет рассеяние на двух примесях в низшем порядке Δ^3 (диаграмма b на рис. 3). Расщепление линий взаимодействия приводит к поправкам ($-x^3$). В итоге получим $P(2, 3) = x^2 - x^3 = x^2(1 - x)$. Третий член описывает рассеяние на двух примесях в порядке Δ^4 (диаграмма c на рис. 3). Отщепление линий взаимодействия от „необросшей“ диаграммы на первом этапе приводит к

двум приводимым диаграммам рассеяния на трех примесях с весами x и $P(2, 3)$. Дальнейшее отщепление приводит к приводимой диаграмме рассеяния на четырех примесях с весом x^4 . В итоге получим $P(2, 4) = x^2 - 2xP(2, 3) - x^4 = x^2(1 - x)^2$. Четвертый член в (14) описывает рассеяние на двух примесях в порядке Δ^5 (диаграмма d на рис. 3). Процесс отщепления такой же, как и для предыдущих диаграмм. Он представлен на рис. 3, d . Диаграммы, заключенные в квадратные скобки, неприводимы и описывают рассеяние на трех примесях. Они должны быть отброшены, так как не соответствуют принятому приближению АТА-2. В результате получим $P(2, 5) = x^2 - 2xP(2, 4) - 3x^2P(2, 3) - x^5 = x^2(1 - x)^2$. Отметим, что хотя диаграммы c и d различные, полиномы ПМЗ у них одинаковые. Процесс получения ПМЗ для пятого члена в (14) происходит таким же образом, как и для предшествующих. Однако он сопровождается громоздкими вычислениями, и мы его здесь не излагаем.

Мы убедились, что ПМЗ, полученные методом АТАМ-2 (уравнения (13), (14)), совпадают с теми, которые получаются методом отщепления линий взаимодействия. Аналогичный вывод справедлив для произвольного n . ПМЗ в случае СРАМ- n получаются заменой $\bar{f}_\phi \rightarrow \bar{F}_{\phi'}$ в уравнении (11) и его последующими итерациями.

Итак, в данной работе определен размер корреляционной длины L , т.е. размер, на котором рассеяние возбуждений в твердом растворе происходит когерентным образом. Размер L зависит от доли примесных атомов в твердом растворе и от размерности решетки. Знание L чрезвычайно существенно для физического анализа и для численных расчетов. В них достаточно учитывать число ячеек решетки, помещающееся в корреляционный объем L^d . Это позволяет при расчетах на порядки сократить число учитываемых в решетке ячеек.

В работе также проверена применимость метода последовательного отщепления линий взаимодействия для получения ПМЗ в случае диаграмм рассеяния на многопримесных кластерах (АТАМ- n , СРАМ- n ; $n > 1$). Ранее метод применялся в случае рассеяния на одной примеси. Данный метод полезен при анализе и оценке вкладов отдельных диаграмм рассеяния.

Список литературы

- [1] R.J. Elliott, J.A. Krumhansl, P.L. Leath. Rev. Mod. Phys. **46**, 465 (1974).
- [2] J.D. Dow, W.E. Packard, H.A. Blackstead, D.W. Jenkins. Phonons in semiconductor alloys. In series: Dynamical properties of solids / Eds G.K. Horton, A.A. Maradudin. Elsevier Science B.V. (1995).
- [3] D.W. Teylor. In: Optical properties of mixed crystals / Eds R.J. Elliott, I.P. Ipatova. Elsevier Science Publishers B.V. (1988).
- [4] И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур. Введение в теорию неупорядоченных систем. Наука, М. (1982). 358 с.

- [5] A. Gonis. Green functions of ordered and disordered systems. In series: Studies in mathematical physics / Eds E. van Groesen, E.M. De-Jager. North-Holland, Amsterdam (1992). 685 p.
- [6] F. Yonezawa. Progr. Theor. Phys. **40**, 734 (1968).
- [7] P. Dean. Proc. Roy. Soc. A **260**, 1301, 263 (1961).
- [8] R.N. Aiyer, R.J. Elliott, J.A. Krumhansl, P.L. Leath. Phys. Rev. **181**, 1006 (1969).
- [9] B.G. Nickel, J.A. Krumhansl. Phys. Rev. B **4**, 4354 (1971).
- [10] W.H. Butler, B.G. Nickel. Phys. Rev. Lett. **30**, 373 (1973).
- [11] R.L. Mills, P. Patanavararaks. Phys. Rev. B **18**, 5291 (1978).
- [12] T. Kaplan, P.L. Leath, L.J. Gray, H.W. Diehl. Phys. Rev. B **21**, 4230 (1980).
- [13] M. Jarrell, H.R. Krishnamurthy. Phys. Rev. B **63**, 125 102 (2001).
- [14] В.С. Виноградов. Краткие сообщ. по физике 2, 11 (2002).
- [15] V.S. Vinogradov. Phys. Stat. Sol. (c) **1**, 2920 (2004).
- [16] В.С. Виноградов. ФТТ **47**, 1861 (2005).
- [17] А.М. Косевич. Основы механики кристаллической решетки. Наука, М. (1972). С. 148.