

Фрактальный характер спектра в окрестности локальной моды в линейных цепочках с изотопическими примесями

М.А. Иванов, В.С. Молодид, Ю.В. Скрипник

Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины, пр. Вернадского, 36, г. Киев, 03142, Украина
E-mail: ivanov@imp.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 13 февраля 2004 г.

Численно рассчитан колебательный спектр одномерной неупорядоченной цепочки атомов с легкими изотопическими примесями замещения в окрестности частоты локального колебания изолированного атома примеси. Показано, что во всей доступной расчету области частот спектр действительно обладает характерными особенностями фрактала. Рассмотрены серии линий, сгущающихся к линиям изолированного атома примеси, двух и трех примесных атомов. Показано, что в этих случаях самоподобная структура сохраняется при произвольных уменьшениях масштаба как вне, так и внутри области концентрационного уширения.

Чисельно розраховано коливальний спектр одновимірного неупорядкованого ланцюжка атомів з легкими ізотопічними домішками заміщення поблизу частоти локального коливання ізольованого атома домішки. Показано, що во всій доступній для розрахунку області частот спектр дійсно має характерні особливості фрактала. Розглянуто серію ліній, які сгущуються до ліній ізольованого атома домішки, двох та трьох домішкових атомів. Показано, що у цих випадках самоподібна структура зберігається при довільних зменшеннях масштабу як поза, так і усередині області концентраційного поширення.

PACS: 63.22+m

1. Введение

В работе [1] нами были выполнены численные расчеты колебательного спектра одномерной неупорядоченной цепочки атомов с легкими изотопическими примесями замещения. Результаты численного моделирования сопоставлены с простыми аналитическими оценками для спектрального распределения частот в окрестности локального колебания изолированного атома примеси и показано, что сглаженную плотность состояний в этой области с достаточной степенью точности можно найти из соображений, основанных на выделении кластеров из двух примесных атомов, расположенных на разных расстояниях. Полученные аналитические выражения находятся в удовлетворительном согласии с численными расчетами как вне, так и внутри области концентрационного уширения локальной моды.

Сложная иерархическая структура колебательного спектра в окрестности локальной моды вне об-

ласти концентрационного уширения впервые подробно проанализирована И.М. Лифшицем [2,3]. В то же время считалось, что внутри области концентрационного уширения [4–7] плотность состояний является достаточно плавной функцией. В [1], однако, было обращено внимание на тот факт, что для одномерных систем и внутри области концентрационного уширения полностью сохраняется иерархическая структура спектра. Кроме того, спектр в окрестности локальной моды является самоподобным по отношению к изменению масштаба, т.е. имеет фрактальный характер.

В настоящей работе основное внимание уделено более подробному анализу тонкой структуры колебательного спектра в указанной области. Используя численные расчеты, основанные на методе Дина [8,9], показано, что вплоть до предельно достижимого для используемого метода разрешения спектр действительно обладает характерными особенностями фрактала. Так, на частоте колебаний изолиро-

ванного атома примеси основной пик состоит из линий, соответствующих двум, трем, четырем и более сложным комбинациям взаимодействующих примесей, каждая из которых, в свою очередь, тоже самоподобна. При возможно широком изменении масштабов исследована тонкая структура спектра основного пика, пиков, соответствующих двум, а также трем примесным атомам.

2. Самоподобие спектра парных примесных мод в окрестности частоты локального колебания

Согласно [3], колебательный спектр вблизи локальной моды при низкой концентрации примесей состоит из серий дискретных линий, причем более интенсивные линии спектра являются точками сгущения менее интенсивных. При этом, как показано в [10], те из них, которые вследствие взаимодействия дефектов отщепились от локальной моды на достаточно широкий интервал частот, удается успешно отнести на счет практически изолированных колебаний небольших по размеру примесных кластеров. Основная серия этих линий, сгущающаяся к частоте локальной моды, соответствует колебаниям пар примесей. Очевидно, что чем ближе атомы примеси друг к другу, тем большим интервалом отделены от центрального пика обе парные моды. Для рассматриваемой здесь модели изотопической примеси замещения небольшие отклонения Δ квадратов частот ω_R^2 таких парных мод от квадрата частоты изолированной примеси ω_L^2 приближенно описываются следующим выражением [11,12]:

$$\omega_R^2 = \omega_L^2 \pm \Delta(R), \quad \Delta(R) \approx A^R \frac{2\varepsilon^2}{(1 - \varepsilon^2)^2},$$

$$A = \frac{1 - \varepsilon}{1 + \varepsilon}, \quad \Delta(R) \ll \omega_L^2 - 1, \quad (1)$$

где $\varepsilon = (m_0 - m_d)/m_0$, m_0 и m_d — массы основного и примесного атомов соответственно, а максимальная частота акустической зоны принята за единицу, так что $\omega_L^2 = 1/(1 - \varepsilon^2)$. Для легкой примеси замещения $m_d < m_0$, поэтому $0 < \varepsilon < 1$ и $0 < A < 1$. Из (1) получаем, что

$$\Delta(R + 1) = A\Delta(R). \quad (2)$$

Поскольку $A < 1$, из уравнения (2) следует, что по мере приближения к локальной моде частотные интервалы между последовательными парными модами уменьшаются. Кроме того, при условии постоянства интенсивности соответствующих линий спектра общая картина их распределения не изменится при изменении масштаба в A раз. Таким образом, на

основании (2) можно говорить о наличии свойства самоподобия у спектра парных мод.

На рис. 1 приведены результаты численного расчета тонкой структуры колебательного спектра неупорядоченной цепочки при $\varepsilon = 0,5$ и концентрациях $c = 0,1$ и $c = 0,02$ (закрашенная область). Здесь и далее результаты получены при численном моделировании цепочек длиной в 10^8 атомов. Так называемая область концентрационного уширения локальной моды задается величиной расщепления парных примесных мод, соответствующей среднему расстоянию между примесями в цепочке, и ранее была определена как $\Delta_c = \Delta(1/2c)$. (Коэффициент 2 в этой формуле связан с тем, что интегральная плотность состояний для всех парных мод, у которых расстояние между примесными атомами меньше некоторого значения, равна $2c^2R_1$. Поэтому эта величина становится порядка всего числа примесных уровней c как раз при $R_1 \approx 1/(2c)$.) В случае $c = 0,02$ все графики,

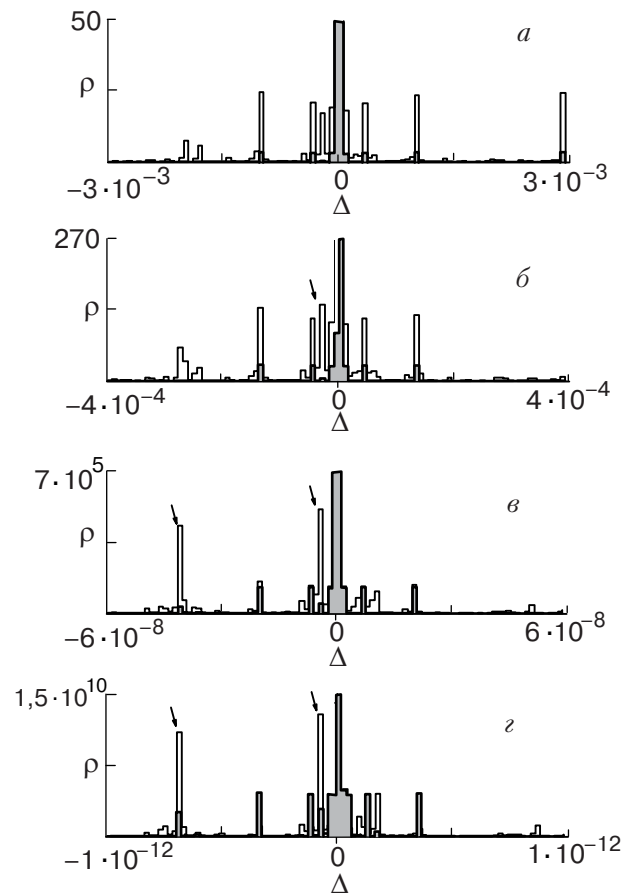


Рис. 1. Тонкая структура колебательного спектра неупорядоченной цепочки атомов вблизи частоты локального колебания при $\varepsilon = 0,5$ и концентрациях $c = 0,1$ и $c = 0,02$ (закрашенная область). По вертикальной оси отложена плотность состояний, нормированная на единицу, по горизонтальной оси — расстояние от частоты изолированной примеси в квадратах частот.

кроме последнего, отвечают области вне концентрационного уширения (для $c = 0,02$ область концентрационного уширения $\Delta_c \approx 10^{-12}$). Как видно на рисунке, спектр состоит в основном из парных мод, и три первые гистограммы, несмотря на изменение масштаба в $2 \cdot 10^5$ раз, практически одинаковы по структуре. Для концентрации $c = 0,1$ концентрационное уширение значительно больше: $\Delta_c \approx 4 \cdot 10^{-3}$. Поэтому самоподобие наблюдается не слишком глубоко внутри области концентрационного уширения (рис. 1,а,б). Глубоко же внутри области шириной Δ_c (рис. 1,в,г) спектр тоже сохраняет свойство самоподобия, но по своему виду отличается от предыдущих. На всех участках спектра при такой концентрации наряду с парными модами также четко видны некоторые моды, соответствующие более сложным комбинациям примесных атомов. Некоторые наиболее заметные из таких мод, соответствующих кластерам из трех взаимодействующих примесей, отмечены стрелками. Относительная интенсивность таких мод растет при приближении к ω_L , так что глубоко внутри области шириной Δ_c плотность состояний почти полностью состоит из пиков, соответствующих комбинациям из трех и более примесных атомов.

Отметим, что расчеты производились и для других параметров системы, например при $\epsilon = 0,1$, и все качественные выводы, сделанные выше, при этом остаются справедливыми.

3. Колебательный спектр трехчастичного примесного кластера

Рассмотрим спектр колебаний изолированной группы атомов, состоящей из трех примесных центров. Положения линий этого спектра вне исходной акустической зоны ω_3^2 могут быть найдены как решения кубического уравнения, полученного на основе результатов работы [13]:

$$(\omega_3^2 - \omega_L^2)^3 - (\omega_3^2 - \omega_L^2)[\Delta(R_{01}) + \Delta(R_{02}) + \Delta(R_{12})] - 2\Delta(R_{01})\Delta(R_{02})\Delta(R_{12}) = 0, \quad (3)$$

где $\Delta(R)$ определено в (1), а R_{01} , R_{02} , R_{12} — расстояния между атомами 0, 1 и 2 в рассматриваемом кластере примесных атомов.

Возьмем два примесных атома (0 и 1), расположенных на фиксированном расстоянии R_{01} , и будем приближать к этой паре, для определенности со стороны атома 1, третий примесный атом. Очевидно, что при $R_{12} \gg R_{01}$ будут существовать две моды, слегка смещенные относительно частот, соответствующих изолированной паре примесей, и колебание

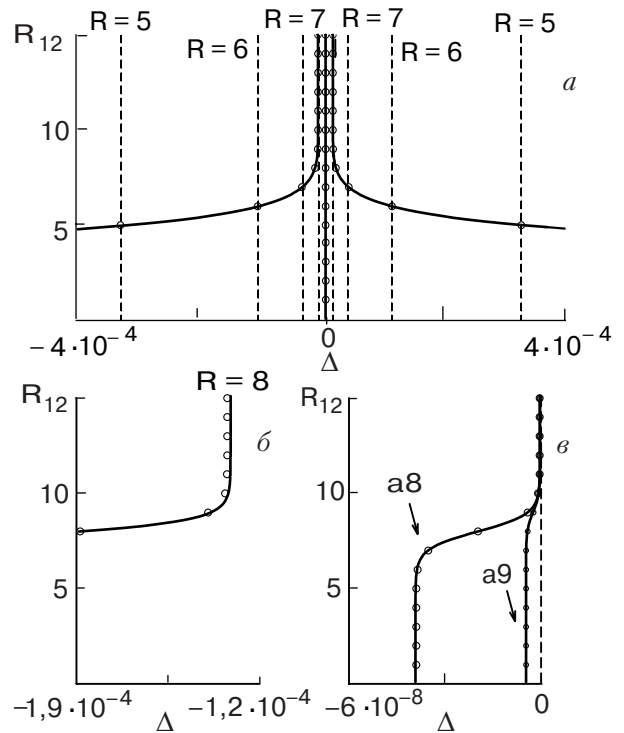


Рис. 2. Изменение положения спектральных линий при приближении третьего примесного атома к паре примесей, расположенной на расстоянии R_{01} . По горизонтальной оси отложено положение спектральных линий в шкале Δ , а по вертикальной — расстояние R_{12} . (O) — рассчитанные положения линий, сплошная линия — решение уравнения при непрерывном изменении величины R_{12} ; $R_{01} = 8$. Вертикальными пунктирными линиями показаны частоты парных уровней с соответствующими значениями расстояния R . Кривые, обозначенные как $a8$ и $a9$, показывают смещение центральных линий в тройках при $R_{01} = 8$ и $R_{01} = 9$.

с частотой, примерно равной ω_L . Такая структура спектра при $R_{01} = 8$ показана на рис. 2 (на рис. 2,в также показан случай $R_{01} = 9$), где по оси абсцисс отложено отклонение частоты колебания от частоты локальной моды, выраженное в квадратах частот Δ , а по оси ординат — расстояние R_{12} . Кружками показаны частоты, полученные в результате численных расчетов для дискретных значений R_{12} , сплошная линия — решение уравнения (3) при непрерывном изменении R_{12} .

Как видно на рис. 2,а, в случае, когда R_{12} заметно больше, чем расстояние между примесями в паре (в данном случае при $R_{12} \geq 10$), действительно получается указанная выше структура спектра (вертикальными пунктирными линиями на этом рисунке показаны значения частот парных мод, соответствующие разным значениям R в (1)). Более подробно смещения левой и центральной линий по мере уменьшения R_{12} показаны на рис.2,б,в.

При приближении третьей примеси к исходной паре, когда $R_{12} < R_{01}$, структура спектра существенно не меняется: две крайние моды расположены практически симметрично относительно ω_L^2 на частотах, соответствующих ближайшей паре с расстоянием R_{12} , а третья слабо смещена относительно частоты локальной моды. При дальнейшем уменьшении R_{12} величина смещения центрального уровня выходит на некоторое постоянное для ряда R_{12} значение. Поэтому можно полагать, что интенсивность такой моды, отвечающей трем примесям, будет аномально большой. Для данной конфигурации ($R_{01} = 8$) положение этой моды на рис. 3 обозначено как $a8$, и она расположена между частотами парных колебаний, отвечающими $R = 15$ и $R = 16$ (линия $R = 15$ на рис. 3 не показана, поскольку находится слева от приведенной оси ординат). При этом для концентрации $c = 0,1$ ее интенсивность заметно превышает интенсивность соседних парных мод. Для исходной же конфигурации $R_{01} = 9$ положение соответствующей центральной моды в тройке ($a9$) находится между уровнями $R = 17$ и $R = 18$ (рис. 3). Отметим, что линии $a8$ и $a9$ смещены относительно локального уровня в сторону исходной зоны.

Небольшие смещения уровней пары при приближении к ней третьей примеси, пока $R_{12} \gg R_{01}$, как раз и являются одной из причин появления тонкой структуры парных уровней.

4. Фрактальные свойства тонкой структуры мод, соответствующих двум и трем примесным центрам

Остановимся более подробно на поведении спектра вблизи отдельных парных мод. На рис. 4 показана тонкая структура парной моды, соответствующей $R = 4$ и расположенной между основной зоной и локальной модой, при $c = 0,1$. При таком расстоянии между примесями в паре и выбранной концентра-

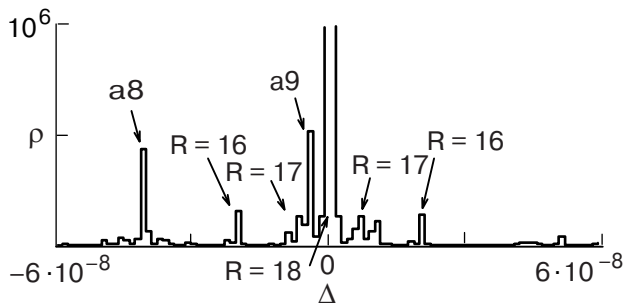


Рис. 3. Участок спектра в окрестности локального уровня ($\epsilon = 0,5, c = 0,1$). Стрелками обозначены парные уровни, отвечающие $R = 17$ и $R = 18$. Частоты смещенных центральных линий, соответствующих трем примесным атомам, при $R_{01} = 8$ и $R_{01} = 9$ обозначены как $a8$ и $a9$.

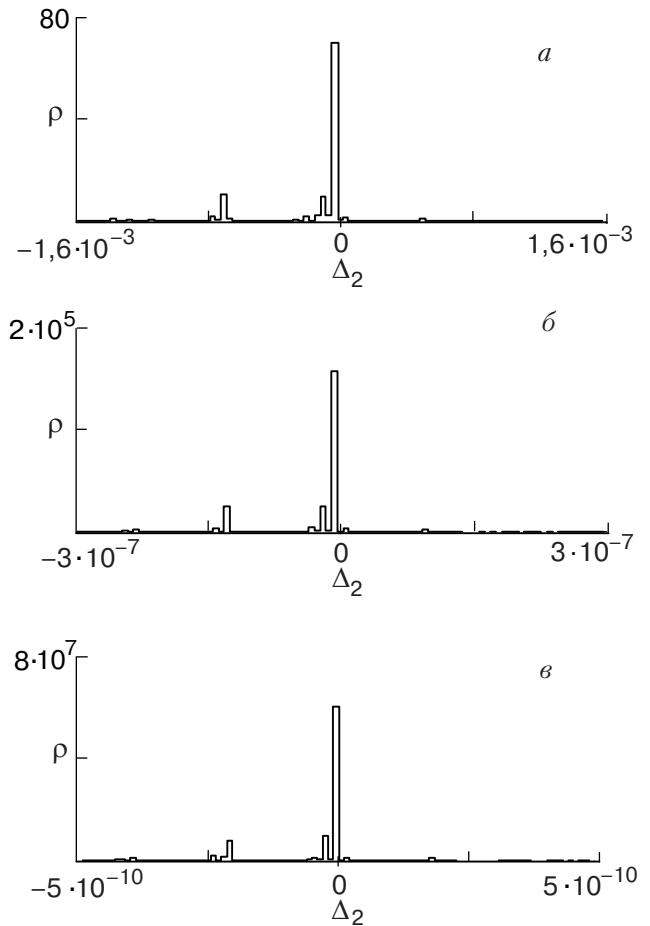


Рис. 4. Тонкая структура парной моды, отвечающей $R = 4$ и расположенной со стороны основной зоны относительно частоты изолированной примеси ($\epsilon = 0,5, c = 0,1, \omega_L^2 = 4/3$). По горизонтальной оси отложена величина $\Delta_2 = \omega^2 - \omega_R^2, \omega_R^2 = 1,3217394506$.

ции частота этой моды находится вне области концентрационного уширения локального колебания ($\Delta_c \approx 4 \cdot 10^{-3}$). Но при увеличении масштаба, как видно на рис. 4, в, удается рассмотреть окрестность парного уровня, значительно меньшую, чем указанная величина концентрационного уширения. Однако для колебательного спектра свойство самоподобия все же продолжает сохраняться. Фрактальный характер имеет и тонкая структура спектра парной моды, расположенной внутри области концентрационного уширения. Это видно на примере, представленном на рис. 5, где изображен спектр в окрестности парной моды, частота которой больше, чем частота колебаний изолированной примеси, и соответствующей $R = 20$ для цепочки с такими же параметрами.

Представляет интерес рассмотреть тонкую структуру мод, отвечающих кластерам из большого числа примесных атомов. Так, на рис. 6, а, б изображен спектр вблизи моды, соответствующей трем примесным центрам, которые расположены на расстояниях

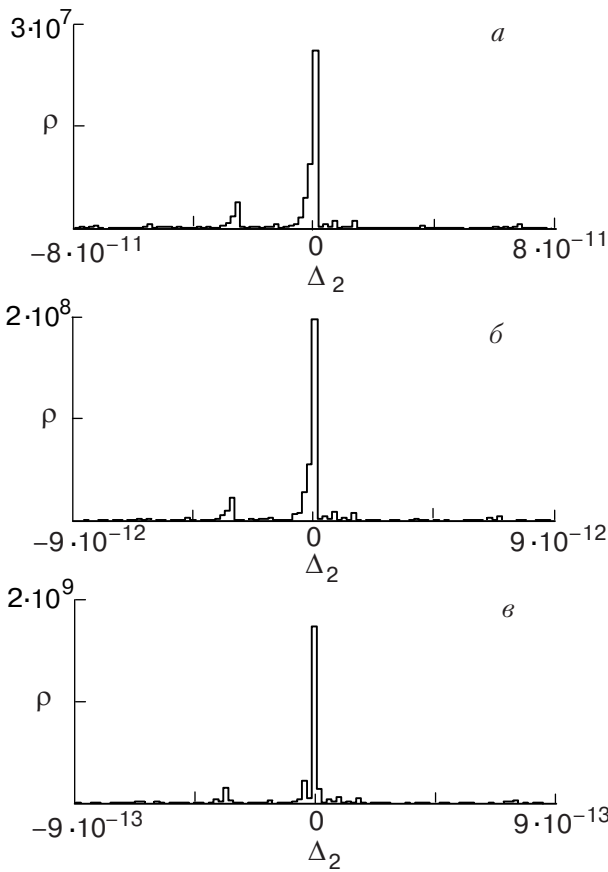


Рис. 5. Структура парного уровня внутри области концентрационного уширения. $R = 20$ (противоположная от основной зоны область). $\omega_R^2 = 1,3333333335883$. Остальные параметры и обозначения, как на рис. 4.

$R_{01} = 3, R_{12} = 4$ при $c = 0,1$ и $\epsilon = 0,5$. Как видно на этом рисунке, даже тонкой структуре моды трех примесных атомов присуща высокая степень самоподобия при изменении масштаба. Для сравнения на рис. 6, в показан перестроенный в другом масштабе участок спектра, изображенный на рис. 5, а и отвечающий линиям, сгущающимся к парной моде. Видно, что даже участки спектра, отвечающие разным иерархическим уровням, в значительной степени оказываются самоподобными. Этот факт, вместе с самоподобием в рамках одной иерархической структуры, указывает на фрактальный характер всего спектра колебаний неупорядоченной линейной цепочки вблизи локальной моды.

Рассмотрение мод, которые соответствуют изолированным колебаниям еще большего числа примесных центров, не представляется возможным, так как требует слишком длинных генерируемых цепочек.

4. Заключение

Проведен расчет колебательных спектров неупорядоченных линейных цепочек атомов вблизи ис-

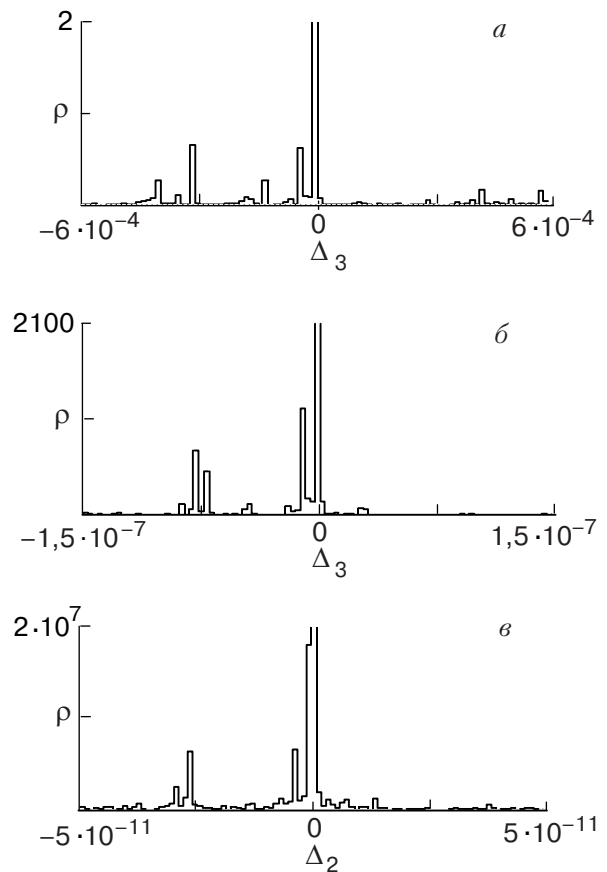


Рис. 6. Тонкая структура уровня, который соответствует трем примесным атомам, расположенным на расстоянии $R_{01} = 3, R_{12} = 4$ (уровень, ближайший к зоне с частотой $\omega_3^2 = 1,29466407$). По горизонтальной оси отложена величина $\Delta_3 = \omega^2 - \omega_3^2$ (а), (б). Участок спектра, изображенный на рис. 5, а, но перестроенный в другом масштабе (в).

ходной локальной моды. Показано, что спектр в этой области имеет четкую иерархию и обладает свойством самоподобия, характерным для фрактала. Рассмотрена тонкая структура мод, соответствующих изолированной примеси, двум и трем примесным центрам. При всех доступных в данной работе изменениях масштаба общий вид спектра вблизи этих мод остается неизменным — центральная мода, к которой сгущаются линии меньшей интенсивности. При этом оказывается, что интервал между ближайшими частотами тонкой структуры пропорционален величине интервала между этими частотами и центральным пиком.

Конечно, если рассматривать термодинамические величины (теплоемкость, рассеяние нейтронов), то уширение линий локальных колебаний [14–17] будет заведомо больше, чем та тонкая структура спектра, которая рассматривается в этой работе. Однако для кинетических процессов, таких как прохождение звука через цепочки, тонкая структура может оказывать весьма существенное влияние. Поэтому

представляет интерес рассмотреть аналогичные эффекты также для электронного спектра цепочки.

Авторы выражают благодарность А.М. Косевичу за полезное обсуждение.

1. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, В.С. Молодид, *ФНТ* **30**, 217 (2004).
2. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **44**, 1723 (1963).
3. И.М. Лифшиц, *УФН* **83**, 617 (1964).
4. М.Н. Ботвинко, М.А. Иванов, Ю.Г. Погорелов, *ЖЭТФ* **70**, 610 (1976).
5. И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1982).
6. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, *ФТТ* **32**, 2965 (1990).
7. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, *ФТТ* **34**, 351 (1992).
8. P. Dean, *Proc. Roy. Soc.* **A254**, 507 (1960).
9. P. Dean, *Proc. Roy. Soc.* **A260**, 263 (1961).
10. P. Dean, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 127 (1972).
11. A.A. Maradudin, E.W. Montroll, and G.H. Weiss, *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, Academic Press (1963).
12. E.W. Montroll, A.A. Maradudin, and G.H. Weiss, *Proceedings of the Stevens Institute Many Body Conference, Interscience* (1964).
13. М.А. Иванов, *ФТТ* **12**, 1895 (1970).
14. М.А. Кривоглаз, *ЖЭТФ* **40**, 567 (1961).
15. М.А. Иванов, Л.Б. Квашнина, М.А. Кривоглаз, *ФТТ* **7**, 2047 (1965).
16. М.А. Иванов, М.А. Кривоглаз, Д.Н. Мирлин, И.И. Решина, *ФТТ* **8**, 192 (1966).
17. A.A. Maradudin, *Theoretical and Experimental Aspects of the Effects of Point Defects and Disorder on the Vibrations of Crystals*, Academic Press (1966).

Fractal character of spectrum near a local mode in linear chains with isotopic impurities

M.A. Ivanov, V.S. Molodid, and Yu.V. Skripnik

The acoustic spectrum of an one-dimensional disordered system with light isotope impurities has been calculated numerically near the frequency of a local mode. It is shown, that the spectrum has the characteristic properties of the fractal in the calculated frequency region. Series of lines thickening towards individual, pair and triple of impurities are described. It is shown, that the self-similar structure persists at arbitrary scaling down both outside and inside the region of concentration broadening.