

На правах рукопису

МИГАЛЬ Василь Михайлович

**РОЗРАХУНОК ФОНОННОГО І ЕЛЕКТРОННОГО
СПЕКТРІВ ТА ПРОСТОРОВИХ КОРЕЛЯЦІЙНИХ
ФУНКЦІЙ НЕВПОРЯДКОВАНИХ СИСТЕМ
ЗІ СТРУКТУРОЮ РІДИННОГО ТИПУ**

01.04.02 — теоретична фізика

Автореферат

дисертації на здобуття вченого ступеня
кандидата фізико-математичних наук



Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики Львівського державного університету ім. Івана Франка

- Науковий керівник — доктор фізико-математичних наук,
професор ВАКАРЧУК І.О.
- Офіційні опоненти — доктор фізико-математичних наук,
професор ГУРСЬКИЙ З.О.
- доктор фізико-математичних наук,
професор ЛУКІЯНЕЦЬ Б.А.
- Ведуча організація — Інститут теоретичної фізики АН України
ім. М.М.Боголюбова, м. Київ

Захист відбудеться "20" жовтня 1993 р. в 15¹⁵ годині на засіданні спеціалізованої ради Д 068.26.05 по присудженню вченого ступеня доктора фізико-математичних наук при Львівському державному університеті ім. І.Франка (290005, м. Львів, вул. Ломоносова, 8а).

З дисертацією можна познайомитися в науковій бібліотеці Львівського державного університету ім. І.Франка (м. Львів, вул. Драгоманова, 5).

Автореферат розісланий "20" вересня 1993 р.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Проблема опису фізичних властивостей структурно неупорядкованих систем, таких як рідкі і аморфні метали, металеве скло, досі залишається однією з актуальних і до кінця не розв'язаних задач теорії конденсованого стану. Вивчення динаміки і електронної структури кристалічних твердих тіл ґрунтується на концепціях і методах, які використовують трансляційну інваріантність. Для неупорядкованих систем такої загальної теорії не існує. Суттєвою особливістю аморфних тіл, як і рідин, є відсутність далекого порядку в розміщенні атомів. Ще більше утруднює побудову теорії аморфного стану принципова відмінність його від рідини — структурна нерівноважність. Ця обставина вимагає введення конфігураційного усереднення по всіх можливих реалізаціях випадково розміщених атомів — своєрідного "усереднення по зраках", що рівнозначне вибору безлічі випадкових змінних, які характеризують тип неупорядкованості, і функції розподілу, яка задає імовірність тієї чи іншої конфігурації. Взаємодія фононних та електронних збуджень суттєво впливає на динамічні процеси в кристалах. Результатом може бути поява м'якої моди в фононному спектрі (конівська аномалія), виникнення щільни в електронному спектрі при переході в надпровідний стан внаслідок ефективного притягання між електронами через обмін віртуальними фононами. Тому зрозумілий інтерес до вивчення електрон-фононної взаємодії в неупорядкованих системах.

Мета роботи — дослідження фононних і електронних не взаємодіючих та взаємодіючих збуджень в структурно неупорядкованих системах, а також розрахунок просторових кореляційних функцій цих систем, зокрема рідких і аморфних металів, надливного He^4 .

Наукова новизна. В дисертаційній роботі з допомогою методу функцій Гріна вперше досліджені фононні та електронні збудження в структурно неупорядкованих системах зі структурою рідинного типу з врахуванням електрон-фононної взаємодії.

Вперше в самоузгодженому гармонічному наближенні для спектру фононних збуджень в багатокomпонентних аморфних тілах отримано рівняння, яке враховує наявність твердого кору в потенціалі міжатомної взаємодії, багаточастинкові кореляції, а також температурну залежність фононних частот і їх загасання на флуктуаціях структури. В двохкомпонентному випадку знайдені явні вирази для частот акустичних і оптичних мод, поздовжньої і поперечної швидкостей звуку в квазікристалічному наближенні. Показано, що довгохвильові фонони є добре визначеними збудженнями. Виконані числові розрахунки залежності "частота-хвильовий вектор" для аморфних металів і двохкомпонентного металевого скла, які відтворюють характерну поведінку фононних частот.

Вперше одержано рівняння для енергетичного спектру одностинкових електронних збуджень і їх загасання на неоднорідностях структури, яке враховує багаточастинкові кореляції іонної підсистеми. Шляхом часткового підсумовування ряду теорії збурень здобуто інтегральне рівняння для масового оператора. Записано вирази для густини станів і функції розподілу одностинкових електронних збуджень. Досліджено вплив структурної неупорядкованості на функцію розподілу при нульовій температурі.

В роботі вперше вивчені взаємодіючі фононні та електронні збудження в однокомпонентних аморфних металах. Розраховано конфігураційно усереднені функції Гріна фононної та електронної підсистем з врахуванням електрон-фононної взаємодії. Проведено аналіз впливу неупорядкованості на коніські аномалії в фононному спектрі. Отримано рівняння для щільності в електронному спектрі аморфного металу при переході в надпровідний стан.

Вперше одержано нелінійне інтегральне рівняння для структурного фактора рідких і аморфних металів та рідкого He^4 в середньосферичному наближенні. Проведені числові розрахунки структурного фактора для ряду рідких і аморфних металів, які використані для обчислення фононних частот аморфних металів. На основі розрахованого структурного фактора рідкого He^4 зроблена оцінка кількості бозе-конденсату.

На захист виносяться наступні положення:

1. Розрахунок спектру і загасання фононних збуджень в багатокомпонентних аморфних тілах в самоузгодженому гармонічному наближенні. Явні вирази для частот акустичних і оптичних мод в двохкомпонентному випадку в квазікристалічному наближенні. Дослідження загасання в довгохвильовій ділянці спектру. Числові розрахунки залежності "частота-хвильовий вектор" для ряду аморфних металів і двохкомпонентного металевго скла.

2. Вирази для спектру, загасання і густини станів електронних збуджень зони провідності аморфного металу. Дослідження впливу структурної неупорядкованості на числа заповнення одноелектронних станів.

3. Розрахунок спектру і загасання фононних та електронних збуджень аморфного металу з врахуванням електрон-фононної взаємодії. Рівняння для щільності в електронному спектрі аморфного металу при переході в надпровідний стан.

4. Розрахунок просторових кореляційних функцій рідких металів і надплинної He^4 в середньосферичному наближенні. Інтегральне рівняння для структурного фактора та його числовий розв'язок.

Практична цінність. Проведені в роботі теоретичні дослідження структурно неупорядкованих систем сприяють розширенню загальних уявлень про їх фізичні властивості. Отримані в дисертації результати можуть служити для інтерпретації експериментально спостережуваних властивостей аморфних і рідких металів, металевго скла, квантових рідин. Зокрема, аналітичні вирази для фононних частот в багатокомпонентних аморфних тілах можуть служити для інтерпретації експериментів по непружному розсіянню нейтронів в багатокомпонентному металевому склі; рівняння для щільності в спектрі електронних збуджень зони провідності аморфного металу можна використовувати для розрахунку температури надпровідного переходу в простих аморфних металах.

Апробація роботи. Основні результати дисертаційної роботи були представлені і обговорювалися на наступних конференціях і семінарах: IV Всесоюзна конференція по будові і властивостях металічних і шлакових сплавів (Свердловськ, 1986 р.), I конференція молодих вчених фізичного факультету Львівського університету (Львів, 1986 р.), Всесоюзна конференція «Современные проблемы статистической физики» (Львів, 1987 р.), III конференція

молодих вчених фізичного факультету Львівського університету (Львів, 1988 р.), III Всесоюзна конференція по фізиці і технології тонких напівпровідникових плівок (Івано-Франківськ, 1990 р.), I رایсько-польський симпозиум по фізиці сегнетоелектриків і споріднених матеріалів (Львів, 1990 р.), Українсько-французький симпозиум «Конденсована речовина: наука та індустрія» (Львів, 1993 р.), XI Українська школа-семинар «Спектроскопія молекул та кристалів» (Харків, 1993 р.), Ювілейна наукова конференція, присвячена 40-річчю фізичного факультету Львівського університету (Львів, 1993 р.), Міжнародна конференція «Фізика в Україні» (Київ, 1993 р.), наукові семінари кафедри теоретичної фізики Львівського університету.

Публікації. Основні результати дисертації опубліковані в 16 роботах, перелік яких приводиться в кінці автореферату.

Структура і об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається з вступу, трьох глав і заключення. Список цитованої літератури включає 141 найменувань. Загальний об'єм дисертації складає 106 сторінок тексту. В роботі міститься 20 малюнків і 1 таблиця.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі приведений короткий огляд сучасного стану теорії неупорядкованих систем. Обґрунтована актуальність теми, сформульована мета роботи. Описана структура дисертації, викладений короткий зміст кожного розділу. Перераховані основні положення, які виносяться на захист.

В першій главі методом функцій Гріна досліджуються невзаємодіючі фонони та електронні збудження в неупорядкованих системах.

Розглядається структурно неупорядкована система N атомів, яку складають S сортів атомів з N_a атомами сорту a в просторі розмірності d об'ємом V , з гамільтоніаном

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^d \sum_{a=1}^S \sum_{i=1}^{N_a} \frac{(P_{i,a}^{\alpha})^2}{2M_a} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{\alpha_1, \dots, \alpha_n \\ \alpha_1, \dots, \alpha_n}} \sum_{i_1=1}^{N_{a_1}} \dots \sum_{i_n=1}^{N_{a_n}} \Phi(R_{i_1, a_1}^{\alpha_1}, \dots, R_{i_n, a_n}^{\alpha_n}) U_{i_1, a_1}^{\alpha_1}, \dots, U_{i_n, a_n}^{\alpha_n},$$

де $P_{i,a}^{\alpha}$ - α -компонента імпульсу i -го атома сорту a , M_a - маса атома сорту a ,

$$\Phi(R_{i_1, a_1}^{\alpha_1}, \dots, R_{i_n, a_n}^{\alpha_n}) = \nabla_{i_1, a_1}^{\alpha_1}, \dots, \nabla_{i_n, a_n}^{\alpha_n} \Phi_N(\{\mathbf{R}\}) -$$

силові постійні; $\Phi_N(\{\mathbf{r}\})$ - потенціальна енергія (залежна від N координат атомів \mathbf{r} , представлених в вигляді $\mathbf{r}_{i,a} = \mathbf{R}_{i,a} + \mathbf{U}_{i,a}$, $\mathbf{R}_{i,a}$ - фіксовані "рівноважні" положення, $\mathbf{U}_{i,a}$ - зміщення з положення рівноваги) розкладена в безмежний ряд по зміщеннях $\mathbf{U}_{i,a}$. Причому рівноважні положення атомів не утворюють правильної кристалічної структури. Насправді ці фіксовані положення атомів в аморфному тілі є квазірівноважними. Однак великі часи релаксації до істинно рівноважних положень дозволяють розглядати аморфні тіла як конфігураційно стійкі утворення, а самі величини $\mathbf{R}_{i,a}$ як рівноважні.

Коливні рухи атомів в неупорядкованих системах досліджувалися з допомогою конфігураційно усереднених функцій Гріна

$$\overline{\langle\langle U_{q,a}^\alpha | U_{-q',b}^\beta \rangle\rangle}_\omega, \quad U_{q,a}^\alpha = \sqrt{\frac{M_a}{N_a}} \sum_{j=1}^{N_a} U_{j,a}^\alpha e^{-iqR_{j,a}},$$

уявні частини яких пропорційні в борнівському наближенні до експериментально вимірюваного двічі диференційного перетину однофононного когерентного розсіяння нейтронів в речовині, піки якого визначають залежність "енергія-імпульс". $\overline{(\dots)}$ — означає конфігураційне усереднення з деякою нормованою функцією розподілу, яка визначається технологією виготовлення аморфного тіла і вважається тут заданою величиною. Використовуючи процедуру розчеплення конфігураційних середніх, в самоузгодженому гармонічному наближенні досліджено енергетичний спектр фононних збуджень в багатокомпонентних аморфних тілах. При цьому враховано наявність твердої "серцевини" в потенціалі міжатомної взаємодії. Рівняння для спектру фононних збуджень має вигляд:

$$\det \left\| \hat{\Gamma} \omega^2 - \hat{D}^{\alpha\alpha}(q, \omega) \right\| = 0, \quad (1)$$

$\hat{D}^{\alpha\alpha}$ — позначає $\alpha\alpha$ -блок динамічної матриці

$$\hat{D}(q, \omega) = \hat{D}_0(q) + \hat{\Sigma}(q, \omega), \quad (2)$$

де

$$\hat{\Sigma}(q, \omega) = \hat{\Sigma}_1(q, \omega) + \hat{\Sigma}_2(q, \omega) + \dots,$$

$$\hat{\Sigma}_n(q, \omega) = \frac{1}{V^n} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n (\neq \mathbf{q})} \overline{\hat{Q}_n(q, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) \hat{G}_0(\mathbf{k}_n, \omega) \hat{Q}_1(\mathbf{k}_n, \mathbf{q})},$$

Матриці \hat{Q}_n задовільняють рекурентному співвідношенню:

$$\hat{Q}_{n+1}(q, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{n+1}) = \hat{Q}_n(q, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) \hat{G}_0(\mathbf{k}_n, \omega) \hat{Q}_1(\mathbf{k}_n, \mathbf{k}_{n+1}) - \overline{\hat{Q}_n(q, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) \hat{G}_0(\mathbf{k}_n, \omega) \hat{Q}_1(\mathbf{k}_n, \mathbf{k}_{n+1})}, \quad (3)$$

де введені позначення

$$\hat{G}_0(\mathbf{k}_n, \omega) = (\hat{\Gamma} \omega^2 - \hat{D}_0(\mathbf{k}))^{-1}, \quad \hat{Q}_1(\mathbf{k}, \omega) \equiv \hat{Q}(\mathbf{k}, \omega),$$

$$\left(\hat{D}_0(\mathbf{q}) \right)_{ab}^{\alpha\beta} = \sqrt{\frac{1}{M_a M_b}} \left\{ \frac{\sqrt{N_a N_b}}{V} \bar{\Phi}_{ab}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) - \delta_{ab} \sum_{c=1}^S \frac{N_c}{V} \bar{\Phi}_{ac}^{\alpha\beta}(0) \right\},$$

$$(\hat{Q}(\mathbf{q}, \mathbf{k}))_{ab}^{\alpha\beta} = \sqrt{\frac{1}{M_a M_b}} \left\{ \sqrt{\frac{N_b}{V}} \bar{\Phi}_{ab}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^a - \delta_{ab} \sum_{c=1}^S \sqrt{\frac{N_c}{V}} \bar{\Phi}_{ac}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \rho_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^c \right\},$$

$$(\hat{\rho}_{\mathbf{q}})_{ab}^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ab} \sqrt{\frac{V}{N_a}} \rho_{\mathbf{q}}^a, \quad \rho_{\mathbf{q}}^a = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{j=1}^{N_a} e^{-i\mathbf{qR}_{j,a}} - \sqrt{N_a} \delta(\mathbf{q}) - \text{фур'є-}$$

зображення флуктуацій густини атомів сорту a , $\delta(\mathbf{q})$ - символ Кронекера,

$$\bar{\Phi}_{ab}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = q_\alpha q_\beta I_{ab}^{(1)}(\mathbf{q}) + \delta_{\alpha\beta} I_{ab}^{(2)}(\mathbf{q}),$$

$$I_{ab}^{(1)}(\mathbf{q}) = \frac{(2\pi)^{d/2}}{q^2} \int_0^\infty dR F_{ab}(R) R^{d-2} \left(\bar{\Phi}'_{ab}(R) - R \bar{\Phi}''_{ab}(R) \right) \left(\left(\frac{1}{qR} \right)^{d/2-1} J_{d/2-1}(qR) - d \left(\frac{1}{qR} \right)^{d/2} J_{d/2}(qR) \right),$$

$$I_{ab}^{(2)}(\mathbf{q}) = (2\pi)^{d/2} \int_0^\infty dR F_{ab}(R) R^{d-2} \left(\bar{\Phi}'_{ab}(R) - R \bar{\Phi}''_{ab}(R) \right) \left(\frac{1}{qR} \right)^{d/2} J_{d/2}(qR) - \bar{\Phi}'_{ac}(R) \left(\frac{1}{qR} \right)^{d/2-1} J_{d/2-1}(qR),$$

$$\bar{\Phi}'_{ab}(R) = \frac{d}{dR} \bar{\Phi}_{ab}(R), \quad \bar{\Phi}''_{ab}(R) = \frac{d^2}{dR^2} \bar{\Phi}_{ab}(R),$$

$$\bar{\Phi}_{ab}(R) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \Phi_{ab}(\mathbf{k}) e^{-W_a(\mathbf{k}) - W_b(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{kR}}, \quad W_a(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \langle (\mathbf{kU}_{i,a})^2 \rangle -$$

фактор Дебая-Уоллера, який після конфігураційного усереднення однаковий для всіх атомів сорту a , $\Phi_{ab}(\mathbf{k})$ - фур'є-зображення потенціалу міжатомної взаємодії $\Phi_{ab}(R)$, $J_\nu(qR)$ - функції Бесселя 1-го роду. Елементи матриці $\hat{\Sigma}_n(\mathbf{q}, \omega)$ пропорційні конфігураційним середнім

$$\overline{\rho_{\mathbf{k}_1}^{\alpha_1} \dots \rho_{\mathbf{k}_l}^{\alpha_l}} = \left(N_{a_1} \dots N_{a_l} \right)^{l-2} S_{a_1, \dots, a_l}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_l) \delta(\mathbf{k}_1 + \dots + \mathbf{k}_l),$$

де $S_{a_1, \dots, a_l}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_l)$ - l -частинкові парціальні структурні фактори системи.

В випадку ізотропної системи частота ω є функцією модуля хвильового вектора \mathbf{q} , який можна вибрати в напрямку осі $\alpha = 1$, і динамічна матриця (2) набуває блочно-діагонального виду. Тому детермінант в (1) розпадається на добуток d детермінантів, і для спектру маємо d рівнянь. При $\alpha = 1$ рівняння (1) дає спектр поздовжніх коливань, при $\alpha = 2, 3, \dots, d$ рівняння співпадають і визначають спектр $(d-1)$ -кратно вироджених поперечних коливань. Нульове наближення для динамічної матриці співпадає з квазікристалічним.

Для двохкомпонентної системи ($S=2$) розв'язком рівняння (1) з динамічною матрицею в нульовому наближенні є акустичні і оптичні моди:

$$(\omega_{+,-}^{\alpha}(q))^2 = \frac{1}{2}(D_{11}^{\alpha\alpha}(q) + D_{22}^{\alpha\alpha}(q)) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(D_{11}^{\alpha\alpha}(q) - D_{22}^{\alpha\alpha}(q))^2 - 4D_{12}^{\alpha\alpha}(q)D_{21}^{\alpha\alpha}(q)},$$

знак "+" відповідає оптичній моді, "-" — акустичній.

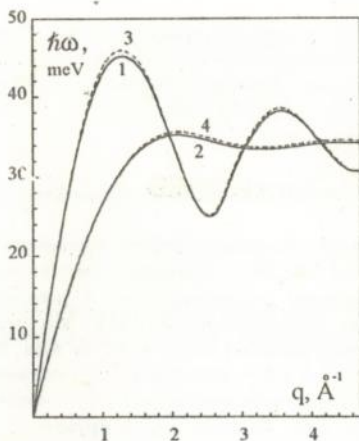
В виразі для динамічної матриці (2) $\hat{\Sigma}(q, \omega)$ має зміст масового оператора і відповідає за розсіяння фонових на флуктуаціях густини. Загасання початкової ділянки фонових спектру $q \rightarrow 0$ в однокомпонентному випадку має вигляд:

$$\gamma_{\alpha=1} = \frac{V}{N} \frac{c_l^{d-1} S(0)}{2^{d+1} \pi^{d/2-1} d(d+2) \Gamma(d/2) c_l^{d+2}} \left\{ (d-1)(c_l^4 + c_t^4) + (d^2 + 3d - 4)c_l^2 c_t^2 + \left(\frac{c_l}{c_t} \right)^{d+2} \left\{ (d^2 + 5d + 9)c_l^4 + (d^2 - 1)c_t^4 - 2(d^2 + 2d - 3)c_l^2 c_t^2 \right\} \right\} q^{d+1},$$

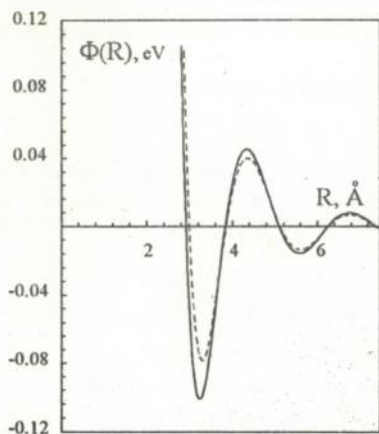
$$\gamma_{\alpha=2, \dots, d} = \frac{V}{N} \frac{S'(0)}{2^{d+1} \pi^{d/2-1} d(d+2) \Gamma(d/2) c_l^3} \left\{ (d+1)c_l^4 + (d^2 + 6d + 7)c_l^4 - 2(d+3)c_l^2 c_t^2 + \left(\frac{c_l}{c_t} \right)^{d+2} \left\{ c_l^4 + c_t^4 + (d+4)c_l^2 c_t^2 \right\} \right\} q^{d+1},$$

d — розмірність простору, c_l і c_t — відповідно поздовжня і поперечна швидкості звуку в квазікристалічному наближенні. В довгохвильовій ділянці спектру акустичні фони в аморфних тілах є добре визначеними збудженнями, оскільки $\chi(q)/\omega(q) \rightarrow 0$ при $q \rightarrow 0$.

Проведено числовий розрахунок залежності "частота-хвильовий вектор" в квазікристалічному наближенні для ряду аморфних металів. Структура моделювалася рідиноподібною системою твердих кульок і вважалася незалежною від температури, тобто фіксованою. Перенормований факторами Дебая-Уоллера потенціал міжйонної взаємодії розраховувався методом псевдопотенціалу. На малюнку 1 представлені результати розрахунку фонових мод для аморфного магнію. Суттєвою рисою поздовжніх коливань є наявність ротоноподібного мінімуму в області хвильових векторів, які відповідають першому максимуму структурного фактора, що узгоджується з експериментальними вимірюваннями, аналітичними розрахунками інших авторів і результатами комп'ютерного моделювання. Врахування ефектів ангармонізму приводить до підвищення енергії фонових мод при фіксованій структурі. На малюнку 2 зображений потенціал парної міжйонної взаємодії для аморфного магнію. Перенормований потенціал як функція міжйонної відстані є більш гладким, ніж вихідний потенціал, його глибина менша, а мінімум відповідає більшій відстані. Така поведінка перенормованого потенціалу підтверджується дослідженнями ангармонічних фонових в кристалах.



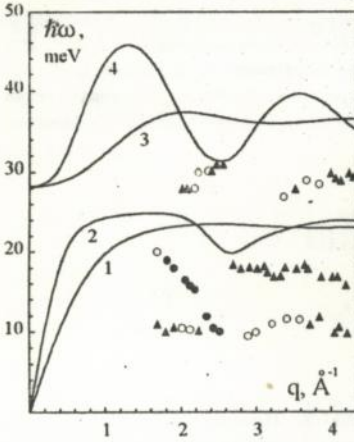
Мал. 1. Фононі частоти аморфного магнію. Криві 1 і 2 – поздовжня і поперечна вітки без врахування ефектів ангармонізму, 3 і 4 – врахування ефектів ангармонізму при температурі 200°C. Нульові коливання помітного вкладу не дають.



Мал.2. Потенціал міжіонної взаємодії аморфного магнію, розрахований з допомогою псевдопотенціалу [1], діелектрична функція взята з роботи: *Utsumi K., Ichimaru S. // Phys. Rev. -1982. -A26, № 1. -P. 603- 610.* Суцільна крива – без врахування ефектів ангармонізму, штрихи – при температурі 200°C.

Проводився також числовий розрахунок фононних частот в квазікристалічному наближенні для двохкомпонентного металевго скла без врахування впливу ангармонізму. Структура моделювалася двохкомпонентною системою твердих кульок. На малюнку 3 показані акустичні і оптичні фононі частоти для металевго скла $Mg_{70}Zn_{30}$. Кільця, чорні кружечки і трикутники — експериментальні значення, знайдені шляхом визначення енергії структурних особливостей динамічного структурного фактора $Mg_{70}Zn_{30}$, поміряного непружиним розсіям нейтронів при температурі 6 К (Сак Ж.-Б., Рудин Х. // *Металлические стекла: Выпуск II: Атомная структура и динамика, электронная структура, магнитные свойства: Пер. с англ. / Под ред. Г. Бека, Г.-Й. Гюнтеродта. -М.: Мир, 1986. -С. 251- 301.* Порівняно-слабкі структурні особ-

ливості динамічного структурного фактора позначені трикутниками. Чорні кружечки відносяться до тої області, де спостерігається залежність положення максимуму від величини переданого імпульсу. Виміряні значення інтерпретуються як три різні вітки коливань.



Мал.3. Фононі частоти металевого скла $Mg_{70}Zn_{30}$. Потенціал міжіонної взаємодії розраховувався з допомогою псевдопотенціалу [1], діелектрична функція та ж, що і на мал. 2. Криві 1 і 2 – поперечна і поздовжня вітки акустичних мод, 3 і 4 – оптичних мод. Кільця, чорні кружечки і трикутники – експериментальні значення (пояснення в тексті).

В другій частині першої глави розглянуті електронні збудження в зоні провідності аморфного металу в наближенні майже вільних електронів. Одноелектронний гамільтоніан в представленні вторинного квантування на базисі плоских хвиль має вигляд:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} \frac{1}{\sqrt{N}} \rho_{\mathbf{k}} \tilde{v}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^+ a_{\mathbf{q}, \sigma},$$

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{N}{V} \tilde{v}(0) - \mu, \quad \rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} - \sqrt{N} \delta(\mathbf{k}), \quad \tilde{v}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} v(\mathbf{r}),$$

де \mathbf{r} — координати електрона, \mathbf{R}_j — положення випадково розміщених іонів, які тут вважаються фіксованими, μ — хімпотенціал, $a_{\mathbf{k}, \sigma}^+$, $a_{\mathbf{k}, \sigma}$ — оператори народження і знищення електронних збуджень з хвильовим вектором \mathbf{k} і спіном σ .

Отримано розв'язок для конфігураційно усередненої електронної функції Гріна

$$\overline{\langle\langle a_{\mathbf{k}, \sigma} | a_{\mathbf{k}', \sigma'}^+ \rangle\rangle_E} = \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}}{E - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}, E)}, \quad (4)$$

$$\Sigma(\mathbf{k}, E) = \Sigma(\mathbf{k}, E) + \Sigma(\mathbf{k}, E) + \dots,$$

$$\Sigma_n(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{V^n} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n (\neq \mathbf{k})} \overline{Q_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n) G_0(\mathbf{k}_n, E) Q_1(\mathbf{k}_n, \mathbf{k})}.$$

Величини Q_n зв'язані між собою рекурентним співвідношенням (3), де

$$G_0(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{E - \varepsilon(\mathbf{k})}, \quad Q_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = \sqrt{\frac{N}{V}} \tilde{v}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \rho_{\mathbf{k} - \mathbf{k}_1}.$$

Шляхом сумування безмежної частини ряду одержано відоме інтегральне рівняння для масового оператора:

$$\Sigma(\mathbf{k}, E) = \frac{N}{V^2} \sum_{\mathbf{q}(\neq \mathbf{k})} \frac{\tilde{v}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{v}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) S(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{E - \varepsilon(\mathbf{q}) - \Sigma(\mathbf{k}, E)}.$$

В наближенні квадратичних флуктуацій по густині

$$\Sigma(\mathbf{k}, E \pm i\varepsilon) = \Sigma'(\mathbf{k}, E) \mp i\varepsilon \Sigma''(\mathbf{k}, E), \quad \varepsilon \rightarrow 0,$$

$$\Sigma'(\mathbf{k}, E) = \frac{N}{V^2} \rho \sum_{\mathbf{q}(\neq \mathbf{k})} \frac{\tilde{v}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{v}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) S(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{E - \varepsilon(\mathbf{q})},$$

$$\Sigma''(\mathbf{k}, E) = \frac{N}{V^2} \pi \sum_{\mathbf{q}(\neq \mathbf{k})} \tilde{v}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{v}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) S(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|) \delta(E - \varepsilon(\mathbf{q})),$$

знак "+" — відповідає запізнюючій функції Гріна, "-" — випереджуючій. Коли $\Sigma'(\mathbf{k}, E) \gg \Sigma''(\mathbf{k}, E)$, тобто збудження є добре визначеними, має сенс поняття спектру електронних збуджень $E = \varepsilon(\mathbf{k}) + \Sigma'(\mathbf{k}, E)$, тоді як $\Sigma''(\mathbf{k}, E)$ — загасання електронних збуджень на неоднорідностях структури.

Для густини електронних станів і середніх чисел заповнення одночастинкових електронних станів маємо

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\infty dk k^2 \frac{\Sigma''(\mathbf{k}, E)}{(E - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma'(\mathbf{k}, E))^2 + (\Sigma''(\mathbf{k}, E))^2}, \quad (5)$$

$$n_k = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{\Sigma''(\mathbf{k}, E) \left(e^{E/T} + 1 \right)^{-1}}{(E - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma'(\mathbf{k}, E))^2 + (\Sigma''(\mathbf{k}, E))^2}.$$

Проведено оцінку n_k при $T=0$, тобто досліджено вплив структурної неупорядкованості, в наближенні $\Sigma'(k, E) \approx \Sigma'(k, \varepsilon(k))$, $\Sigma''(k, E) \approx \Sigma''(k, \varepsilon(k))$:

$$n_k = -\frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \left\{ \frac{\varepsilon(k) + \Sigma'(k, \varepsilon(k))}{\Sigma''(k, \varepsilon(k))} \right\}.$$

$\sum_k n_k = N_e$ — рівняння для хімпотенціалу, N_e — кількість електронів.

При $\Sigma''(k, \varepsilon(k)) = 0$ одержується сходишка Фермі, тоді як скінченний час життя електронних збуджень в результаті розсіювання на флуктуаціях структури приводить до її розмиття. Рівень Фермі $k = k_f$ при $\Sigma''(k, \varepsilon(k)) = 0$ визначається з умови $\varepsilon(k) + \Sigma'(k, \varepsilon(k)) = 0$.

В другій главі розглянуто вплив електрон-фононої взаємодії на енергетичний спектр фононних та електронних збуджень в однокомпонентних аморфних металах. Для опису електронної підсистеми використано наближення майже вільних електронів, випадкові координати іонів аморфного металу враховуються через фур'є-зображення флуктуацій густини. Коливна підсистема розглядається в гармонічному наближенні. Гамільтоніан розглядуваної системи складається з гамільтоніанів електронної, фононої підсистем та їх взаємодії. Як і в першій главі, використано наближення майже вільних електронів з тією різницею, що випадкові положення іонів \mathbf{r}_j вже не є фіксованими, а можуть здійснювати коливні рухи навколо деяких положень рівноваги $\mathbf{r}_j = \mathbf{R}_j + \mathbf{U}_j$, \mathbf{R}_j — рівноважні положення, \mathbf{U}_j — відхилення від положень рівноваги. Розкладаючи потенціальну енергію електрона в ряд по малих відхиленнях \mathbf{U}_j і обмежуючись лінійним членом, при переході до представлення вторинного квантування для електронних ступенів вільності одержимо

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{ph} + \hat{H}_{e-ph},$$

$$\hat{H}_e = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(k) a_{\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{N}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} \frac{1}{\sqrt{N}} \rho_{\mathbf{k}} \tilde{v}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{q}+\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{q}, \sigma},$$

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{j=1}^N \frac{(P_j^\alpha)^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i, j} \left\{ \nabla_i^\alpha \nabla_j^\beta \Phi(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|) \right\} (U_i^\alpha U_j^\beta - U_i^\beta U_j^\alpha),$$

$$\hat{H}_{e-ph} = \frac{i}{V} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{j=1}^N \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} k_\alpha U_j^\alpha \tilde{v}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} a_{\mathbf{q}+\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{\mathbf{q}, \sigma}.$$

Показано, що в наближенні, коли процеси розсіяння фононів на флуктуаціях густини і електронних збудженнях розглядаються незалежно, за рахунок електрон-фононої взаємодії перенормовуються тільки поздовжні частоти фононних збуджень в аморфних металах

$$(\Delta\omega_l)^2 = (\hat{\Sigma}'_{e-ph}(\mathbf{q}, \omega_l))^2;$$

для загасання поздовжних фононів маємо адитивну поправку

$$\Delta\gamma_l = \frac{1}{2\omega_l} (\hat{\Sigma}''_{e-ph}(\mathbf{q}, \omega_l))^2,$$

де

$$(\hat{\Sigma}'_{e-ph}(\mathbf{q}, \omega))^2 = \frac{1}{M V^2} \mathcal{P} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{v}(\mathbf{q}) \tilde{v}(-\mathbf{q}) q^2 \frac{n_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} - n_{\mathbf{k}}}{\hbar\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|)},$$

$$(\hat{\Sigma}''_{e-ph}(\mathbf{q}, \omega))^2 = \frac{\pi}{M V^2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \tilde{v}(\mathbf{q}) \tilde{v}(-\mathbf{q}) q^2 (n_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} - n_{\mathbf{k}}) \delta(\hbar\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|)).$$

За перенормування поперечних фононних частот і їх розсіяння в результаті взаємодії з електронами відповідають вищі порядки теорії збурень за сумами по хвильових векторах, які тут не розглядаються.

В кристалічних металах, особливо квазіодномірних, за рахунок електрон-фононої взаємодії можуть мати місце конівецькі аномалії в фононному спектрі, обумовлені існуванням ферміївської сходинок в розподілі електронів за імпульсами. В неупорядкованих металах вже при нульовій температурі сходінка розвивається внаслідок скінченного часу життя електронних збуджень, тому конівецькі аномалії, якщо вони і проявляються, то значно слабше.

Отримано розв'язок для конфігураційно усередненої електронної функції Гріна з врахуванням електрон-фононої взаємодії в наближенні, коли процеси розсіяння електронних збуджень на фононах і флуктуаціях густини розглядаються незалежно

$$\langle\langle a_{\mathbf{k}, \sigma} | a_{\mathbf{k}', \sigma}^+ \rangle\rangle_E = \frac{\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}}{E - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_e(\mathbf{k}, E) - \Sigma_{e-ph}(\mathbf{k}, E)},$$

$$\Sigma_{e-ph}(\mathbf{k}, E) = \frac{\hbar^2}{2M V^2} \sum_{\mathbf{q}} a^2 \tilde{v}(\mathbf{q}) \tilde{v}(-\mathbf{q}) \frac{1}{\hbar\omega_l(\mathbf{q})} \times$$

$$\times \left\{ \frac{N_{\mathbf{q}} + 1 - n_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|}}{E - \varepsilon(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|) - \hbar\omega_l(\mathbf{q})} + \frac{n_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|} + N_{\mathbf{q}}}{E - \varepsilon(|\mathbf{k}-\mathbf{q}|) + \hbar\omega_l(\mathbf{q})} \right\},$$

де введені позначення

$$N_q = \frac{1}{e^{\hbar\omega_l(q)/T} - 1},$$

$\omega(q)$ – квазікристалічне наближення для поздовжньої фоновної вітки коливань, $\hat{\Sigma}_e(\mathbf{k}, \omega) = \hat{\Sigma}_l(\mathbf{k}, \omega)$ в (4). Густина станів отримується з виразу (5).

Врахування аномальних середніх при спарюванні електронних операторів привело до появи щілини в спектрі електронних збуджень при переході аморфного металу в надпровідний стан

$$\Omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{E_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^+ \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^-}, \quad E_{\mathbf{k}} = \varepsilon(\mathbf{k}) + \Sigma(\mathbf{k}), \quad \Sigma(\mathbf{k}) \equiv \Sigma(\mathbf{k}, 0) \approx \Sigma(\mathbf{k}, E) \approx \Sigma(\mathbf{k}, -E),$$

$$\Sigma(\mathbf{k}, E) = \Sigma_e(\mathbf{k}, E) + \Sigma_{e-ph}(\mathbf{k}, E),$$

$$\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^+ = \Delta_{\sigma}(\mathbf{k}, \Omega_{\mathbf{k}}), \quad \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^- = \Delta_{\sigma}(\mathbf{k}, -\Omega_{\mathbf{k}}),$$

$$\Delta_{\sigma}(\mathbf{k}, E) = \frac{\hbar^2 N}{2M V^2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{q^2 \tilde{v}(\mathbf{q}) \tilde{v}(-\mathbf{q}) \langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma} a_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma} \rangle}{\hbar\omega_l(q)} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{E - \varepsilon(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|) - \hbar\omega_l(q)} - \frac{1}{E - \varepsilon(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|) + \hbar\omega_l(q)} \right\}.$$

Величина $\Sigma(\mathbf{k}, E)$ має зміст масового оператора, $\Delta_{\sigma}(\mathbf{k}, E)$ визначає щілину в спектрі електронних збуджень, яка ($\Delta_{\mathbf{k},\sigma}^+ \approx \Delta_{\mathbf{k},\sigma}^- = \Delta_{\mathbf{k}}(-1)^{\sigma-1/2}$) знаходиться з рівняння

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 N}{2M V^2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{q^2 \tilde{v}(\mathbf{q}) \tilde{v}(-\mathbf{q})}{\Omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}} \operatorname{th} \left(\frac{\Omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{2T} \right) \frac{\Delta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{(\Omega_{\mathbf{k}} - \varepsilon(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|))^2 - \hbar^2 \omega_l^2(q)}. \quad (6)$$

Рівняння (6) по формі співпадає з рівнянням для кристалу. Відмітимо відмінності, які виникають внаслідок структурної неупорядкованості. Додатковий вклад в масовий оператор $\Sigma(\mathbf{k}, E)$ дають процеси розсіяння електронів на флуктуаціях структури $\Sigma_e(\mathbf{k}, E)$, що приводить до перенормування електронного спектру нормального металу. Перенормовуються також фоновні частоти $\omega_l(q)$. Це дозволяє досліджувати вплив неупорядкованості на поведінку щілини в електронному спектрі аморфного металу.

В третій главі застосоване середньосферичне наближення для розрахунку просторових кореляційних функцій рідких металів і надплинного He⁴. Якщо структуру аморфних металів розглядати як "заморожену" рідину, то такий підхід можна використати і для оцінки структурних функцій аморфних металів.

Отримано нелінійне інтегральне рівняння для структурного фактора рідких і аморфних ("заморожених") металів

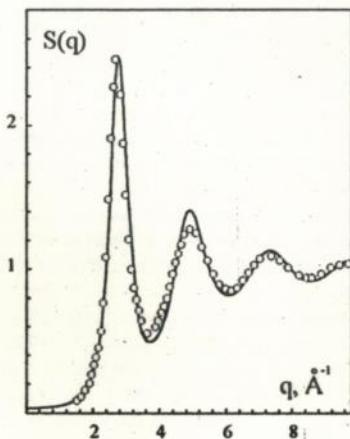
$$\frac{1}{S(q)} = f(q) + \frac{1}{\pi q} \int_0^{\infty} dk k \frac{(S(k)-1)^2}{S(k)} \left(\frac{\sin((q-k)a)}{q-k} - \frac{\sin((q+k)a)}{q+k} \right), \quad (7)$$

де

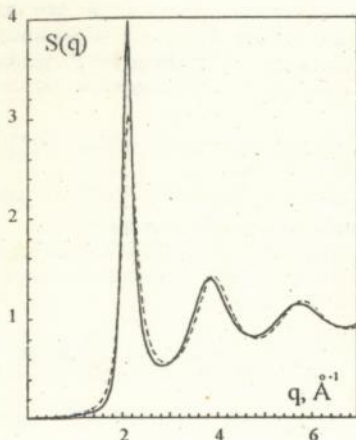
$$f(q) = 1 + \rho \left[\frac{\Phi(q)}{k_b T} + \frac{4\pi}{q} \left(\frac{\sin(qa)}{q^2} - \frac{a \cos(qa)}{q} - \frac{1}{k_b T} \int_0^a dR \Phi(R) R \sin(qR) \right) \right], \quad (8)$$

$\Phi(q)$ – фур'є-зображення потенціалу міжюїної взаємодії, $\rho = N/V$ – густина, a – діаметр атома.

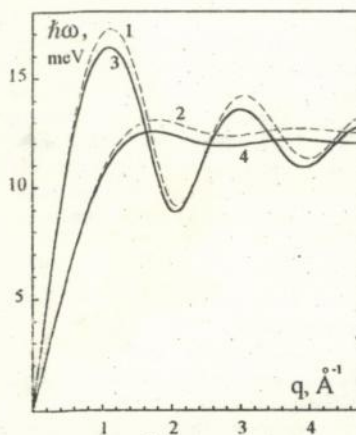
Здійснено числовий розв'язок нелінійного інтегрального рівняння (7), (8). Потенціал міжюїної взаємодії розраховувався методом псевдопотенціалу. Використовувалися модельні псевдопотенціали Ашкрофта і Хейне-Абаренкова-Анімалу. На малюнках 4 і 5 показані результати розрахунку структурного фактора для рідкого алюмінію в порівнянні з експериментальними результатами і аморфного ("замороженого") натрію в порівнянні з моделлю твердих кульок в наближенні Перкуса-Йєвіка. Для рідких металів середньосферичне наближення дає задовільне узгодження з експериментальними значеннями.



Мал. 4. Структурний фактор рідкого алюмінію при $T = 670^\circ\text{C}$. Суцільна крива – середньосферичне наближення. Використовувався псевдопотенціал Хейне-Абаренкова-Анімалу, діелектрична функція взята з роботи: *Vashishta P., Singwi K.S. // Phys. Rev. -1972. -B6, № 3. -P. 875-887*. Кружечки – експериментальні значення при $T = 670^\circ\text{C}$ (*Waseda Y., Suzuki K. The 1575th report of the Research Institute for Iron, Steel and Other Metals, January 10, 1973. Tokyo. -P. 139-184*).



Мал. 5. Структурний фактор аморфного ("замороженого") натрію при $T = 0^\circ\text{C}$. Суцільна крива – середньосферичне наближення (використовувався псевдопотенціал Ашкрофта, діелектрична функція та ж, що і на мал. 2). Штрихи – структурний фактор системи твердих кульок в наближенні Перкуса-Йевіка.



Мал. 6. Фононі частоти аморфного натрію з структурною моделі твердих кульок і розрахованою в середньосферичному наближенні. Використовувався псевдопотенціал Ашкрофта, діелектрична функція та ж, що і на мал. 2. Криві 1 і 2 – поздовжня і поперечна вітки з структурною моделі твердих кульок, 3 і 4 – з структурною, розрахованою в середньосферичному наближенні (мал. 5).

На малюнку 6 приведені фононі частоти аморфного натрію, обчислені з структурним фактором в середньосферичному наближенні. Енергії фононних мод, розраховані для структури в середньосферичному наближенні, менші від відповідних енергій для структури твердих кульок.

Сформульована середньосферична модель для квантової бозе-рідини, на основі якої отримане нелінійне інтегральне рівняння (7) для структурного фактора рідкого He^4 , де

$$f(q) = 1 + \frac{2mc}{\hbar q} + \frac{4\pi\rho}{q^2} \left\{ \frac{\sin(qa)}{q} - a \cos(qa) \right\} - \frac{4\pi mc}{\hbar q} \text{Si}(qa), \quad (9)$$

c і m – швидкість першого звуку і маса атома He^4 , $\text{Si}(x)$ – інтегральний синус.

Проведено числовий розв'язок рівняння (7), (9) при різних значеннях густини рідкого He^4 . Для діаметра атома було вибрано значення $a = 2,556 \text{ \AA}$, яке рівне параметру довжини, що входить в потенціал Ленарда-Джонса для He^4 . Розрахунки свідчать про те, що сформульована середньо-сферична апроксимація для основного стану рідкого He^4 може бути використана як нульове наближення для кількісних теорій, оскільки правильно відображає довгохвильову поведінку структурного фактора і наявність твердого кору в міжатомному потенціалі. Використовуючи результати розрахунку для структурного фактора, в наближенні парних міжатомних кореляцій обчислено заповнення бозе-конденсату в рідкому He^4 . Результати розрахунку задовільно узгоджуються зі значеннями, поміряними на експерименті.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ

В дисертаційній роботі проведено дослідження фононних та електронних збуджень в структурно неупорядкованих системах і вплив на них електрон-фононної взаємодії; розраховані структурні фактори рідких і аморфних металів, рідкого He^4 . Розрахунки спектрів елементарних збуджень виконані за допомогою методу двочасових температурних функцій Гріна. Підведемо підсумок отриманих результатів.

1. В самоузгодженому гармонічному наближенні для спектру фононних збуджень в багатокомпонентних аморфних тілах отримано рівняння в вигляді безмежного ряду по флуктуаціях густини, яке враховує наявність твердого кору в потенціалі міжатомної взаємодії і температурну залежність фононних частот та їх загасання на флуктуаціях структури. Встановлено, що в довгохвильовій ділянці спектру фононні збудження є добре визначеними. В двокомпонентному випадку знайдені явні вирази для частот акустичних і оптичних мод, поздовжньої і поперечної швидкостей звуку в нульовому наближенні, яке співпадає з квазікристалічним. Числові розрахунки залежності "частота-хвильовий вектор" для аморфних металів і двокомпонентного металевого скла, виконані в квазікристалічному наближенні, відтворюють характерну поведінку дисперсійних кривих як для поздовжніх, так і поперечних фононних мод. Дисперсійні криві поздовжніх фононів містять ротоноподібний мінімум. Врахування ефектів ангармонізму приводить до збільшення енергії фононних мод з підвищенням температури при фіксованій структурі. Перенормований факторами Дебая-Уоллера потенціал міжіонної взаємодії як функція відстані є більш гладким, ніж вихідний потенціал, його глибина менша, а мінімум відповідає більшій відстані. Така поведінка перенормованого потенціалу підтверджується дослідженнями ангармонічних фононів в кристалах.

2. Знайдено розв'язок рівняння для конфігураційно усереднених функцій Гріна електронів зони провідності аморфного металу в наближенні майже вільних електронів. Рівняння для енергетичного спектру одночастинкових електронних збуджень і їх загасання на неоднорідностях структури враховує багаточастинкові кореляції іонної підсистеми. Шляхом часткового підсумовування ряду теорії збурень отримано інтегральне рівняння для масового оператора, яке співпадає з відомим. Записано вирази для густини станів і функцій

ції розподілу одночастинкових електронних станів. Показано, що внаслідок структурної неупорядкованості сходинок Фермі розмивається вже при нульовій температурі.

3. Розраховано частотний спектр і загасання фононних збуджень однокомпонентного аморфного металу з врахуванням електрон-фононної взаємодії в наближенні незалежного розсіяння фононів на електронах і структурних флуктуаціях. Проведено аналіз впливу неупорядкованості на конівські аномалії в фононному спектрі.

4. Одержано вирази для спектру, загасання і густини станів електронних збуджень зони провідності аморфного металу з врахуванням електрон-фононної взаємодії в наближенні незалежного розсіяння електронних збуджень на фонах і неоднорідностях структури. Розглянута можливість куперівського спарювання електронів. Записано рівняння для щільності в електронному спектрі при переході в надпровідний стан.

5. Застосовано середньосферичне наближення для розрахунку просторових кореляційних функцій рідких і аморфних металів. Отримано нелінійне інтегральне рівняння для структурного фактора. Виконано числові розрахунки структурного фактора для ряду рідких і аморфних металів, на основі яких обчислено фононні частоти аморфних металів.

6. Сформульована середньосферична апроксимація для квантової бозеріднини. На основі числового розрахунку структурного фактора і прямої кореляційної функції зроблена оцінка відносної кількості бозе-конденсату рідкого He^4 .

Основні результати дисертації опубліковані в роботах:

1. Вакарчук С.А., Ткачук В.М., Якибчук П.Н., Мигаль В.М. Исследование фононного спектра аморфных металлов // Тезисы докл. IV Всес. конф. по строению и свойствам металлич. и шлаков. распл., 17-19 сент. 1986 г. Свердловск, ч. 1. —С. 139-140.
2. Мигаль В.М., Ткачук В.М., Вакарчук С.А., Якибчук П.Н. Фононный спектр двухкомпонентного металлического стекла // Тезисы докл. Всес. конф. «Совр. пробл. стат. физики», февр. 1987 г. Львов, ч. 2. —С. 134.
3. Вакарчук И.А., Мигаль В.М., Ткачук В.М. Возбуждения фононного типа в многокомпонентных аморфных телах // Тезисы докл. Всес. конф. «Совр. пробл. стат. физики», февр. 1987 г. Львов, ч. 2. —С. 116-117.
4. Вакарчук И.А., Мигаль В.М., Ткачук В.М. Фононные возбуждения в многокомпонентных аморфных телах // ТМФ. —1988. —75, № 2. —С. 306-315.
5. Вакарчук И.А., Мигаль В.М., Ткачук В.М. Фононные возбуждения в многокомпонентных топологически неупорядоченных системах // Тезисы докл. III Всес. конф. по физике и технологии тонких полупроводн. плёнок, Ивано-Франковск, 9-12 окт. 1990 г. Ивано-Франковск, 1990. —С. 72.
6. Вакарчук И.А., Мигаль В.М., Ткачук В.М. Возбуждения фононного типа в многокомпонентных аморфных телах // Труды Всес. конф. «Совр. пробл. стат. физики», Львов, февр. 1987 г. Киев: Наук. думка, 1989. —С. 284-290.

7. Вакарчук І.А., Мигаль В.М., Ткачук В.М. Фононные возбуждения в аморфных телах // Межведомств. сб. научн. статей «Стат. механика и теория фазов. переходов», Куйбышев, 1989. -С. 108-114.
8. Вакарчук І.А., Мигаль В.М., Ткачук В.М. Влияние ангармонизма на спектр фононных возбуждений в аморфных телах // Известия РАН. Серия физическая. -1992. -56, № 3. -С. 183-191; Тезиси докл. I советско-польского симпозиума по физике сегнетоэлектриков и родств. матер., Львов, 4-8 июля 1990 г. Киев, 1990. -С. 194-195.
9. Vakarchuk I.A., Myhal V.M., Tkachuk V.M. Energy Spectrum and Phonon Excitation Damping in Many-Component Amorphous Solids // phys. stat. sol. (b). -1991. -166. -P. 53-67.
10. Вакарчук І.О., Ткачук В.М., Мигаль В.М. Динамічні та термодинамічні властивості неупорядкованих систем // Вісник Львів. у-ту. Серія фізична, Львів: «Світ», 1992, вип. 25. -С. 58-70; Vakarchuk I.A., Tkachuk V.M., Myhal V.M. Dynamical and Thermodynamical Properties of Disordered Systems // Proceedings Contributed Papers International Conference «Physics in Ukraine», Statistical Physics and Phase Transitions, Kiev, 22-27 June, 1993. Kiev, 1993. -P. 154-157.
11. Vakarchuk I.A., Myhal V.M., Tkachuk V.M. Electron-Phonon Interaction Influence on Phonon and Electron Excitations in Amorphous Metals // Proceedings Contributed Papers International Conference «Physics in Ukraine», Low Temperature Physics, Kiev, 22-27 June, 1993. Kiev, 1993. -P. 267-270.
12. Myhal V.M. The Influence of the Electron-Phonon Interaction on the Electron Excitation Spectrum in Amorphous Metals // Ukrainian-French Symp. «Cond. Matt.: Science & Industry, Lviv, February, 20-27, 1993». Lviv, 1993. -P. 165.
13. Вакарчук І.О., Мигаль В.М., Ткачук В.М. Спектри фононних та електронних збуджень аморфних металів з врахуванням електрон-фононної взаємодії // Тези доп. XI Української школи-семінару «Спектроскопія молекул та кристалів», Харків, 10-16 травня 1993 р. Київ, 1993, -С. 43; Фононні та електронні збудження в аморфних металах з врахуванням електрон-фононної взаємодії // Тези доп. Ювілейної наук. конф., присвяч. 40-річчю фіз. ф-ту Львів. у-ту, 27-28 травня 1993 р. (Секція «Теор. фізика і астрофізика»), Львів, 1993, -С. 13.
14. Мигаль В.М. Структурные функции жидких и аморфных металлов в среднесферическом приближении // Материалы III конф. мол. ученых физич. ф-та Львов. у-та. Львов, 29-30 марта 1988 г. Львов. у-т, Львов, 1988. Ден. в УкрНИИНИТИ от 5.12.88, № 2945-Укр88. -С. 45-47.
15. Вакарчук І.О., Мигаль В.М. Розрахунок структурних функцій рідких металів у середнесферичному наближенні // Вісник Львів. у-ту. Серія фізична, Львів: «Світ», 1991, вип. 24. -С. 3-6.
16. Вакарчук І.А., Мигаль В.М. Среднесферическое приближение в теории осцилля в состоянии жидкого ^4He // УФЖ. -1987. -5, № 5. -С. 786-790.



463647

AB 28.131