

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-97-16U

І.В. Стасюк, О.В. Величко

СПЕКТР ПСЕВДОСПІНОВИХ ЗБУДЖЕНЬ В МОДЕЛІ МІЦУЇ
У СИМЕТРИЧНОМУ ПОЗДОВЖНЬОМУ ВИПАДКОВОМУ
ПОЛІ

УДК: 537.226.4; 538.91-405; 538.956

РАС: 63.50.+x, 64.60.Сп, 77.80.Вh, 74.72.Вk

Спектр псевдоспінових збуджень в моделі Міцуї у симетричному поздовжньому випадковому полі

І.В. Стасюк, О.В. Величко

Анотація. В даній роботі динаміка псевдоспінових збуджень в моделі Міцуї з випадковим симетричним поздовжнім полем вивчається з допомогою двочасових функцій Гріна в наближенні хаотичних фаз. Системи рівнянь для конфігураційно усереднених середніх проєкцій псевдоспінів і для отриманих в наближенні когерентного потенціалу конфігураційно усереднених однокоміркових функцій Гріна розв'язано числовим методом. Випадкове поле з вибраним бімодальним розподілом приводить до появи в густині станів псевдоспінових збуджень двох додаткових зон і може якісно змінювати фазову діаграму системи. Енергетичний спектр змінюється при переході системи з однієї фази в іншу.

Spectrum of pseudospin excitations of the Mitsui model with symmetric longitudinal random field

I.V. Stasyuk, O.V. Velychko

Abstract. In the present paper the dynamics of pseudospin excitations in the Mitsui model with the random symmetrical longitudinal field is investigated by the two-time Green functions technique in the random phase approximation. Systems of equations for configurationally averaged pseudospin projections and for obtained in the coherent potential approximation configurationally averaged single-site Green functions are solved numerically. The random field in the framework of the applied bimodal distribution leads to appearance of two additional bands in the pseudospin excitation density of states and can change a phase diagram of the system qualitatively. The energy spectrum changes when the system have a transition between different phases.

Подається в Фізичний збірник НТШ

Submitted to Physical proceedings of Shevchenko Sci. Soc.

1. Вступ

Двопідграткова модель Міцуї [1] була першим вдалим поясненням фазових переходів у сегнетовій солі ($\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$). Дещо пізніше вона була сформульована у псевдоспіновому формалізмі [2], запропонованому де Женом для сегнетоелектриків з водневими зв'язками. В такому підході модель описує дві підгратки псевдоспінів, що знаходяться в поперечному і дзеркально симетричному поздовжньому полях.

Оскільки незвичайною і довгий час незрозумілою властивістю сегнетової солі було існування сегнетофази між двома точками Кюрі, то у більшості робіт з цього питання розглядається саме проблема фазових переходів (ФП) для моделі Міцуї. Отримані у наближенні середнього поля (НСП) результати (див. роботи [3–5] і посилання в них) якісно узгоджуються з експериментальними даними для звичайної і дейтерованої сегнетової солі. При цьому у даному наближенні основному стану системи може відповідати не мінімум вільної енергії, а точка перегину [6]. З метою врахування кореляцій між найближчими сусідами розглядався квазіодномірний аналог моделі Міцуї [7–9]. Було показано, що на відміну від НСП при певних значеннях параметрів рід деяких ФП змінюється з другого на перший, а також можливі три послідовні ФП.

Менше уваги присвячено динаміці псевдоспінових збуджень у моделі Міцуї. Загальні питання висвітлено ще у перших роботах з даної тематики [2,4]. З метою кращого опису збуджень на водневих зв'язках у сегнетовій солі розглядалась модель, що враховує взаємодію між псевдоспінами і фононами [3,4,10,11]. Оскільки для сегнетової солі тунелювання протонів є малим (особливо при дейтеруванні) і ним часто нехтують, то для такого випадку досліджувалась релаксаційна динаміка псевдоспінів [12].

Останнім часом модель Міцуї знайшла своє застосування для системи не пов'язаної з сегнетоелектриками, а саме для опису підсистеми апексних киснів в високотемпературних надпровідниках (ВТНП) типу $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ [13]. За експериментальними даними атоми апексного кисню перебувають в ангармонічному двоохамному потенціалі. Потенціальні мінімуми розташовані вздовж осі c і знаходяться на відстані $\sim 0.13 \text{ \AA}$ один від одного [14,15]. Внаслідок асиметрії оточення двоохамний потенціал теж є асиметричним. Отже, в псевдоспіновому представленні така система описується моделлю Міцуї. Слід зауважити, що для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ характерною є зміна вмісту кисню в достатньо широких межах ($x = 0 \div 1$) (максималь-

на температура надпровідного переходу в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ досягається при $x = 0,05$ [16]). Зміна вмісту кисню відбувається за рахунок атомів кисню $\text{O}(1)$ (тут і надалі використовуються позначення атомів у елементарній комірці як у роботі [16]), що розташовані між площинами апексних киснів. Поява вакансій кисню у ланцюгах приводить до появи додаткового поля, яке симетрично діє принаймні на найближчі апексні кисні в обох сусідніх площинах [17]. Оскільки при малих значеннях x вакансії розташовуються випадково, то поле теж можна вважати випадковим. Таким чином, систему з двох сусідніх площин апексних киснів $\text{O}(4)$, що зазнають впливу неупорядкованих киснів $\text{O}(1)$ з площини ланцюгів $\text{Cu}(1)\text{--O}(1)$ можна описати з допомогою моделі Міцуї у випадковому симетричному поздовжньому полі.

Метою даної роботи є вивчення впливу випадкового поля на енергетичний спектр псевдоспінових збуджень. В рівняння руху для них входять конфігураційно усереднені середні проекції псевдоспінів, що можуть зазнавати різких змін із зміною температури внаслідок ФП. Тому паралельно проводиться обчислення цих середніх в наближенні середнього поля та вивчаються їх залежності від температури.

У другому розділі роботи буде введено модельний гамільтоніан і конкретизовано вигляд випадкового поля. Задача розрахунку конфігураційно усереднених середніх проекцій псевдоспінів розглядається у третьому розділі. Систему рівнянь для двоохамних конфігураційно усереднених функцій Гріна в наближенні хаотичних фаз та когерентного потенціалу буде отримано у четвертому розділі. У п'ятому розділі отримано вираз для однокоміркової функції Гріна з використанням модельної густини станів. Шостий розділ присвячений числовим розв'язкам системи рівнянь для функцій Гріна та їх аналізу.

2. Модельний гамільтоніан та структура випадкового поля

В псевдоспіновому представленні модельний гамільтоніан системи має такий вигляд:

$$H = 2\Omega \sum_i (S_1^x(i) + S_2^x(i)) - \sum_i h(i) (S_1^z(i) - S_2^z(i)) \quad (1)$$

$$- \frac{1}{2} \sum_i \sum_j j_{11}(i, j) (S_1^z(i) S_1^z(j) + S_2^z(i) S_2^z(j))$$

$$- \sum_i \sum_j j_{12}(i, j) S_1^z(i) S_2^z(j).$$

Проекція псевдоспіна підґратки ($\alpha = 1, 2$) l -ї комірки на вісь z $S_\alpha^z(l) = \pm \frac{1}{2}$ відображає два можливих рівноважних положення частинки на вузлі. Перший член гамільтоніану враховує тунельне розщеплення основного стану, другий — асиметрію ям ангармонічного потенціалу і випадкове поле. Третій і четвертий члени описують взаємодію між псевдоспінами в межах підґраток і між підґратками відповідно.

Розглянемо більш детально структуру поздовжнього поля $h(i)$. Для якісного розгляду проблеми можна використати просту біомодальну модель:

$$P(h(i)) = c\delta(h(i) - h) + (1 - c)\delta(h(i) - h_{imp}), \quad (2)$$

де c — концентрація вузлів з полем h , $1 - c$ — концентрація вузлів з полем h_{imp} .

У випадку $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ виникнення вакансій $\text{O}(1)$ у ланцюгу призводить до перебудови їх кристалічного оточення, а отже вигляд поля $h(i)$ не можна отримати з простих (наприклад, електростатичних) міркувань. Проте на основі експериментальних даних створено модель впливу вакансій на сусідні апексні кисні [17]. Подібний підхід, в якому враховувалися лише два типи потенціальних ям для іонів апексного кисню (що відповідає двом різним значенням поздовжнього поля у комірниці) залежно від наявності сусідніх киснів в ланцюгах, дозволив описати платоподібну залежність температури фазового переходу від концентрації кисню в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ [18].

Надалі вважатимемо, що випадкове поле у різних комірках є незалежним одне від одного. Таким чином нехтується кореляцією між конфігураціями оточення сусідніх комірок.

3. Середні проекції псевдоспінів

При розгляді динаміки псевдоспінових збуджень описаної вище моделі виникає проблема знаходження середніх проекцій псевдоспінів, оскільки вони входять як параметри в рівняння для побудованих на цих операторах функцій Гріна. Важливо дослідити залежність цих середніх від температури, оскільки при ФП вони досить різко (або стрибком) змінюють своє значення. Відповідно змінюється динаміка збуджень, тому її слід вивчити окремо для кожної фази.

Для моделі Міцуї поведінку системи із зміною температури та інших параметрів цілком задовільно описують середні значення проекції псевдоспінів, отримані в НСП. Відомо, що в моделі де Жена температури ФП у впорядковану фазу, визначені з умови занулення отриманого в НСП середнього $\langle S^z \rangle$ та занулення частоти отриманої в наближенні хаотичних фаз (НХФ) м'якої моди, співпадають. В моделі Міцуї фазовий перехід пов'язаний з коливаннями релаксаційного типу поздовжньої компоненти середнього поля, що не описуються в рамках використаного в цій роботі НХФ. Тому в даному випадку використаний для моделі де Жена критерій узгодженості НСП і НХФ є непридатним.

Рівняння для середніх проекцій псевдоспінів $\langle S_{1,2}^z \rangle$ та $\langle S_{1,2}^x \rangle$ для моделі Міцуї в наближенні середнього поля отримано в ряді робіт [3,4]. В роботі [3] проведено детальний аналіз фазової діаграми в залежності від параметрів $(J_{12}(0) - J_{11}(0))/(J_{12}(0) + J_{11}(0))$ та $h/(J_{12}(0) + J_{11}(0))$. При цьому припускалось, що впорядкування є сегнетоелектричного типу (взаємодія між псевдоспінами додатня) і тунелювання відсутнє. Вихід за межі наближення середнього поля було здійснено у серії робіт [7-9], де розглядався квазіодномірний аналог моделі Міцуї. Кореляції між найближчими сусідами враховувались точно, а між ланцюжками — в наближенні середнього поля. Показано зокрема, що при певних значеннях параметрів система може мати три фазових переходи. Цікаво, що і у наближенні середнього поля теж існує вузька область параметрів, при яких можливі три фазових переходи. Слід також згадати роботу [19], де досліджувалась можливість антисегнетоелектричного впорядкування (від'ємна взаємодія між псевдоспінами). Це збільшує ефективну кількість підґраток до чотирьох і відповідно ускладнює картину фазових переходів.

Доцільно пригадати основні співвідношення, отримані в наближенні середнього поля. Для середніх $\langle S_1^z \rangle$ та $\langle S_2^z \rangle$ рівняння самоузгодження утворюють систему двох нелінійних рівнянь

$$\begin{cases} \langle S_1^z \rangle = -\frac{1}{2} \frac{H_{1z}}{\sqrt{H_{1x}^2 + H_{1z}^2}} \text{th} \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{H_{1x}^2 + H_{1z}^2} \right) \\ \langle S_2^z \rangle = -\frac{1}{2} \frac{H_{2z}}{\sqrt{H_{2x}^2 + H_{2z}^2}} \text{th} \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{H_{2x}^2 + H_{2z}^2} \right) \end{cases}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \text{де } H_{1z} &= -h - J_{11}(0)\langle S_1^z \rangle - J_{12}(0)\langle S_2^z \rangle, \\ H_{2z} &= h - J_{11}(0)\langle S_2^z \rangle - J_{12}(0)\langle S_1^z \rangle, \\ H_{1x} &= H_{2x} = 2\Omega \end{aligned} \quad (4)$$

Середні $\langle S_1^x \rangle$ та $\langle S_2^x \rangle$ визначаються з співвідношень

$$\begin{aligned} \langle S_1^x \rangle &= -\frac{1}{2} \frac{H_{1x}}{\sqrt{H_{1x}^2 + H_{1z}^2}} \operatorname{th} \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{H_{1x}^2 + H_{1z}^2} \right), \\ \langle S_2^x \rangle &= -\frac{1}{2} \frac{H_{2x}}{\sqrt{H_{2x}^2 + H_{2z}^2}} \operatorname{th} \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{H_{2x}^2 + H_{2z}^2} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

і є функціями від $\langle S_1^z \rangle$ і $\langle S_2^z \rangle$.

Очевидно, що поява випадкового поля веде до залежності середніх проєкцій псевдоспінів від індекса комірки. Оскільки в проєкції середнього поля на вісь z входять члени типу $\sum_j j_{11}(i, j) \langle S_1^z(j) \rangle$ та $\sum_j j_{12}(i, j) \langle S_2^z(j) \rangle$, вигляд системи рівнянь (3) значно ускладнюється навіть у випадку, коли розглядається взаємодія лише між найближчими сусідами. Фактично замість системи двох рівнянь виникає система $2N$ рівнянь, бо члени згаданого вище типу пов'язують всі комірки одна з одною.

З цієї причини доводиться зробити кілька припущень. По перше, припускається, що кореляції між значеннями випадкового поля у різних комірках відсутні. В $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ така ситуація має місце при малих x . По друге, припускається, що проєкції середнього поля на вісь z мають такий самий вигляд, як і для ідеальної системи (3), однак внутрішні самоузгоджені поля, що включають випадкове поле h_i , визначаються конфігураційно усередненими середніми проєкціями псевдоспінів [20]:

$$\begin{aligned} H_{1z}(i) &= -h(i) - J_{11}(0) \overline{\langle S_1^z \rangle} - J_{12}(0) \overline{\langle S_2^z \rangle}, \\ H_{2z}(i) &= h(i) - J_{11}(0) \overline{\langle S_2^z \rangle} - J_{12}(0) \overline{\langle S_1^z \rangle}; \end{aligned} \quad (6)$$

лінія над виразом позначає його конфігураційне усереднення за випадковим полем: $\overline{A} = \int P(h_i) A_i(h_i) dh_i$.

Таким чином, для бімодального розподілу у кожній з підграток може бути два різних середніх $\langle S_\alpha^z \rangle$ залежно від того, яке з двох значень приймає випадкове поле

$$\langle S_\alpha^z(i) \rangle = -\frac{1}{2} \frac{H_{\alpha z}(i)}{\sqrt{H_{\alpha x}^2 + H_{\alpha z}^2(i)}} \operatorname{th} \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{H_{\alpha x}^2 + H_{\alpha z}^2(i)} \right), \beta = \frac{1}{kT}, \alpha = 1, 2. \quad (7)$$

Провівши конфігураційне усереднення можна отримати систему рівнянь для конфігураційно усереднених середніх $\overline{\langle S_\alpha^z \rangle}$

$$\overline{\langle S_\alpha^z \rangle} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^2 p_n \frac{H_{\alpha z}(n)}{\sqrt{H_{\alpha x}^2 + H_{\alpha z}^2(n)}} \operatorname{th} \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{H_{\alpha x}^2 + H_{\alpha z}^2(n)} \right), \quad (8)$$

та відповідні вирази для середніх $\overline{\langle S_\alpha^x \rangle}$

$$\overline{\langle S_\alpha^x \rangle} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^2 \frac{H_{\alpha x}}{\sqrt{H_{\alpha x}^2 + H_{\alpha z}^2(n)}} \operatorname{th} \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{H_{\alpha x}^2 + H_{\alpha z}^2(n)} \right), \quad \alpha = 1, 2, \quad (9)$$

де $p_1 = c$, $p_2 = 1 - c$, $h_1 = h$, $h_2 = h_{imp}$ відповідно до означення бімодального розподілу (2).

Система рівнянь (8) подібна до системи (3). Системи рівнянь (8) і (3) можуть мати кілька розв'язків. Зробимо деякі перетворення, що спростять обчислення. Запишемо поздовжні складові середнього поля у вигляді [3]

$$\begin{aligned} H_{1z}(i) &= -h_i - \bar{\eta} + a\bar{\xi}, \quad H_{2z}(i) = h_i - \bar{\eta} - a\bar{\xi}, \\ \text{де } \bar{\eta} &= \bar{\eta}_i, \quad \bar{\xi} = \bar{\xi}_i; \\ \eta_i &= \frac{1}{2} (\langle S_1^z(i) \rangle + \langle S_2^z(i) \rangle), \quad \xi_i = \frac{1}{2} (\langle S_1^z(i) \rangle - \langle S_2^z(i) \rangle), \\ a &= \frac{J_{12}(0) - J_{11}(0)}{J_{12}(0) + J_{11}(0)}. \end{aligned} \quad (10)$$

Тоді вирази (7) можна записати у формі

$$\begin{aligned} \eta_i &= \frac{1}{4} (f_{1i} + f_{2i}), \\ \xi_i &= \frac{1}{4} (f_{1i} - f_{2i}), \end{aligned} \quad (11)$$

де $f_{\alpha i} = \frac{H_{\alpha z}(i)}{\sqrt{H_{\alpha x}^2 + H_{\alpha z}^2(i)}} \operatorname{th} \left(\frac{\beta}{2} \sqrt{H_{\alpha x}^2 + H_{\alpha z}^2(i)} \right)$, $\alpha = 1, 2$. Введемо нові змінні x_{1i} та x_{2i}

$$x_{1i} = \eta_i - a\xi_i, \quad x_{2i} = \eta_i + a\xi_i, \quad (12)$$

і, відповідно, $\overline{x_1} = \overline{x_{1i}}$, $\overline{x_2} = \overline{x_{2i}}$. Тоді вирази (11) матимуть вигляд

$$\begin{aligned} x_{1i} &= \alpha_1 x_{2i} + \alpha_2 f_{2i}(\overline{x_2}), \\ x_{2i} &= \alpha_1 x_{1i} + \alpha_2 f_{1i}(\overline{x_1}), \end{aligned} \quad (13)$$

де $\alpha_1 = \frac{1-a}{1+a}$, $\alpha_2 = \frac{a}{1+a}$. Провівши конфігураційне усереднення, отримуємо систему рівнянь для $\overline{x_1}$ та $\overline{x_2}$:

$$\begin{cases} \overline{x_1} = \alpha_1 \overline{x_2} + \alpha_2 \sum p_n f_{2n}(\overline{x_2}) \\ \overline{x_2} = \alpha_1 \overline{x_1} + \alpha_2 \sum_n p_n f_{1n}(\overline{x_1}) \end{cases}, \quad (14)$$

Легко бачити, що права частина кожного з рівнянь (14) залежить лише від однієї змінної. Тому, підставивши, наприклад, вираз для $\overline{x_2}$ з другого рівняння в перше, отримуємо рівняння для змінної $\overline{x_1}$. Розв'язавши його, підставляємо розв'язок у друге рівняння і отримуємо відповідне значення $\overline{x_2}$. Зрозуміло, що розв'язати одне трансцендентне рівняння значно легше ніж систему двох. Застосування методу половинного ділення дозволяє знайти всі можливі розв'язки для $\langle S_1^z \rangle$ та $\langle S_2^z \rangle$. З них вибирається фізичний розв'язок, що відповідає найнижчому мінімуму (чи точці перегину) вільної енергії [3,6]. Аналогічні перетворення доцільно провести і для випадку ідеальної системи (3).

Отримані з виразів (14) і (9) конфігураційно усереднені середні $\langle S_{1,2}^{x,z} \rangle$ використовуватимуться в наступному розділі в формулах, що описують динаміку псевдоспінових збуджень в неупорядкованій системі.

4. Динаміка псевдоспінових збуджень

Для ідеальної системи динаміка псевдоспінових збуджень в моделі Міцуї вивчалась вже в перших роботах з цієї тематики [2,4]. Зокрема, використовувався метод двочасових функцій Гріна, побудованих на $S_{1,2}^z(l)$ операторах. Доцільно навести основні отримані результати. Функції Гріна вищого порядку типу $\langle\langle AB|C \rangle\rangle$ розщеплюються в (НХФ)

$$\langle\langle AB|C \rangle\rangle \simeq \langle A \rangle \langle\langle B|C \rangle\rangle + \langle B \rangle \langle\langle A|C \rangle\rangle.$$

Тоді Фур'є-образи двочасових функцій Гріна, побудованих на операторах $S_{1,2}^z(l)$, мають такий вигляд:

$$\hat{G}^{zz}(\vec{k}) = -\frac{\hbar}{2\pi} [\hat{g}^{-1} - \hat{J}(\vec{k})]^{-1}, \quad (15)$$

$$\text{де } \hat{G}^{zz}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} G_{11}^{zz}(\vec{k}) & G_{12}^{zz}(\vec{k}) \\ G_{21}^{zz}(\vec{k}) & G_{22}^{zz}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad \hat{J}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} J_{11}(\vec{k}) & J_{12}(\vec{k}) \\ J_{21}(\vec{k}) & J_{22}(\vec{k}) \end{pmatrix},$$

$$\hat{g} = \begin{pmatrix} g_1 & 0 \\ 0 & g_2 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

$$G_{\alpha\beta}^{zz}(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_i \sum_j e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \langle\langle S_\alpha^z(i) | S_\beta^z(j) \rangle\rangle_\omega,$$

$$J_{\alpha\beta}(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_i \sum_j e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} j_{\alpha\beta}(i, j), \quad \alpha, \beta = 1, 2.$$

З означення $J_{\alpha\beta}(\vec{k})$ випливає зв'язок $J_{12}(\vec{k}) = J_{21}(-\vec{k}) = J_{21}^*(\vec{k})$. Матриця \hat{g} складається з функцій Гріна $g_{1,2}$ (т. зв. локатори) для ізольованих псевдоспінів $S_{1,2}^z$ в середньому полі:

$$g_1 = \frac{2\Omega \langle S_1^x \rangle}{(\hbar\omega)^2 - H_{1x}^2 - H_{1z}^2}, \quad g_2 = \frac{2\Omega \langle S_2^x \rangle}{(\hbar\omega)^2 - H_{2x}^2 - H_{2z}^2}. \quad (17)$$

Прирівнявши до нуля визначник матриці $[\hat{g}^{-1} - \hat{J}(\vec{k})]$ у формулі (15), отримаємо рівняння для енергетичного спектру псевдоспінових збуджень. Його розв'язками є дві гілки:

$$(\hbar\omega)_{1,2}^2 = \frac{1}{2} (\varepsilon_1^2(\vec{k}) + \varepsilon_2^2(\vec{k})) \pm \frac{1}{2} \left[(\varepsilon_1^2(\vec{k}) - \varepsilon_2^2(\vec{k}))^2 + 4\varepsilon_{12}^4(\vec{k}) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \text{де } \varepsilon_1^2(\vec{k}) &= H_{1x}^2 + H_{1z}^2 + 2\Omega \langle S_1^x \rangle J_{11}(\vec{k}), \\ \varepsilon_2^2(\vec{k}) &= H_{2x}^2 + H_{2z}^2 + 2\Omega \langle S_2^x \rangle J_{11}(\vec{k}), \\ \varepsilon_{12}^4(\vec{k}) &= (2\Omega)^2 \langle S_1^x \rangle \langle S_2^x \rangle J_{12}(\vec{k}) J_{21}(\vec{k}). \end{aligned}$$

Наявність двох гілок у спектрі викликана тим, що система складається з двох підґраток (давидівське розщеплення), і описує синфазні та протифазні перевероти псевдоспінів. Справді, при відсутності взаємодії між підґратками спектр системи переходить у енергії збуджень ізольованих підґраток $\varepsilon_1^2(\vec{k})$ та $\varepsilon_2^2(\vec{k})$.

Поява випадкового поля не змінює структуру гамільтоніана, а отже і структуру рівнянь для функцій Гріна. Однак випадковий характер поля приводить до втрати трансляційної інваріантності. У цьому випадку для функції Гріна $\langle\langle S_\alpha^z(l) | S_\beta^z(m) \rangle\rangle_\omega$ отримується така система рівнянь

$$\begin{aligned} \hbar\omega G_{\alpha\beta}^{xz}(l, m) &= i \left((-1)^{\alpha-1} h(l) + \sum_j j_{11}(l, j) \langle S_\alpha^z(j) \rangle \right. \\ &\quad \left. + \sum_j j_{\alpha\alpha'}(l, j) \langle S_{\alpha'}^z(j) \rangle \right) G_{\alpha\beta}^{yz}(l, m), \\ \hbar\omega G_{\alpha\beta}^{yz}(l, m) &= i \frac{\hbar}{2\pi} \delta_{\alpha\beta} \delta_{lm} \langle S_\alpha^x(l) \rangle - i \left[2\Omega G_{\alpha\beta}^{zz}(l, m) \right. \\ &\quad \left. + \left((-1)^{\alpha-1} h(l) + \sum_j j_{11}(l, j) \langle S_\alpha^z(j) \rangle \right) \right] \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_j j_{\alpha\alpha'}(l, j) \langle S_{\alpha'}^z(j) \rangle \Big) G_{\alpha\beta}^{xz}(l, m) \\
& + \langle S_{\alpha}^x(l) \rangle \left(\sum_j j_{11}(l, j) G_{\alpha\beta}^{zz}(j, m) \right. \\
& \left. + \sum_j j_{\alpha\alpha'}(l, j) G_{\alpha'\beta}^{zz}(j, m) \right) \Big],
\end{aligned}$$

$$\hbar\omega G_{\alpha\beta}^{zz}(l, m) = i2\Omega G_{\alpha\beta}^{yz}(l, m),$$

$$\begin{aligned}
\text{де } G_{\alpha\beta}^{pq}(l, m) &= \langle \langle S_{\alpha}^p(l) | S_{\beta}^q(m) \rangle \rangle, \quad p, q = x, y, z, \quad \alpha, \beta = 1, 2, \\
\alpha' &= 2, \text{ коли } \alpha = 1, \text{ і } \alpha' = 1, \text{ коли } \alpha = 2.
\end{aligned}$$

Виключивши з рівнянь функції Гріна з x - та y -проекціями псевдоспіна, матимемо

$$\begin{aligned}
G_{\alpha\beta}^{zz}(l, m) &= -\frac{\hbar}{2\pi} \delta_{\alpha\beta} \delta_{lm} g_{\alpha}(l) \\
&+ g_{\alpha}(l) \left(\sum_j j_{11}(l, j) G_{\alpha\beta}^{zz}(j, m) + \sum_j j_{\alpha\alpha'}(l, j) G_{\alpha'\beta}^{zz}(j, m) \right)
\end{aligned} \quad (20)$$

$$\text{де } g_{\alpha}(l) = \frac{2\Omega \langle S_{\alpha}^x(l) \rangle}{(\hbar\omega)^2 - H_{\alpha x}^2 - H_{\alpha z}^2(l)}, \quad \alpha = 1, 2.$$

У системі рівнянь (20) зручно перейти до матричного запису, який більш ясно відображає двопідграткову структуру моделі,

$$\hat{G}(l, m) = -\frac{\hbar}{2\pi} \delta_{lm} \hat{g}(l) + \hat{g}(l) \sum_j \hat{J}(l, j) \hat{G}(j, m), \quad (21)$$

$$\begin{aligned}
\text{де } \hat{G}^{zz}(l, m) &= \begin{pmatrix} G_{11}^{zz}(l, m) & G_{12}^{zz}(l, m) \\ G_{21}^{zz}(l, m) & G_{22}^{zz}(l, m) \end{pmatrix}, \\
\hat{J}(l, m) &= \begin{pmatrix} J_{11}(l, m) & J_{12}(l, m) \\ J_{21}(l, m) & J_{22}(l, m) \end{pmatrix},
\end{aligned} \quad (22)$$

$$\hat{g} = \begin{pmatrix} g_1 & 0 \\ 0 & g_2 \end{pmatrix}.$$

Конфігураційно залежними є лише функції Гріна ізольованих комірок \hat{g} — отже це випадок діагонального безладу.

Для того, щоб розв'язати рівняння (21), використаємо одноузлове наближення когерентного потенціалу (див., наприклад, [21]). В цьому наближенні маємо наступну систему рівнянь для конфігураційно усередненої однокоміркової функції Гріна \hat{F} :

$$\begin{cases} \hat{F} = \sum_n p_n [\hat{g}_n^{-1} - \hat{\sigma}^{-1} + \hat{F}^{-1}]^{-1} \\ \hat{F} = \frac{1}{N} \sum_k [\hat{\sigma}^{-1} - \hat{J}(\vec{k})]^{-1} \end{cases}, \quad (23)$$

де $\hat{F} = \overline{\hat{G}(l, l)}$, $\hat{\sigma}$ — матриця конфігураційно усереднених локаторів, n позначає певну конфігурацію оточення (а, отже, певне значення випадкового поля), \hat{g}_n — матриця конфігураційно залежних функцій Гріна ізольованих псевдоспінів, а сума по n з відповідними ваговими множниками p_n відповідає конфігураційному усередненню з розподілом (2).

У використаному одноузловому (чи вірніше однокомірковому) наближенні конфігураційно усереднені локатори не залежать від хвильового вектора. Тому зміни, пов'язані з випадковим полем, краще досліджувати для конфігураційно усередненої густини псевдоспінових збуджень на вузлі $\rho(\omega)$ за формулою

$$\rho_{\alpha}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im F_{\alpha\alpha}(\omega), \quad \alpha = 1, 2. \quad (24)$$

Густина станів $\rho(\omega)$ дозволяє наочно дослідити зміну ширини та інтенсивності енергетичних зон псевдоспінових збуджень із зміною концентрації випадкового поля та інших параметрів системи.

5. Обчислення конфігураційно усередненої однокоміркової функції Гріна

Друге рівняння системи (23)

$$\hat{F} = \frac{1}{N} \sum_k [\hat{\sigma}^{-1} - \hat{J}(\vec{k})]^{-1} \quad (25)$$

виражає конфігураційно усереднену однокоміркову функцію Гріна \hat{F} через матриці усереднених локаторів $\hat{\sigma}$ і Фур'є-образів псевдоспінової взаємодії $\hat{J}(\vec{k})$. Точно обчислити суму (чи інтеграл) по \vec{k} складно навіть у випадку ідеальної системи, де $\hat{\sigma}$ переходить в матрицю одноузлових локаторів \hat{g} .

Проведемо такий розрахунок на прикладі двомірної системи, що відповідає кисневим підграткам в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, з врахуванням взаємодії лише між найближчими сусідами. Фур'є-образи псевдоспінової взаємодії мають такий вигляд:

$$J_{11}(\vec{k}) = j_1 \cdot \frac{1}{2} (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)), \quad j_1 = J_{11}(0), \quad (26)$$

$$J_{12}(\vec{k}) = J_{21}(\vec{k}) = j_{2c} + j_2 \cdot \frac{1}{2} (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)), \quad J_{12}(0) = j_{2c} + j_2.$$

Сумування по хвильовому вектору можна замінити інтегруванням за густиною станів за формулою

$$\frac{1}{N} \sum_k f(g(\vec{k})) = \int f(x) \rho(x) dx, \quad \rho(x) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(x - g(\vec{k})), \quad (27)$$

де $g(\vec{k})$ — довільна функція від \vec{k} . Знайти точний вигляд $\rho(x)$ є не меншою проблемою, аніж обчислити суму по \vec{k} в виразі (25). Однак замість точної можна взяти просту модельну густину станів $\rho(x)$, що дасть можливість провести інтегрування по x . Такою модельною густиною станів для двомірної системи може слугувати прямокутна густина станів:

$$\rho(x) = \frac{1}{2}, \quad x \in [-1, 1]. \quad (28)$$

Після переходу до модельної густини станів Фур'є-образи (26) приймають вигляд

$$\begin{aligned} J_{11}(x) &= j_1 x, \\ J_{12}(x) &= j_{2c} + j_2 x; \end{aligned} \quad (29)$$

а обернена матриця з виразу (25), відповідно, запишеться так

$$\left[\hat{\sigma}^{-1} - \hat{J}(\vec{k}) \right]^{-1} = D^{-1} \begin{pmatrix} s_{22} - j_1 x & -(s_{12} - j_2 x) \\ -(s_{12} - j_2 x) & s_{11} - j_1 x \end{pmatrix}, \quad \text{де} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} s_{11} &= (\hat{\sigma}^{-1})_{11}, \quad s_{22} = (\hat{\sigma}^{-1})_{22}, \quad s_{12} = (\hat{\sigma}^{-1})_{12} - j_{2c}; \\ D^{-1} &= D_{const}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ z_1 - x & z_2 - x \end{pmatrix}, \quad D_{const} = -(j_1^2 - j_2^2)(z_1 - z_2), \\ z_{1,2} &= \frac{1}{2} (j_1^2 - j_2^2)^{-1} \left[j_1 (s_{11} + s_{22}) - 2j_2 s_{12} \right. \\ &\quad \left. \pm \sqrt{j_1^2 (s_{11} - s_{22})^2 + 4(j_1 s_{12} - j_2 s_{11})(j_1 s_{12} - j_2 s_{22})} \right]. \end{aligned} \quad (31)$$

Тут враховано, що $\sigma_{21} = \sigma_{12}$. Тепер інтегрування по x зводиться до інтегрування простих дробів з модельною густиною станів

$$F_0(z) = \int_{-1}^1 \frac{\rho(x) dx}{z - x} = -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{z - 1}{z + 1} \right), \quad (32)$$

враховуючи, що $\ln(z) = \ln|z| + i \arg(z)$. В результаті для однокоміркової функції Гріна отримуємо

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{12} & F_{22} \end{pmatrix}, \quad \text{де} \quad (33)$$

$$\begin{aligned} F_{11} &= D_{const}^{-1} [(s_{22} - j_1 z_1) F_0(z_1) - (s_{22} - j_1 z_2) F_0(z_2)], \\ F_{12} &= D_{const}^{-1} [-(s_{12} - j_2 z_1) F_0(z_1) + (s_{12} - j_2 z_2) F_0(z_2)], \\ F_{22} &= D_{const}^{-1} [(s_{11} - j_1 z_1) F_0(z_1) - (s_{11} - j_1 z_2) F_0(z_2)]. \end{aligned} \quad (34)$$

Слід зауважити, що в полярній фазі $\sigma_{11} = \sigma_{22}$ (див. означення (17)), отже і $F_{11} = F_{22}$. Внаслідок цього вигляд виразів (31) і (34) значно спрощується

$$z_1 = \frac{s_{11} + s_{12}}{j_1 + j_2}, \quad z_2 = \frac{s_{11} - s_{12}}{j_1 - j_2}; \quad (35)$$

$$F_{11} = \frac{1}{2} \left(\frac{F_0(z_1)}{j_1 + j_2} + \frac{F_0(z_2)}{j_1 - j_2} \right), \quad F_{12} = \frac{1}{2} \left(\frac{F_0(z_1)}{j_1 + j_2} - \frac{F_0(z_2)}{j_1 - j_2} \right). \quad (36)$$

На відміну від виразів (34), де коефіцієнти при F_0 можуть залежати від енергії як для ідеальної, так і для неупорядкованої системи, в полярній фазі ці коефіцієнти є незалежними від енергії.

6. Числові результати та їх аналіз

Оскільки неупорядкована система зберігає основні риси густини станів псевдоспінових збуджень ідеальної системи, доцільно почати обговорення результатів з випадку $c = 1$ (чи $c = 0$). Так, двопідграткова структура моделі виявляє себе у появі двох гілок в енергетичному спектрі (див. (18)) чи двох зон в густині станів псевдоспінових збуджень (див. (31)). Одна з них — зона синфазних псевдоспінових збуджень з меншою енергією центра зони, що відповідає кореню z_1 (див. вирази (35)), друга — зона протифазних збуджень з більшою енергією центра зони, що відповідає кореню z_2 . Ширина і висота зон та відстань між ними залежать від значення параметрів $J_{11}(0)$ і $J_{12}(0)$. В цьому розділі в числових розрахунках

використано безрозмірні параметри a (див. (10)), Θ , h і Ω , отримані шляхом нормування на $J_{11}(0) + J_{12}(0)$. Для додатніх $J_{11}(0)$ і $J_{12}(0)$ параметр $a \in [-1, 1]$. Відстань між центрами зон зростає із збільшенням $J_{12}(0)$, що ілюструє рис. 1, де ця відстань при $a = 1$ ($J_{11}(0)/(J_{11}(0) + J_{12}(0)) = 0,25$, $J_{12}(0)/(J_{11}(0) + J_{12}(0)) = 0,75$) майже вшестеро більша, ніж при $a = -1$ ($J_{11}(0)/(J_{11}(0) + J_{12}(0)) = 0,75$, $J_{12}(0)/(J_{11}(0) + J_{12}(0)) = 0,25$). Зони перекриваються, якщо $j_{2c} < j_1$ (див. (18) і (26)). Ширина зони синфазних коливань пропорційна, а її висота обернено пропорційна до $j_1 + j_2$; ширина і висота зони протифазних коливань таким самим чином залежать від $j_1 - j_2$.

Слід звернути увагу на те, що в неполярній фазі для $c = 1$ і $c = 0$ різне розміщення зон псевдоспінових збуджень зумовлене лише відмінністю модулів полів $|h|$ і $|h_{imp}|$, як це впливає з виразів (10). Для проміжних значень концентрації така ситуація вже не має місця, оскільки параметр ξ є однаковим у комірках з різними внутрішніми полями.

В полярній фазі густина псевдоспінових збуджень зазнає суттєвих змін (рис. 2). Зони вже не перекриваються і є зсуnutими в область вищих енергій. Збільшення відстані між зонами викликане різницею між енергіями одновузлових збуджень у різних підгратках. Ця різниця є пропорційною до параметра порядку η . Зсув до вищих енергій, в свою чергу, пояснюється збільшенням поздовжньої складової середнього поля і відповідним зростанням енергії одновузлових збуджень (див. (10) і (17)).

Оскільки в полярній фазі $F_{11} \neq F_{22}$, парціальна густина станів у різних підгратках стає неоднаковою. В загальному випадку через складність \hat{F} важко провести аналіз цієї ситуації. Однак при $j_2 = 0$ вирази (34) можна записати так

$$\begin{aligned} F_{11} &= \frac{1}{2j_1} [(1+t)F_0(z_1) + (1-t)F_0(z_2)] , \\ F_{22} &= \frac{1}{2j_1} [(1-t)F_0(z_1) + (1+t)F_0(z_2)] , \\ \text{де } t &= \frac{s_{11} - s_{22}}{\sqrt{(s_{11} - s_{22})^2 + 4s_{12}^2}} , \quad t \in]-1, 1[. \end{aligned} \quad (37)$$

З формул (37) видно, що при $t \neq 0$ парціальні густини станів у підгратках різні. При великій різниці $s_{11} - s_{22}$ отримуємо $|t| \rightarrow 1$, тобто в певну зону дає вклад практично лише одна підгратка. В загальному випадку при $j_2 \neq 0$ описана вище поведінка густини станів зберігається.

Як згадувалось раніше, в полярній фазі коефіцієнти біля F_0 в виразах (34) стають залежними від енергії. Як наслідок, зони не мають прямокутного вигляду навіть для випадку $c = 1$ ($c = 0$).

Поява комірок з полем h_{imp} , що навіть незначно відрізняється від поля h , призводить до суттєвих змін вигляду густини станів. З рис. 3 видно, що при малих концентраціях комірок з полем h_{imp} (чи h), відповідні їм зони мають малу інтенсивність і ширину (через що зони синфазних і антифазних коливань вже не перекриваються) та значно змінену форму. Можливе їх перекривання з зоною основної компоненти. При $c = 0,5$ зони мають майже однакову інтенсивність і перекриваються, утворюючи одну зону складної форми.

Для ілюстрації якісних змін в системі під дією випадкового поля розглянемо два випадки: $a = 0,5$ і $a = -0,5$ при фіксованих значеннях інших параметрів. Як видно з рис. 4 фазової діаграми «критична температура Θ_c — внутрішнє поле h » для $a = 0,5$ температура ФП другого роду слабо залежить від концентрації. Натомість для $a = -0,5$ (рис. 5) зміна має якісний характер — при певній критичній концентрації температура ФП першого роду в полярну фазу стає рівна нулю і нижче цієї концентрації полярна фаза не існує. Це пояснюється тим, що при такому значенні a ідеальна система з внутрішнім полем, рівним h_{imp} у всіх комірках, може перебувати лише у неполярній фазі.

Оскільки найбільші зміни в густині станів псевдоспінових збуджень відбуваються при ФП, то значення параметрів, для яких обчислено густину станів, відповідають близьким до лінії ФП точкам фазової діаграми. Так, у першому випадку зміну спектру при ФП із зміною температури ілюструють наведені на рис. 6 і 7 густини станів, що відповідають точкам А (неполярна фаза) і В (полярна фаза) на рис. 4. Як і для ідеального випадку, при переході системи у полярну фазу спостерігається розщеплення складних зон на дві окремі і їх зсув в область вищих енергій. Більша відстань між зонами, породженими псевдоспіновими збудженнями у комірках з полем h_{imp} , порівняно з зонами, що відповідають коміркам з полем h , зумовлена тим, що $h_{imp} > h$, і, відповідно, різниця між середніми полями (10) різних підграток у комірках з полем h_{imp} більша. У другому випадку зміну спектру при ФП із зміною температури та зміною концентрації ілюструють наведені на рис. 8, 9 і 10 густини станів, що відповідають точкам С і D (неполярна фаза) та Е (полярна фаза) на рис. 5. При переході до полярної фази тут відбуваються такі ж якісні зміни густини станів, як і в обговореному вище випадку. Але, оскільки, ФП між точками А і В — другого роду, а між

точками C, D і E — першого, то в останньому випадку різниця між значеннями параметрів η і ξ у відповідних точках є більшою, що видно з рис. 4 і 5. Це пояснює сильніший зсув і більше розщеплення зон при переході у полярну фазу при $a = -0,5$ порівняно з $a = 0,5$.

Отже, дослідження густини станів невпорядкованої системи показує, що найбільших якісних змін вона зазнає при переході з неполярної в полярну фазу. При цьому, як правило, дві зони складної форми розщеплюються, утворюючи чотири і відбувається їх зсув в область вищих енергій.

7. Висновки

Отже, поява випадкового поля приводить до змін середніх проекцій псевдоспінів і змінює енергію одноузлових збуджень, а в кінцевому результаті — енергію колективних псевдоспінових збуджень. Випадкове поле впливає на енергію одноузлових збуджень двома шляхами. По перше, неявним чином через середні проекції псевдоспінів, що залежать від вигляду розподілу випадкового поля та концентрації. По друге, явно, оскільки енергія одноузлового збудження залежить від значення внутрішнього поля на цьому вузлі.

Бімодальне випадкове поле при певних значеннях параметрів системи може привести до якісної зміни фазової діаграми. Одним з таких випадків є пониження температури ФП у полярну фазу та її зникнення при зменшенні концентрації нижче певного критичного значення. Слід наголосити, що ця якісна перебудова при певних значеннях параметрів може відбуватися за малої різниці між полями h і h_{imp} .

Вплив випадкового поля на динаміку системи веде до появи двох додаткових підзон у густині станів, що відповідають збудженням у комірках, де поздовжнє поле рівне h_{imp} . Їх розташування, форма та перекривання між собою та основними зонами залежить від конкретних параметрів системи та концентрації. Найбільш різких змін густини станів зазнає при ФП полярна–неполярна фаза (як із зміною температури, так і концентрації), оскільки при ФП досить різко змінюються середні поля, що діють на псевдоспіни, і відповідно змінюється енергія псевдоспінових збуджень. Як наслідок, зони густини станів псевдоспінових збуджень різко змінюють свою інтенсивність і взаємне розміщення.

В зв'язку з дослідженням механізму високотемпературної надпровідності в $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ значна увага звернута на вивчення ролі піддратки апексних киснів. Проведено значний об'єм експеримен-

тальних досліджень їх динаміки, зокрема методами спектроскопії комбінаційного розсіяння та інфрачервоної спектроскопії, для різних значень концентрації кисню x . Отримані в роботі результати могли б служити теоретичною основою для інтерпретації цих складних експериментальних даних.

Робота виконана при частковій фінансовій підтримці Державного фонду фундаментальних досліджень Міністерства України у справах науки і технологій (проект №2.4/171).

Література

- [1] Mitsui T. Theory of the ferroelectric effect in Rochelle salt. // Phys. Rev., 1958, vol. 111, No 5, p. 1529-1567.
- [2] Žekš B., Shukla G.C., Blinc R. Dynamics of ferroelectric Rochelle salt. // Phys. Rev. B, 1971, vol. 3, p. 2306-2309.
- [3] Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М., Наука, 1973.
- [4] Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. М., Мир, 1975.
- [5] Вакс В.Г., Зиненко В.И., Шнейдер В.Е. Микроскопические теории структурных фазовых переходов типа порядок–беспорядок в кристаллах. // УФН, 1983, том 141, No 4, с. 629-673.
- [6] Осипов М.А., Шумовский А.С. О нарушении принципа минимальности свободной энергии в приближении самосогласованного поля для некоторых моделей сегнетоэлектриков. // ТМФ, 1981, том 46, No 1, с. 125-131.
- [7] Власова А.А., Стаменкович С., Торнау Э.Э., Шнейдер В.Е. О фазовых переходах в модели взаимодействующих изинговских цепочек спинов. // ФТТ, 1981, том 23, No 2, с. 413-417.
- [8] Торнау Э.Э., Шнейдер В.Е. Новый тип фазовых переходов в модели Изинга с неэквивалентными подрешетками. // Письма в ЖЭТФ, 1980, том 31, No 7, с. 385-388.
- [9] Белослудов В.Р., Власова А.А., Набутовский В.М., Шнейдер В.Е. Термодинамика взаимодействующих линейных цепочек спинов с асимметричным потенциалом. // ЖЭТФ, 1979, том 77, No 1(7), с. 271-278.
- [10] Chaudhuri B.J., Atake T., Ganguli S., Chihara H. Study of ferroelectric phase transitions in the Rochelle salt with the pseudo-spin-lattice coupled mode model. // J. Phys. Soc. Japan, 1980, vol. 49, No 2, p. 608-618.

- [11] Amarante Ribeiro L.A., Sá Barreto F.C., Pires A.S.T. Dynamic study ferroelectric Rochelle salt. // *J. Phys. C*, 1982, vol. 15, p. 573-580.
- [12] Левицкий Р.Р., Зачек И.Р., Вараницкий В.И. Релаксационная динамика сегнетоактивных соединений типа порядок-беспорядок с асимметричным одночастичным потенциалом с двумя минимумами. // *УФЖ*, 1980, том 25, No 11, с. 1766-1774.
- [13] Galbaatar T., Plakida N.M. Possible origin of ferroelectricity in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ compound. In Proc. Intern. Conf. M²S-HTSC IV, Grenoble, July 5-9, 1994.
- [14] Mustre de Leon J., Conradson S.D., Batistić I., Bishop A.R. Correlation between axial-oxygen anharmonicity and T_c in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ and related compounds. // *Phys. Rev. B*, 1991, vol. 44, No 5, p. 2422-2425.
- [15] Mustre de Leon J., Conradson S.D., Batistić I., Bishop A.R., Raistrick I.D., Aronson M.C., Garzon F.H. Axial oxygen-centered lattice instabilities in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$: An application of the analysis of extended x-ray-absorption fine structure in anharmonic systems. // *Phys. Rev. B*, 1992, vol. 45, No 5, p. 2447-2457.
- [16] Jorgensen J.D., Beno M.A., Hinks D.G., Soderholm L., Volin K.J., Hitterman R.L., Grace J.D., Schuller I.K., Segre C.U., Zhang K., Kleefisch M.S. Oxygen ordering and the orthorhombic-to-tetragonal phase transition in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. // *Phys. Rev. B*, 1987, vol. 36, No 7, p. 3608-3616.
- [17] Röhler J. Evidence from EXAFS for an axial oxygen centered lattice instability in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$? In: Kaldis E. (ed.), *Materials and crystallographic aspects of HT_c-superconductivity*. The Netherlands, Kluwer Academic Publishers, 1994, p. 353-372.
- [18] Сайко А.П., Гусаков В.Е. О причине образования двух сверхпроводящих фаз в иттрий-бариевых купратах. // *ЖЭТФ*, 1995, том 108, No 2(8), с. 757-764.
- [19] Zinenko V.I., Aleksandrov K.S. Theoretical description of order-disorder transitions in crystals with several ordering sublattices. // *Solid State Comm.*, 1977, vol. 22, p. 527-529.
- [20] Prelovšek P., Pirc R. CPA approach to the random Ising model in a transverse field. // *J. Phys. C*, 1977, vol. 10, p. 861-873.
- [21] Стасюк И.В., Коцур С.С. Учет кристаллического поля окружения в методе когерентного потенциала. // *Физическая электроника*, Изд-во при Львов. ун-те, 1979, том 18, с. 6-13.

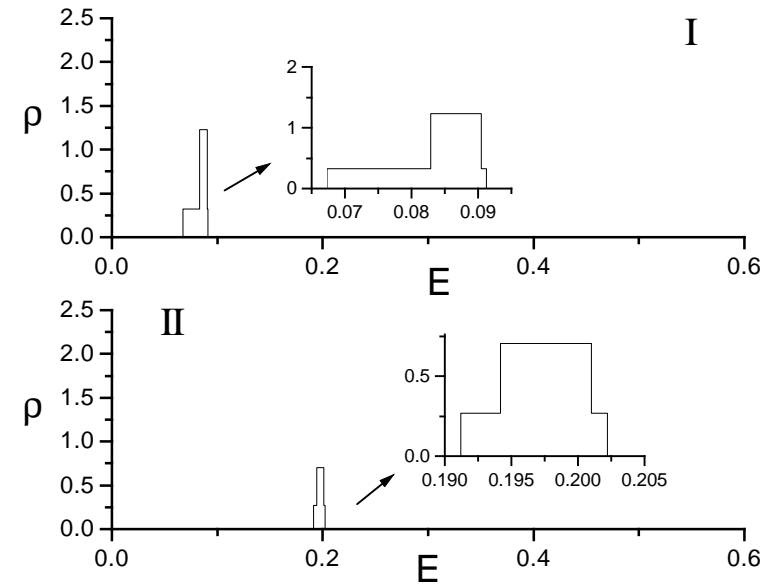


Рис. 1: Густина станів псевдоспінових збуджень при $c = 1$, $\Theta = 0,25$ (неполярна фаза), $h = 0,1$, $\Omega = 0,05$ та $a = 0,5$ (I) і $a = -0,5$ (II).

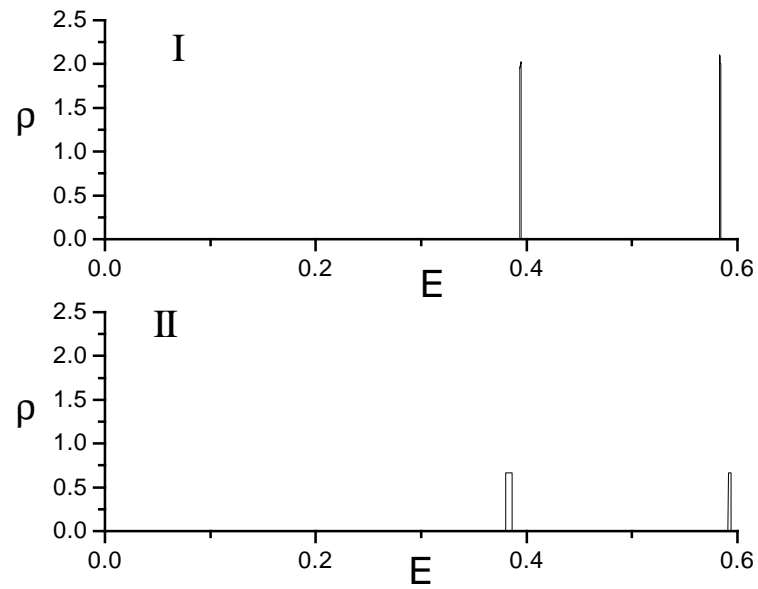


Рис. 2: Густина станів псевдоспінових збуджень при $c = 1$, $\Theta = 0,1$ (полярна фаза), $h = 0,1$, $\Omega = 0,05$ та $a = 0,5$ (I) і $a = -0,5$ (II).

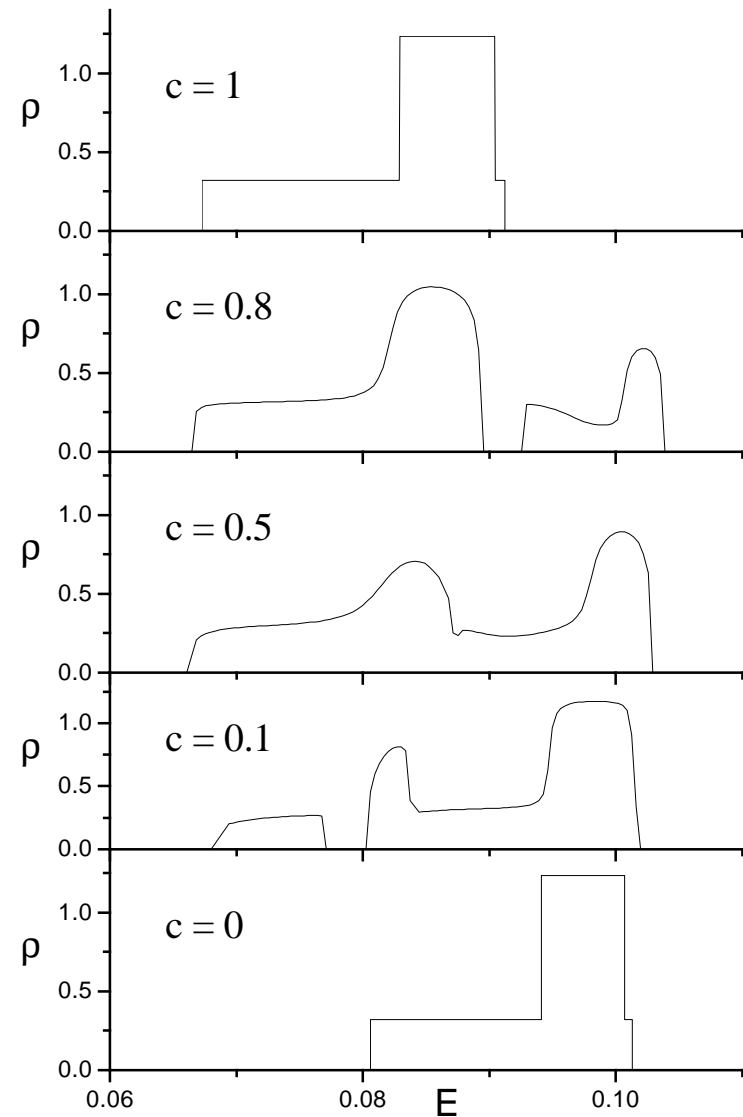


Рис. 3: Густина станів псевдоспінових збуджень при $a = 0,5$, $\Theta = 0,25$ (неполярна фаза), $h = 0,1$, $h_{imp} = 0,12$, $\Omega = 0,05$ для різних значень концентрації.

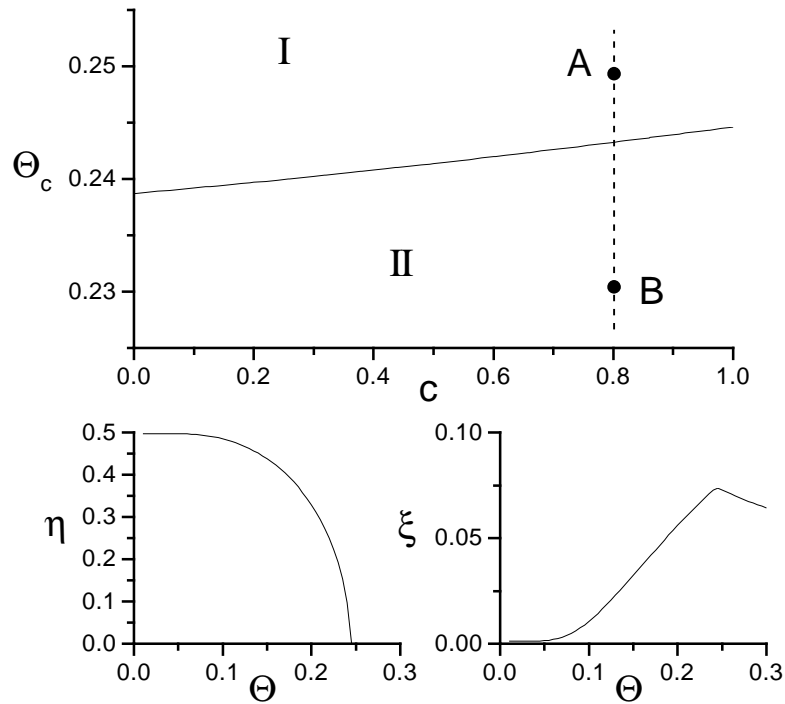


Рис. 4: Фазова діаграма Θ_c - c при $a = 0,5$, $h = 0,1$, $h_{imp} = 0,15$, $\Omega = 0,05$ (неполярна (I) і полярна (II) фази розділені лінією ФП 2-го роду). Внизу зображено залежність параметрів η і ξ від температури Θ в точці $c = 0,8$.

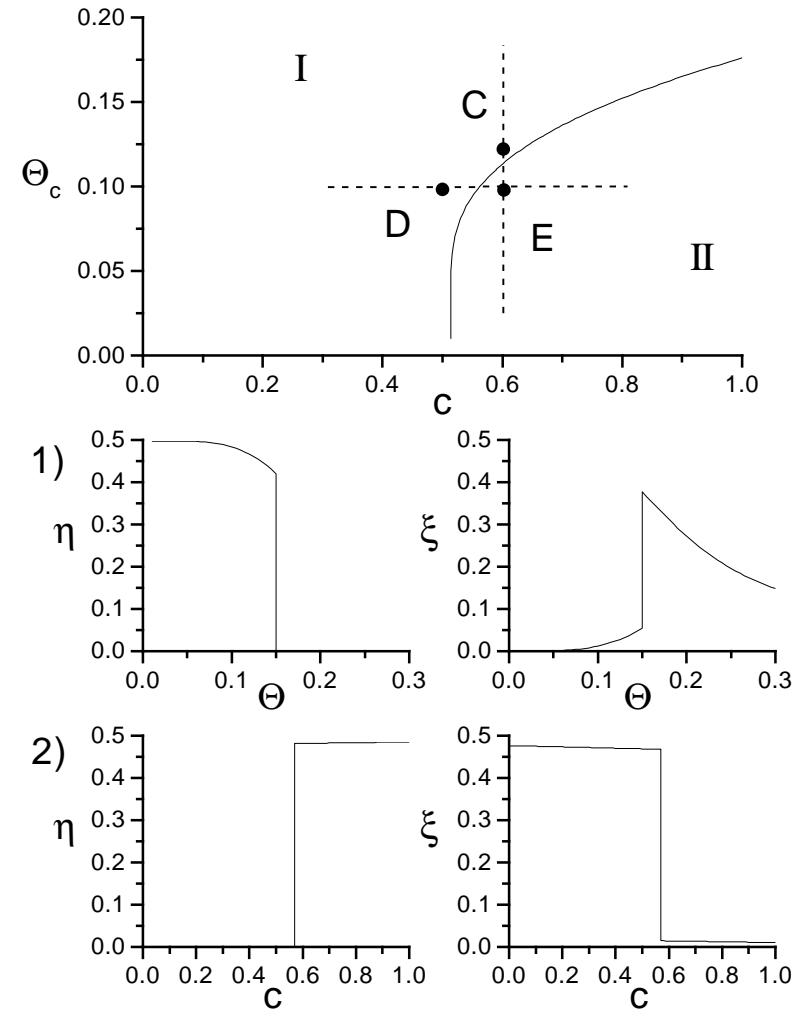


Рис. 5: Фазова діаграма Θ_c - c при $a = -0,5$, $h = 0,1$, $h_{imp} = 0,15$, $\Omega = 0,05$ (неполярна (I) і полярна (II) фази розділені лінією ФП 1-го роду). Внизу зображено залежність параметрів η і ξ :

- 1) від температури Θ при $c = 0,6$;
- 2) від концентрації c при $\Theta = 0,1$.

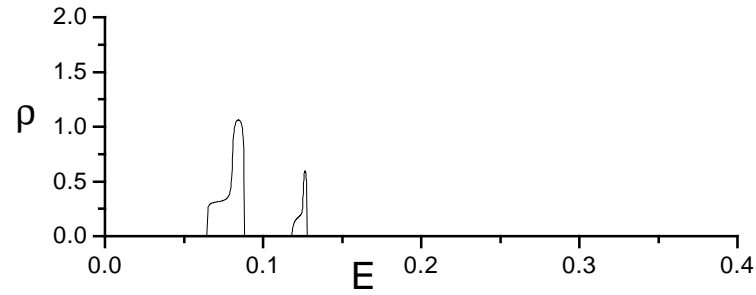


Рис. 6: Густина станів псевдоспінових збуджень при $a = 0,5$, $\Theta = 0,25$, $c = 0,8$, $h = 0,1$, $h_{imp} = 0,15$, $\Omega = 0,05$ (т-ка А на рис. 4 — неполярна фаза),

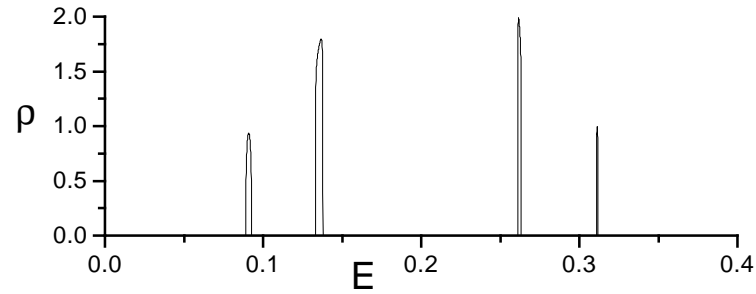


Рис. 7: Густина станів псевдоспінових збуджень при $a = 0,5$, $\Theta = 0,23$, $c = 0,8$, $h = 0,1$, $h_{imp} = 0,15$, $\Omega = 0,05$ (т-ка В на рис. 4 — полярна фаза),

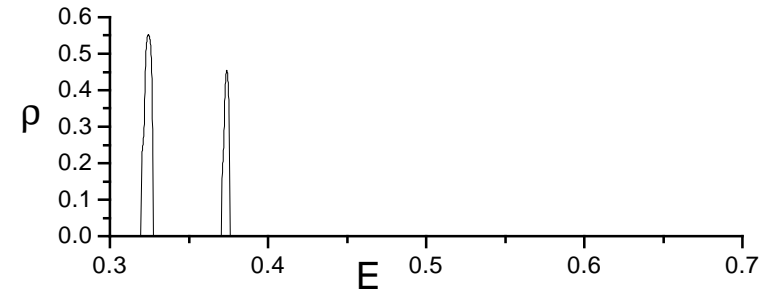


Рис. 8: Густина станів псевдоспінових збуджень при $a = -0,5$, $\Theta = 0,12$, $c = 0,6$, $h = 0,1$, $h_{imp} = 0,15$, $\Omega = 0,05$ (т-ка С на рис. 5 — неполярна фаза),

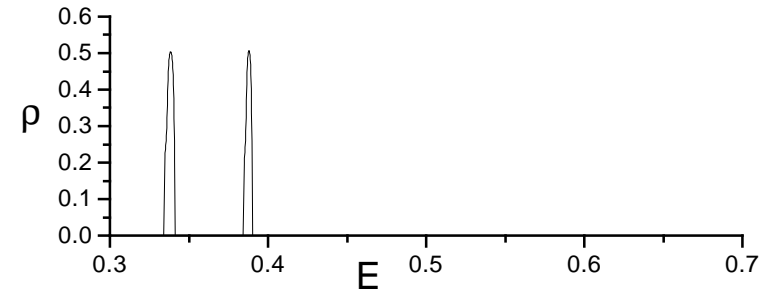


Рис. 9: Густина станів псевдоспінових збуджень при $a = -0,5$, $\Theta = 0,1$, $c = 0,5$, $h = 0,1$, $h_{imp} = 0,15$, $\Omega = 0,05$ (т-ка D на рис. 5 — неполярна фаза),

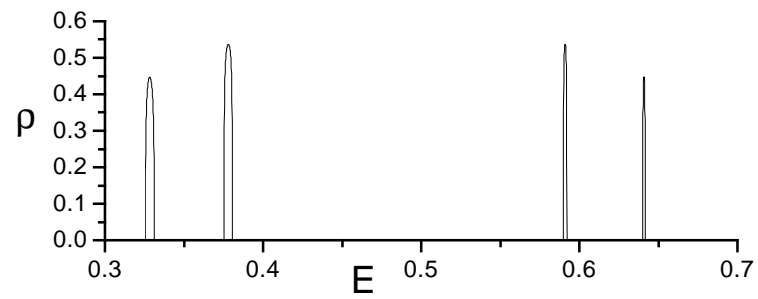


Рис. 10: Густина станів псевдоспінових збуджень при $a = -0,5$, $\Theta = 0,1$, $c = 0,6$, $h = 0,1$, $h_{imp} = 0,15$, $\Omega = 0,05$ (т-ка E на рис. 5 — полярна фаза),

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Васильович Стасюк
Олег Володимирович Величко

СПЕКТР ПСЕВДОСПІНОВИХ ЗБУДЖЕНЬ В МОДЕЛІ МІЦУЇ У
СИМЕТРИЧНОМУ ПОЗДОВЖНЬОМУ ВИПАДКОВОМУ ПОЛІ.

Роботу отримано 13 жовтня 1997 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені