

Локальные колебания в кристаллических решетках с односвязной областью квазинепрерывного фононного спектра

А.В. Котляр, С.Б. Феодосьев

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина*

E-mail: kotlyar@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 19 сентября 2005 г., после переработки 7 октября 2005 г.

Показано, что использование классификации колебаний, принятой в методе якобиевых матриц и являющейся наиболее естественной для описания локализованных состояний, приводит к чрезвычайно быстрой сходимости функций Грина для частот, расположенных вне полосы квазинепрерывного спектра кристалла. Это позволило получить достаточно общие аналитические выражения для условий образования и характеристик локальных колебаний, обусловленных наличием легких примесных атомов в кристаллической решетке, область квазинепрерывного фононного спектра которой односвязна. Точность определения с помощью данных выражений частот и интенсивностей локальных колебаний проиллюстрирована на примерах легких примесей замещения (изотопических и слабосвязанных) в плотноупакованных структурах (ГЦК и ГПУ), а также изолированных пар изотопических примесей в ГЦК кристаллической решетке. Полученные результаты могут, в частности, быть использованы для простого и весьма точного вычисления параметров основной решетки и дефекта по известным величинам локальных частот.

Показано, що використання класифікації коливань, яка прийнята в методі якобійових матриць та є найбільш природною для описання локалізованих станів, призводить до надзвичайно швидкої збіжності функцій Гріна для частот, розташованих поза смугою квазібезперервного спектра кристала. Це дозволило отримати досить загальні аналітичні вирази для умов утворення та характеристик локальних коливань, що обумовлені наявністю легких домішкових атомів в кристалічній ґратці, область квазібезперервного фононного спектра якої однозв'язна. Точність визначення за допомогою даних виразів частот та інтенсивностей локальних коливань проілюстровано на прикладах легких домішків заміщення (ізотопічних та слабкозв'язаних) в щільноупакованих структурах (ГЦК та ГПУ), а також ізольованих пар ізотопічних домішок у ГЦК кристалічній ґратці. Отримані результати можуть, зокрема, бути використані для простого й досить точного обчислення параметрів основної ґратки й дефекту по відомих величинах локальних частот.

PACS: 63.20.-e

Ключевые слова: кристаллическая решетка, фононный спектр, функция Грина, якобиева матрица, локальное колебание

Введение

Дискретные уровни, возникающие за пределами полосы квазинепрерывного фононного спектра идеальной решетки при внедрении в кристалл легких или сильно связанных примесей, известны и изучаются как теоретически, так и экспериментально уже

около шестидесяти лет. Амплитуды соответствующих колебаний, получивших название локальных, быстро убывают по мере удаления от дефекта, и на расстояниях от примесного атома, существенно превышающих характерный радиус межатомного взаимодействия в решетке, такое убывание можно считать экспоненциальным. Результаты ставших

классическими работ И.М. Лифшица и его школы [1–6], в которых была развита теория регулярных вырожденных возмущений и в ее рамках получены замкнутые выражения для изменения фононного спектра кристалла локальными дефектами, в том числе для частот локальных колебаний, изложены практически во всех учебниках по динамике кристаллической решетки, например, [7–11].

За прошедшее время были разработаны методики экспериментального исследования локальных колебаний, из которых наиболее эффективными и часто применяемыми являются нейтронография, спин-решеточная релаксация, оптическая и микроконтактная спектроскопия, что позволило обнаружить такие колебания в целом ряде твердых растворов (см., например, [10,12,13]). Теоретически изучалась трансформация в кристаллах с конечной концентрацией примесных атомов локальных уровней в квазичастичных спектрах (фононных, электронных и др.) в примесные зоны [14–17]. С развитием методов нелинейной динамики появились работы, посвященные влиянию на локальные колебания решеточных ангармонизмов (см., например, [18]).

Однако до настоящего времени даже в рамках гармонического приближения для модели кристаллической решетки с изолированным дефектом не получены достаточно адекватные выражения для описания условий возникновения и основных характеристик локальных колебаний (таких как локальная частота и амплитуда самого примесного атома на этой частоте, а также затухание амплитуды локального колебания по мере удаления от примеси).

В настоящей работе соответствующие аналитические выражения получены для случая легких (изотопических и слабосвязанных) примесей замещения в кристаллах, полоса квазинепрерывного спектра которых односвязна. Результаты подробно проанализированы для плотноупакованных решеток, когда при описании межатомного взаимодействия можно ограничиться центральным взаимодействием ближайших соседей. В широком частотном диапазоне полученные формулы описывают характеристики локальных колебаний с высокой точностью и могут служить для определения параметров основной решетки и примеси по измеряемым экспериментально локальным частотам.

1. Аппроксимирующие выражения для характеристик локальных колебаний

Уравнение гармонических колебаний системы взаимодействующих осцилляторов (не обязательно кристаллически упорядоченной) можно записать в операторном виде, как задачу на собственные значения некоторого оператора \hat{L} (см, например, [7,8,11]):

$$(\hat{L} - \lambda \hat{I}) \vec{\psi} = 0. \quad (1)$$

В (1) векторное поле $\vec{\psi}(\mathbf{r})$ есть перенормированное поле атомных смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$

$$u_i(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\Psi_i(\mathbf{r})}{\sqrt{m(\mathbf{r})}} e^{i\omega t} \quad (2)$$

рассматривается как некоторое векторное пространство, которое мы будем обозначать H , т.е. $\vec{\psi}_p \equiv (\mathbf{r}_p; \psi(\mathbf{r}_p)) \in H$. Размерность этого пространства, в общем случае, равна произведению числа атомов системы N на q — число степеней свободы каждого атома*. В (2) величина $u_i(\mathbf{r}, t)$ — i -я компонента вектора смещения атома с радиус-вектором \mathbf{r} в момент времени t ; $m(\mathbf{r})$ — масса этого атома; $\lambda = \omega^2$ — квадрат частоты собственного колебания, собственное значение оператора \hat{L}

$$L_{ik}^{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} = \frac{\Phi_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\sqrt{m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')}}, \quad (3)$$

действующего в том же пространстве H ($\Phi_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — матрица силовых постоянных).

Колебания кристаллической решетки, содержащей изолированный точечный дефект, описываются оператором $\hat{L} = \hat{L}_0 + \hat{\Lambda}$, где оператор \hat{L}_0 описывает колебания невозмущенной (идеальной) решетки, а оператор $\hat{\Lambda}$ — вносимое дефектом возмущение. Дискретные локальные уровни удовлетворяют уравнению Лифшица, которое можно записать в операторном виде следующим образом (см, например, [11]):

$$\det \|\hat{I} - \hat{G}_0(\lambda) \hat{\Lambda}\| = 0. \quad (4)$$

Здесь \hat{I} — единичный оператор, а $\hat{G}_0(\lambda)$ — гриновский оператор невозмущенной решетки, который для произвольного оператора \hat{L} определяется как

$$\hat{G}(\lambda) \equiv (\lambda \hat{I} - \hat{L})^{-1}. \quad (5)$$

Если матрица оператора $\hat{\Lambda}$ имеет конечный ранг, то возмущение называется вырожденным и в этом случае уравнение (4) можно решить. Ранг данной

* Векторы пространства H будут обозначаться стрелочками над соответствующим символом, в отличие от обычных трехмерных векторов, которые по-прежнему обозначаются жирным шрифтом.

матрицы зависит не только от вида оператора возмущения, но и от выбора базиса. Традиционное представление колебаний кристаллической решетки в виде суперпозиции плоских волн необоснованно сужает область применимости уравнения Лифшица, так как ранг многих операторов возмущения, описывающих влияние точечного дефекта на колебания кристаллической решетки, конечный в координатном представлении, в \mathbf{k} -представлении становится бесконечным. Решение этого уравнения также затруднено из-за бесконечнократного вырождения собственных колебаний. Обойти данные трудности позволяет метод J -матриц [20,21], поскольку принятая в этом методе классификация колебаний наиболее удобна для описания связанных состояний, а спектры рассматриваемых в нем операторов являются простыми. Данный метод достаточно подробно изложен в [20–23], а также в Приложении к [24], где он применялся именно для описания локальных колебаний. Поэтому в настоящей работе приведены минимальные сведения о методе J -матриц, необходимые для понимания используемой терминологии и получаемых результатов.

1.1. Вычисление функции Грина методом J -матриц

В основе метода J -матриц лежит разбиение пространства колебаний H на сумму подпространств, каждое из которых задается выбором некоторого порождающего вектора $\vec{h}_0 \in H$, соответствующего определенному смещению какого-либо выделенного атома или группы атомов. В каждом из таких подпространств функция Грина $G(\lambda)$ – матричный элемент гриновского оператора $G(\lambda) \equiv G_{00}(\lambda) \equiv (\vec{h}_0, \hat{G}(\lambda)\vec{h}_0)$ представляется в виде цепной дроби, которая сворачивается к виду [22,23]:

$$G(\lambda) = \lim_{n \rightarrow \infty} G_{(n)}(\lambda); \quad (6)$$

$$G_{(n)}(\lambda) = \frac{Q_n(\lambda) - b_{n-1}Q_{n-1}(\lambda)K_\infty(\lambda)}{P_n(\lambda) - b_{n-1}P_{n-1}(\lambda)K_\infty(\lambda)}.$$

Функции $P_n(\lambda)$ – полиномы степени n , удовлетворяющие рекуррентному соотношению:

$$b_n P_{n+1}(\lambda) = (\lambda - a_n)P_n(\lambda) - b_{n-1}P_{n-1}(\lambda) \quad (7)$$

при начальных условиях:

$$P_{-1}(\lambda) = 0; \quad P_0(\lambda) = 1; \quad (8)$$

$Q_n(\lambda)$ – полиномы степени $n - 1$, удовлетворяющие тому же рекуррентному соотношению (7), но при начальных условиях:

$$Q_0(\lambda) = 0; \quad Q_1(\lambda) = b_0^{-1}. \quad (9)$$

Здесь a_n и b_n – соответственно диагональные и недиагональные элементы трехдиагональной якобиевой матрицы (J -матрицы) оператора, индуцированного оператором (3) в данном подпространстве. $K_\infty(\lambda)$ – функция, в которую сворачивается непрерывная дробь, соответствующая J -матрице, все элементы которой равны своим предельным значениям. Если порога сплошного спектра кристалла односвязна – $\lambda \in [0, \lambda_m]$, то

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = 2 \lim_{n \rightarrow \infty} b_n = \frac{\lambda_m}{2}, \quad (10)$$

и функция $K_\infty(\lambda)$ имеет вид

$$K_\infty(\lambda) = \frac{4}{\lambda_m^2} \{2\lambda - \lambda + 2Z(\lambda)\sqrt{\lambda|\lambda - \lambda_m|}\}, \quad (11)$$

$$Z(\lambda) \equiv i\Theta(\lambda)\Theta(\lambda_m - \lambda) - \Theta(\lambda - \lambda_m). \quad (12)$$

Функция $G_{(n)}(\lambda)$ является некоторым приближением функции Грина, точность которого определяется величиной n (порядком гюйгенсовской волны) и скоростью стремления с ростом этой величины матричных элементов к своим предельным значениям (10).

Любой элемент гриновского оператора $G_{mn}(\lambda)$ связан с функцией Грина простым соотношением:

$$G_{mn}(\lambda) = -P_m(\lambda)Q_n(\lambda) + P_m(\lambda)P_n(\lambda)G(\lambda); \quad (m \leq n). \quad (13)$$

Таким образом, выражения (6–13) полностью задают схему вычисления гриновского оператора системы.

Нормированная на единицу спектральная плотность

$$\rho_{(n)}(\lambda) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G_{(n)}(\lambda) = \frac{8}{\pi \lambda_m^2} \times$$

$$\times \frac{\sqrt{\lambda(\lambda_m - \lambda)}}{|P_n(\lambda) - b_{n-1}P_{n-1}(\lambda)K_\infty(\lambda)|^2} \cdot \Theta(\lambda)\Theta(\lambda_m - \lambda) \quad (14)$$

представляет собой часто применяемое в приближенных расчетах так называемое *регулярное* или *эллиптическое* распределение квадратов частот (см., например, [19]), модулированное некоторым полиномом степени $2n$. Легко видеть, что и функция (14), и следующая из (6) аппроксимация вещественной части функции Грина аналитичны внутри полосы сплошного спектра. Такая аппроксимация вещественной и мнимой частей функции Грина не может быть их точным выражением, так как в полосе непрерывного спектра данные функции аналитическими не являются. Хотя уже при сравнительно небольших n вещественная и мнимая части (6) на интервалах регулярности действительной и мнимой частей функции $G(\lambda)$ сходятся к истинным значени-

ям этих функций, но вблизи точек сингулярности (особенностей Ван Хова) отклонение (14) и (6) от этих истинных значений заметны даже при достаточно больших значениях n (см., например, [20]).

За пределами полосы сплошного спектра поведение функции Грина существенно проще. При $\lambda > \lambda_m$ функция $G(\lambda) \equiv \text{Re } G(\lambda)$ и может быть выражена через интеграл от спектральной плотности. Сингулярности будут сглажены, и вне полосы непрерывного спектра функция Грина будет аналитической.

Скорость сходимости этой функции с ростом n очень велика — аппроксимации (6) для $n = 1$ и больших n совпадают с высокой точностью, что отчетливо видно на рис. 1 и 2. На рис. 1 представлены зависимости от частоты ω вещественной части функции Грина $G_{(n)}(\omega) \equiv 2\omega G_{(n)}(\lambda)$ — кривые 2 и 2' (кривые 1 и 1' соответствующей спектральной плотности $\nu(\omega) = \pi^{-1} \text{Im} G(\omega)$ ГЦК кристаллической решетки с центральным взаимодействием между ближайшими соседями. Кривые 1 и 2 соответствуют $n = 60$ для ГЦК и $n = 36$ для ГПУ, а штриховые линии 1' и 2' — $n = 1$. Спектральные плотности $\rho(\omega)$ нормированы на единицу, а нормировка $\text{Re} G(\omega)$ определяется соотношением Крамерса–Кронига. Если при $\omega \in [0, \omega_m]$ между зависимостями, рассчитанными для $n = 1$ и для больших значений n , мало общего, то при $\omega > \omega_m$, за исключением очень узкой области вблизи границ полосы непрерывного спектра, кривые 2 и 2' **практически сливаются**.

На рис. 2 для частот $\omega \geq \omega_m$ приведены частотные зависимости величины Δ

$$\Delta \equiv \frac{G_{(1)}(\omega) - G_{(60)}(\omega)}{G_{(60)}(\omega)},$$

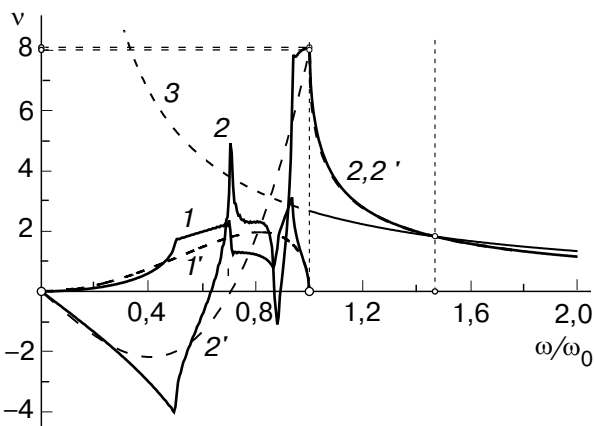


Рис. 1. Спектральные плотности (кривые 1 и 1') и вещественные части функций Грина (2 и 2') идеальной ГЦК кристаллической решетки с центральным взаимодействием ближайших соседей. Точка пересечения кривых (2) и (3) определяет локальную частоту, кривых (2') и (3) — ее аппроксимацию с помощью функции $G_{(1)}(\omega)$.

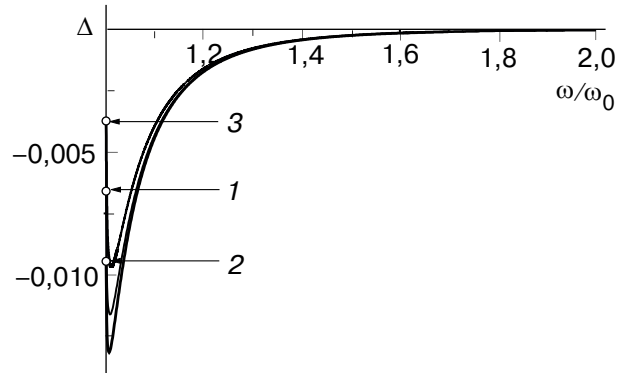


Рис. 2. Частотная зависимость величины Δ — относительного отклонения аппроксимации $G_{(1)}(\omega)$ от функции $G_{(60)}(\omega)$ для идеальных кристаллических решеток с центральным взаимодействием ближайших соседей: ГЦК (1); ГПУ (смещение вдоль оси a) (2); ГПУ (смещение вдоль оси c) (3).

т.е. относительного отклонения аппроксимации $G_{(1)}(\omega)$ от функции $G_{(60)}(\omega)$ для идеальных кристаллических решеток с центральным взаимодействием ближайших соседей: ГЦК (кривая 1) и ГПУ решетке для случая $c/a = \sqrt{8/3}$ (кривые 2 и 3 — порождающее смещение направлено вдоль осей a и c соответственно). Видно, что значения Δ изменяются от величин $\sim 1\%$ вблизи границы полосы сплошного спектра до величин $\sim 0,1-0,01\%$ на заметном удалении от нее.

Для определения локальной частоты, обусловленной наличием в кристалле легкой изотопической примеси замещения, уравнение Лифшица (4) можно записать в виде

$$G(\omega) \equiv S(\omega, \hat{\Lambda}) = \frac{2}{\varepsilon \omega}, \quad (15)$$

где ε — дефект массы примесного атома

$$\varepsilon \equiv \frac{\Delta m}{m} = \frac{m' - m}{m} \quad (16)$$

(m' и m — массы примеси и атома основной решетки соответственно). Пример графического решения уравнения Лифшица (15) приведен на рис. 1. Кривая 3 на этом рисунке соответствует функции $S(\omega, \varepsilon)$ для $\varepsilon = -0,75$ (примесь в 4 раза легче атома основной решетки). Значения ω , при которых эта кривая пересекает кривые $G_{(60)}(\omega)$ и $G_{(1)}(\omega)$ (т.е. величины соответствующих локальных частот), совпадают с точностью до величин $\sim 10^{-4}$.

Учет взаимодействия с более удаленными соседями, как видно на рис. 3, не ухудшает (а вблизи границы сплошного спектра даже улучшает) точность аппроксимации функции Грина величиной $G_{(1)}(\omega)$ при $\omega \geq \omega_m$. Таким образом, и в этом случае данная аппроксимация вполне пригодна для описания характеристик локальных колебаний.

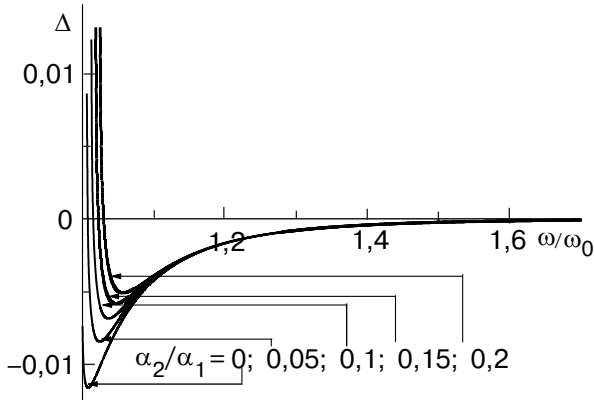


Рис. 3. Эволюция частотной зависимости $\Delta(\omega)$ с ростом взаимодействия со вторыми соседями (α_1 и α_2 — силовые константы первых и вторых соседей соответственно).

Заметим, что и для первых матричных элементов J -матрицы a_0 и b_0 , и для функции $G_{(1)}(\lambda)$ несложно получить аналитические выражения. Поэтому тот факт, что за пределами полосы непрерывного спектра функция $G_{(1)}(\lambda)$ с высокой точностью аппроксимирует функцию Грина, позволяет существенно продвинуться в изучении локальных уровней, в частности, написать сравнительно несложные аналитические выражения для частот и других характеристик локальных колебаний.

1.2. Локальные колебания в методе J -матриц

Если оператор $\hat{\Lambda}$ в рассматриваемом циклическом подпространстве представляется J -матрицей конечно-го ранга, то в этом подпространстве можно записать уравнение Лифшица [20,30,31], из которого можно определить условия образования и характеристики локальных колебаний (см., например, [24]).

Конструктивной альтернативой данному методу является в ряде случаев непосредственное нахождение полюсов функции Грина *возмущенной* системы, когда $G(\lambda) \equiv G_{00}(\lambda) = (\vec{h}_0, [\lambda \hat{I} - \hat{L}_0 - \hat{\Lambda}]^{-1} \vec{h}_0)$, т. е. с использованием в (6) J -матрицы оператора $\hat{L} = \hat{L}_0 + \hat{\Lambda}$. Этот способ пригоден и для определения локальных колебаний, обусловленных невырожденным оператором возмущения (если возмущение не меняет ширину полосы сплошного спектра, т.е. пре-

дельных значений J -матрицы, и может считаться «асимптотически вырожденным»). Полюсы функции Грина λ_d определяют дискретные частоты (в частности, локальные колебания), а вычеты в этих полюсах $\mu_0^{(d)} \equiv \text{res}_{\lambda=\lambda_d} G_{00}(\lambda)$ — *интенсивности*, т.е. характеризуют величину амплитуды тех же определенных вектором \vec{h}_0 колебаний на дискретных частотах, при этом

$$\int_0^{\lambda_m} \rho(\lambda) d\lambda + \sum_d \mu_0^{(d)} = 1.$$

Из (13) следует, что $\mu_n^{(d)} \equiv \text{res}_{\lambda=\lambda_d} G_{nn}(\lambda) = \mu_0^{(d)} P_n^2(\lambda_d)$, т.е. функция $P_n^2(\lambda_d)$ определяет затухание амплитуды локального колебания с ростом номера вторичной гюйгенсовской волны. При стремлении матричных элементов J -матрицы к своим предельным значениям (10) последовательность $\{P_n^2(\lambda_d)\}_{n=n_a}^\infty$ стремится к бесконечно убывающей геометрической прогрессии, таким образом, амплитуды локальных колебаний затухают экспоненциально [25–27]. Естественно, что для любого локального уровня должно выполняться условие

$$\sum_{n=0}^\infty \mu_n^{(d)} = \mu_0^{(d)} \sum_{n=0}^\infty P_n^2(\lambda_d) = 1, \quad (17)$$

которое следует из формул для разности следов возмущенного и невозмущенного операторов [5,20,21]. Так как за пределами полосы сплошного спектра функция $G_{(1)}(\lambda)$ является хорошей аппроксимацией функции Грина, то вполне разумно ожидать, что с ее помощью можно вполне удовлетворительно описать характеристики локальных колебаний. Вычислим эти характеристики.

Введем параметры η и β , характеризующие отклонение матричных элементов a_0 и b_0 от предельных значений (10):

$$a_0 = \frac{\lambda_m}{2(1+\eta)}; \quad b_0 = \frac{\lambda_m}{4\sqrt{1+\beta}}, \quad (18)$$

очевидно, что $\eta, \beta \in [-1, +\infty)$.

Функцию Грина $G_{(1)}(\lambda)$ можно записать в виде

$$G_{(1)}(\lambda) = G_{(1)}(\lambda, \eta, \beta) = \frac{4(1+\eta)(1+\beta)}{2\lambda(1+\eta)(1+\beta) - \lambda_m(1+\beta-\eta) - 2Z(\lambda)(1+\eta)\sqrt{\lambda|\lambda-\lambda_m|}}. \quad (19)$$

Значения $\lambda = \lambda_d(\eta, \beta) > \lambda_m$, при которых знаменатель (19) обращается в нуль, определяют квадраты частот локальных колебаний. Из элементарных, хотя

и громоздких, вычислений следует, что такое значение одно:

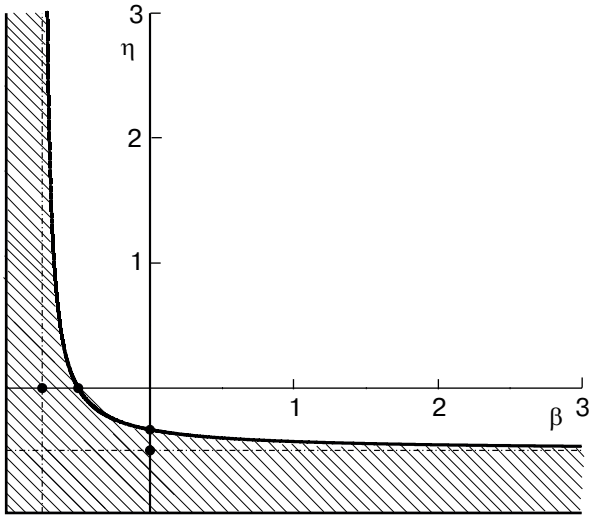


Рис. 4. Области существования (заштрихована) и отсутствия локальных колебаний в системе, описываемой функцией Грина (19). Разделительная кривая $\eta = \eta^*(\beta)$ задается системой неравенств (21).

$$\lambda_1(\eta, \beta) \equiv \omega_l^2(\eta, \beta) = \frac{\lambda_m}{4\beta(1 + \eta)} \times \left\{ 2\beta - \eta - \sqrt{-\beta + \frac{(\eta - \beta)^2}{1 + \beta}} \right\} \quad (20)$$

и существует при

$$\begin{aligned} \mu_0 &= \frac{1 + \eta}{4\beta(\lambda_1 - \lambda_2)} \left\{ 2\lambda_1(1 + 2\beta) - \lambda_m \frac{1 + 2\beta - \eta}{1 + \eta} - 2\sqrt{\lambda_1(\lambda - \lambda_m)} \right\} = \\ &= \frac{\eta + (1 + 2\beta)\sqrt{-\beta + \frac{(\eta - \beta)^2}{1 + \beta}}}{2\beta\sqrt{-\beta + \frac{(\eta - \beta)^2}{1 + \beta}}} \left\{ \Theta\left(-\frac{3}{4} - \beta\right) + \Theta\left(\beta + \frac{3}{4}\right)\Theta\left(-\frac{1 + 2\beta}{3 + 4\beta} - \eta\right) \right\}. \end{aligned} \quad (23)$$

Подстановка (20) в уравнение Лифшица [20,24], которое для рассматриваемой системы примет вид ($\lambda \notin [0, \lambda_m]$)

$$\begin{aligned} \lambda_m + 2 \left[\beta(2\lambda - \lambda_m) + \lambda_m \frac{1 + \beta}{1 + \eta} \right] \times \\ \times [2\lambda - \lambda_m - 2\sqrt{\lambda(\lambda - \lambda_m)}] = 0, \end{aligned} \quad (24)$$

показывает, что $\lambda_1(\eta, \beta)$ удовлетворяет этому уравнению при выполнении условий (21).

Выше отмечалось, что характеристикой затухания колебаний может служить изменение их амплитуды с ростом номера n вторичной гюйгенсовской

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta < -\frac{3}{4}; \\ \eta \in [-1, +\infty); \end{array} \right. \text{ или } \left\{ \begin{array}{l} \beta > -\frac{3}{4}; \\ \eta < \eta^*(\beta) \equiv -\frac{1 + 2\beta}{3 + 4\beta}. \end{array} \right. \quad (21)$$

Наличие локальных колебаний в системе, характеризуемой параметрами η и β , соответствует заштрихованная область на рис. 4.

В [24] было показано, что пороговым значениям параметров η и β , лежащим на кривой $\eta = \eta^*(\beta)$, соответствует корневая особенность спектральной плотности при $\lambda = \lambda_m$. Действительно, спектральная плотность

$$\rho_{(1)}(\lambda, \eta, \beta) = \frac{1 + \eta}{4\pi\beta} \frac{\sqrt{\lambda(\lambda_m - \lambda)}}{\prod_{d=1}^2 (\lambda - \lambda_d)}, \quad (22)$$

где λ_2 , отличающаяся от λ_1 (20) знаком перед радикалом, имеет такую особенность при $\eta = \eta^*$, так как при этом $\lambda_1 = \lambda_m$. В частности, *идеальной* линейной цепочке со взаимодействием ближайших соседей соответствует $\eta = 0$ и $\beta = -1/2$. Эти значения лежат на кривой $\eta = \eta^*(\beta)$. Спектральная плотность такой цепочки имеет корневые особенности на краях полосы непрерывного спектра, и образование локальных колебаний легкой или сильно связанной примесью происходит беспороговым образом.

Для интенсивности локального колебания $\mu_0 = \text{res}_{\lambda=\omega_l^2} G(\lambda)$ получим:

волны, которое пропорционально $P_n^2(\lambda_1)$. Подставив (20) в (7),(8), получим:

$$P_1(\lambda_1) = -\frac{\sqrt{1 + \beta}}{\beta(1 + \eta)} \left[\eta + \sqrt{-\beta + \frac{(\eta - \beta)^2}{1 + \beta}} \right]. \quad (25)$$

С помощью метода математической индукции легко доказать, что при $n \geq 1$

$$P_n(\lambda_1) = \frac{1}{\sqrt{1 + \beta}} [\sqrt{1 + \beta} P_1(\lambda_1)]^n, \quad (26)$$

следовательно, величины μ_n , если они отличны от нуля (т.е. выполняются условия (21) и локальные

уровни действительно существуют), при $n \geq 1$ образуют геометрическую прогрессию:

$$\mu_n = \mu_1 q^{n-1} = \frac{\mu_0}{1 + \beta} q^n. \quad (27)$$

Знаменатель этой прогрессии

$$q = [\sqrt{1 + \beta} P_1(\lambda_1)]^2 = \left\{ \frac{(1 + \beta)}{\beta(1 + \eta)} \left[\eta + \sqrt{-\beta + \frac{(\eta - \beta)^2}{1 + \beta}} \right] \right\}^2 \quad (28)$$

при выполнении (21) меньше единицы и условие (17) выполняется.

Таким образом, полученные в этом разделе формулы (20), (21), (23) и (28) содержат полное решение задачи атомной динамики для локальных колебаний в системе, описываемой функцией Грина (19), т.е. определяют условия их существования, частоту, интенсивность и затухание. В следующем разделе будет проанализирована и проиллюстрирована применимость этих результатов для конкретных моделей плотноупакованных кристаллов с примесями замещения.

2. Локальные колебания, обусловленные наличием примеси замещения в плотноупакованных кристаллических решетках

В предыдущем разделе рассматривалась функция Грина возмущенной системы (19), хотя отличие от нуля параметров η и β может быть присуще и бездефектной структуре и в первом приближении характеризовать особенности ее геометрии и силового взаимодействия. Для решетки, содержащей дефектные атомы, параметры η и β будут некоторыми функциями параметров дефекта — относительных изменений массы ε (16) и силового взаимодействия γ ,

$$\gamma \equiv \frac{\Delta\alpha}{\alpha} = \frac{\alpha' - \alpha}{\alpha}, \quad (29)$$

где α' и α — силовые постоянные, описывающие взаимодействие примеси с ближайшими соседями и межатомное взаимодействие в идеальной решетке. Значения функций $\eta(\varepsilon, \gamma)$ и $\beta(\varepsilon, \gamma)$ с исчезновением влияния дефекта могут быть отличными от нуля (как уже отмечалось выше, идеальной линейной цепочке соответствует $\beta = -1/2$). Однако бездефектной системе не могут соответствовать значения η и β , обеспечивающие наличие локальных колебаний (см., например, [32]). В частности, для идеаль-

ных решеток должно выполняться неравенство $\beta > -3/4$.

Определив функции $\eta(\varepsilon, \gamma)$ и $\beta(\varepsilon, \gamma)$ для конкретных кристаллических структур с различными дефектными конфигурациями и подставив их в (20), (23), (28) и (21), можно получить зависимости условий образования и динамических характеристик локальных колебаний от параметров, характеризующих отдельный дефект, конфигурацию дефектов, а также идеальную решетку. В настоящем разделе такие зависимости получены для примесей замещения в ГЦК и ГПУ решетках. Результаты сопоставляются с численными расчетами, проведенными с помощью J -матриц высокого ранга.

2.1. Изолированная изотопическая примесь в ГЦК и ГПУ кристаллических решетках

Изотопическая примесь замещения является важным объектом динамики кристаллической решетки с дефектами. Во-первых, потому что вклад в колебательный спектр кристалла, вносимый реальными примесями замещения (примеси замещения встречаются наиболее часто), обусловлен, главным образом, именно отличием массы, а некоторые твердые растворы с достаточно высокой точностью можно рассматривать как изотопические (например, Ag-Al^*). Во-вторых, если известен химический состав раствора, отличие масс основной решетки и примеси известно точно, а отличие силовых констант, а также величина обусловленных наличием примеси напряжений и влияние других процессов (ротация, конверсия), являются непосредственной задачей эксперимента. Для ее решения необходимо сравнение экспериментальных данных с теоретическим расчетом для модели изотопической примеси, что делает теоретический учет влияния изотоп-эффекта неотъемлемой составной частью соответствующих экспериментальных исследований.

Циклические подпространства, порожденные смещениями изолированной изотопической примеси вдоль главных кристаллографических осей, содержат в себе полную информацию об изменении фоновного спектра кристалла таким дефектом [20,30,31]. В каждом из таких подпространств имеется только два отличных от нуля элемента J -матрицы оператора возмущения $\hat{\Lambda}$

$$\Lambda_{00} = -\frac{\varepsilon}{1 + \varepsilon} a_0, \quad \Lambda_{01} = \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon}} \right) b_0, \quad (30)$$

где ε — дефект массы (16); a_0 и b_0 — два первых элемента J -матрицы невозмущенного оператора.

* Оба эти металла имеют ГЦК кристаллическую решетку, постоянная которой у $\text{Al} \approx 4,04 \text{ \AA}$, а у $\text{Ag} \approx 4,08 \text{ \AA}$ [19].

Следовательно, параметры η и β (18) полностью описывают возмущение, вносимое таким дефектом.

Силовые матрицы $\Phi_{ik}(\Delta)$ для случая центрального взаимодействия между атомами имеют вид

$$\Phi_{ik}(\Delta) = -\alpha(\Delta) \frac{\Delta_i \Delta_k}{\Delta^2} (1 - \delta_{\Delta,0}) + \delta_{\Delta,0} \sum_{\Delta} \alpha(\Delta) \frac{\Delta_i \Delta_k}{\Delta^2}. \quad (31)$$

В предлагаемой работе ограничимся взаимодействием ближайших соседей. Вначале рассмотрим кристаллические структуры ГЦК и ГПУ с $\kappa = 1$. Тогда все значения Δ одинаковы и $\alpha(\Delta) \equiv \alpha$. При этом квадрат максимальной частоты $\lambda_m = 8\alpha/m$. Величина $a_0 = \lambda_m/2$, а $b_0 = \lambda_m/4$, т.е. функция Грина (19) совпадает с величиной $K_\infty(\lambda)$, определенной в (11).

В циклических подпространствах, порожденных смещениями изотопической примеси, параметры $\eta = \beta = \varepsilon$. Подставив эти значения в (20), (23) и (29), получим:

$$\omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{2} \right)^2 \frac{1}{\sqrt{|\varepsilon|}(1 - \sqrt{|\varepsilon|})}; \quad (32)$$

$$\mu_0 = 1 - \frac{1 - \sqrt{|\varepsilon|}}{2|\varepsilon|} \cdot \Theta\left(-\frac{1}{4} - \varepsilon\right); \quad (33)$$

$$q = \left(\frac{1 - \sqrt{|\varepsilon|}}{\sqrt{|\varepsilon|}} \right)^2. \quad (34)$$

На рис. 5 приведены зависимости $\omega_l(\varepsilon)$, $\mu_0(\varepsilon)$, а также величины

$$\mu_1(\varepsilon) = \mu_0(\varepsilon) P_1^2(\omega_l^2) = \left(\sqrt{|\varepsilon|} - \frac{1}{2} \right) \left(\frac{1 - \sqrt{|\varepsilon|}}{\varepsilon^2} \right) \Theta\left(-\frac{1}{4} - \varepsilon\right), \quad (35)$$

рассчитанные как по формулам (32)–(35), так и с помощью функции Грина (6), полученной по J -матрицам высокого ранга. Только вблизи границы сплошного спектра заметно некоторое ($\sim 5\%$) отличие в поведении интенсивностей (*но не частот*) локальных колебаний.

Заметим, что уже при $\omega_l \gtrsim 1,01\omega_m$ величина $1 - (\mu_0(\varepsilon) + \mu_1(\varepsilon)) \lesssim 10^{-4}$, т.е. локальное колебание практически полностью локализовано в пределах первой координационной сферы примесного атома.

Величина порогового дефекта массы ε^* , необходимого для возникновения локального колебания, может быть определена из условия выполнения уравнения Лифшица при $\lambda \rightarrow \lambda_m + 0$. В [24] было показано, что

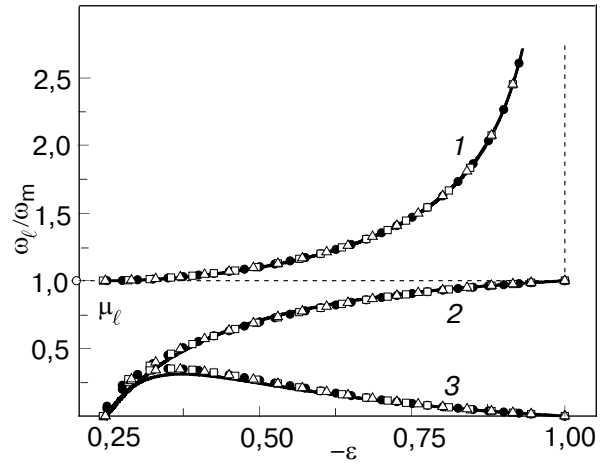


Рис. 5. Зависимость от дефекта массы изолированной изотопической примеси основных характеристик локального колебания, обусловленного наличием такого дефекта в плотноупакованных кристаллических решетках с центральным взаимодействием ближайших соседей. Частота локального колебания (1); интенсивность локального колебания на самом примесном атоме (2); интенсивность локального колебания на первой координационной сфере примеси (3). Сплошные линии расчет по J -матрице первого ранга; точки – по J -матрице $n = 60$: ● – ГЦК; □ и △ – ГПУ вдоль осей a и c соответственно.

$$\varepsilon^* = \frac{1}{\lambda_m G(\lambda_m + 0)} = \frac{2}{\omega_m G(\omega_m + 0)}. \quad (36)$$

В табл. 1 приведены значения $G(\omega_m + 0)$ и ε^* для рассмотренных систем.

Таблица 1. Значения $G_{00}(\omega_m + 0)$ и пороговые значения дефекта массы для ГЦК и ГПУ ($\kappa = 1$) кристаллических решеток

Система	$G_{00}(\omega_m + 0)$	ε^*
J -матрица ранга $n = 1$	8	-0,25
ГЦК	8,161155	-0,245063
ГПУ [100]	8,214850	-0,243462
ГПУ [001]	8,080908	-0,247497

Если в ГПУ кристаллической решетке параметр $\kappa \neq 1$, то $\alpha(\Delta) = \alpha \delta_{\Delta_z,0} + \alpha_c (1 - \delta_{\Delta_z,0})$, где $\alpha \equiv \alpha(a)$; $\alpha_c \equiv \alpha(a\sqrt{(1 + 2\kappa^2)}/3)$ (a – постоянная ГПУ решетки). Если максимальная частота достигается на дне оптической зоны, что характерно для большинства таких структур, то в циклических подпространствах, порожденных смещениями примеси вдоль и перпендикулярно оси c , параметры η и β могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} \bar{h}_0 &= |0| [100]: \\ \eta(\varepsilon) &= \frac{\alpha_c [4\kappa^2(1 + \varepsilon) - 1] - 3\alpha}{\alpha_c + 3\alpha}; \\ \beta(\varepsilon) &= \frac{\alpha_c^2 \kappa^2 [2\kappa^2(5 + 6\varepsilon) - 1] - 9\alpha^2}{\alpha_c^2 \kappa^2 (1 + 2\kappa^2) + 9\alpha^2}; \quad (37) \\ \bar{h}_0 &= |0| [001]: \\ \eta(\varepsilon) &= \varepsilon; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{-1 + \kappa^2(1 + 3\varepsilon)}{1 + 2\kappa^2}. \end{aligned}$$

Подстановка этих параметров в (20), (23) и (28) приводит к несложным, но очень громоздким выражениям для характеристик локальных колебаний, выписывать явный вид которых мы посчитали нецелесообразным.

Сопоставление полученных таким образом результатов с данными расчета с использованием функций Грина, восстановленных по J -матрицам высокого ранга, приведено на рис. 6. Видно, что и в этом случае (20) является очень хорошей аппроксимацией локальной частоты во всем частотном диапазоне, а (23) хорошо описывает интенсивность локального колебания при $\omega_l \gtrsim 1,05 - 1,10 \omega_m$. Практически для определения характеристик локального колебания достаточно учесть, что вблизи ω_m форма спектральной плотности определена: $\rho(\lambda) \sim \sqrt{\omega_m^2 - \omega^2}$ (см., например, [7]). Такая аппроксимация спектральной плотности применялась, в частности, в [33]. Коэффициент пропорциональности можно выразить через среднее по спектру значение частоты и дисперсию этого среднего значения, следовательно, через a_0 и b_0 . Действительно, так как полиномы $P_n(\lambda)$ ортонормированы в гильбертовом пространстве с весовым множителем $\rho(\lambda)$ (см., например, [28,29]), то

$$a_0 = M_1; \quad b_0 = \sqrt{M_2 - M_1^2}, \quad (38)$$

где $M_n \equiv \int_0^\infty \lambda^n \rho(\lambda) d\lambda$.

Соответственно, матричный элемент a_0 — это квадрат эйнштейновской частоты, а матричный элемент b_0 характеризует дисперсию распределения колебаний.

Влияние на величины a_0 и b_0 оказывают только те соседи примесного атома, с которыми он непосредственно взаимодействует. В рассматриваемой нами модели — это ближайшие соседи, поэтому возможность описания с высокой точностью локальных частот с помощью (20) означает, что действующие на решетку другие возмущения практически не изменяют частоту локального колебания, если они не

затрагивают первую координационную сферу примеси. В частности, при конечной концентрации примесных атомов размытие локальных уровней происходит главным образом за счет пар примесей, которые расположены так, что множества атомов, с которыми взаимодействует каждая из них, пересекаются. Этот случай рассмотрен в следующем параграфе.

2.2. Локальные колебания, обусловленные парой изотопических примесей в ГЦК кристаллической решетке

В ГЦК кристаллической решетке с центральным взаимодействием между ближайшими соседями атомы, взаимодействующие с обеими примесями, будут существовать, если примеси являются ближайшими, вторыми, третьими или четвертыми соседями друг друга.

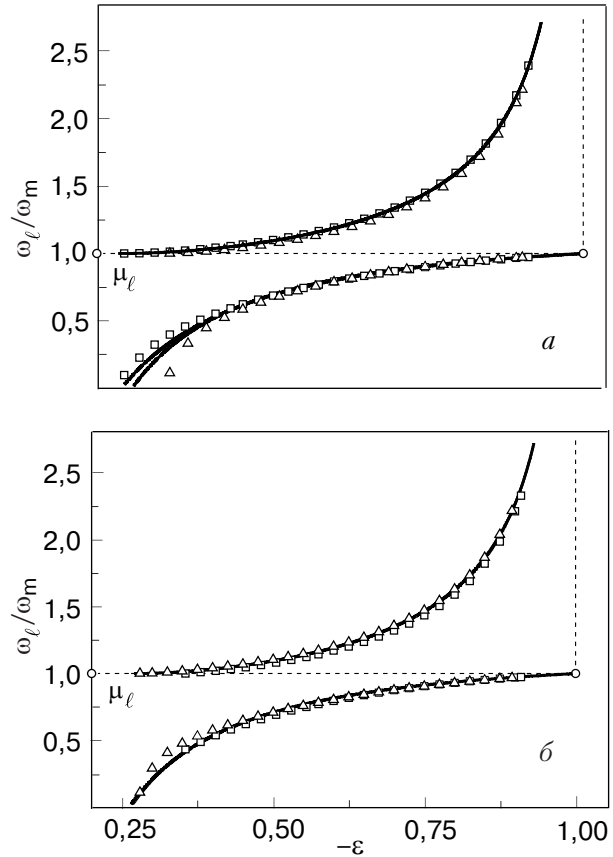


Рис. 6. Зависимость от дефекта массы изолированной изотопической примеси частоты и интенсивности локального колебания, обусловленного наличием такого дефекта в ГПУ кристаллических решетках с центральным взаимодействием ближайших соседей и отличными от единицы значениями параметра $\kappa \equiv a/c\sqrt{8/3}$: $\kappa = 1,05$, $\alpha_c = 0,88\alpha$ (а); $\kappa = 0,95$, $\alpha_c = 1,15\alpha$ (б). Сплошные линии расчет по J -матрице первого ранга, \square и \triangle по J -матрице $n = 60$ (вдоль и перпендикулярно к оси c).

Пусть имеется изолированная пара изотопических примесей, которые являются ближайшими соседями друг друга. Совместим начало координат с одной из примесей и выберем координатные оси вдоль осей четвертого порядка таким образом, чтобы координаты другой примеси были $(a/2, a/2, 0)$, где a — постоянная ГЦК решетки.

В отличие от случая одной изолированной примеси, наличие такого дефекта понижает симметрию системы с O_h до D_{2h} . Все пространство атомных смещений может быть представлено в виде прямой суммы шести взаимно ортогональных циклических подпространств, каждое из которых преобразуется по одномерному неприводимому представлению точечной группы $D_{2h} - \tau^i$ ($i = 1, 3, 4, 5, 6, 8$, обозначения из [34]). Каждое из этих циклических подпространств порождается одновременным смещением ближайших соседних атомов (синфазным или противофазным) в направлении вдоль прямой, соединяющей эти атомы (τ^1 и τ^8), и в двух перпендикулярных к этой прямой направлениях. Вносимое изотопическим замещением возмущение каждого из шести различных операторов $\hat{L}_0^{(i)}$, индуцированных в этих подпространствах оператором \hat{L}_0 , описывающим колебания идеального кристалла, будет представлено выражениями (30), в которых величины a_0 и b_0 — два первых элемента J -матрицы соответствующего оператора. Таким образом, в каждом из циклических подпространств τ^i можно определить свои значения $\eta(\epsilon)$ и $\beta(\epsilon)$ (они приведены в формулах (П.1)–(П.6) Приложения).

В каждом из циклических подпространств τ^i функция Грина за пределами полосы непрерывного спектра, как видно на рис. 7, хорошо аппроксимируется выражением (19), в которое в качестве пара-

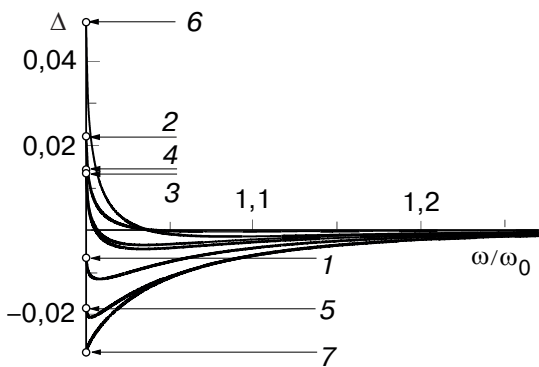


Рис. 7. Частотная зависимость величины Δ внедренного в идеальную ГЦК кристаллическую решетку с центральным взаимодействием ближайших соседей изолированного дефекта «пара рядом расположенных примесей»: смещение τ^5 (одна изолированная примесь смещается в произвольном направлении) (1); τ^8 (2); τ^6 (3); τ^1 (4); τ^7 (5); τ^4 (6) (порождающие векторы приведены в Приложении).

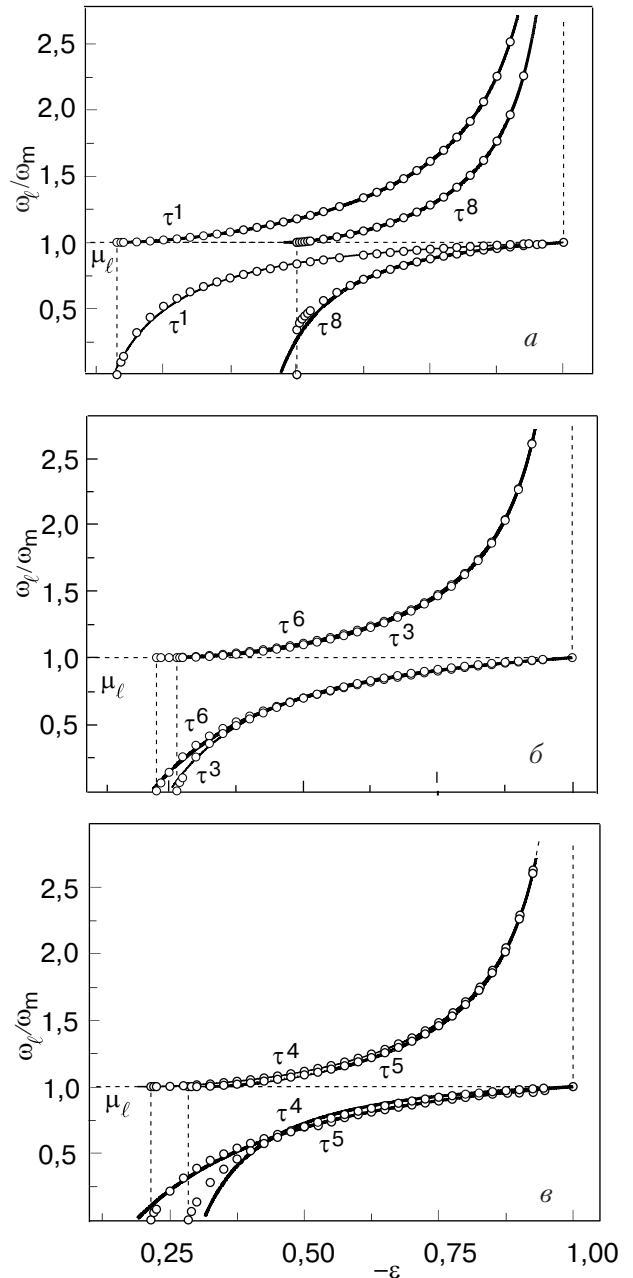


Рис. 8. Зависимость от дефекта массы частот и интенсивностей локальных колебаний изолированной пары рядом расположенных изотопических примесей в ГЦК кристаллической решетке с центральным взаимодействием ближайших соседей. Сплошные линии — расчет по J -матрице первого ранга, точки — по J -матрице $n = 60$.

метров η и β следует подставить значения $\eta(0)$ и $\beta(0)$ из (П.1)–(П.6).

Подстановка в (20), (23) и (28) соответствующих значений $\eta(\epsilon)$ и $\beta(\epsilon)$ для частот, интенсивностей и параметров затухания локальных колебаний дает аналитические выражения, также приведенные в (П.1)–(П.6). На рис. 8 представлены зависимости частот и интенсивностей локальных колебаний в каждом из циклических подпространств, рассчитанные как по формулам (П.1)–(П.6), так и с помощью

функций Грина, восстановленных по J -матрицам ранга $n = 50$. Как и в предыдущих случаях, отличие заметно только в поведении интенсивностей для колебаний, чьи частоты очень мало превышают ω_m .

Слагаемое, описывающее вклад изотопического дефекта в уравнение Лифшица, не зависит от параметров идеальной решетки и одинаково во всех циклических подпространствах [24]. Поэтому для определения порогов возникновения локального колебания в каждом из подпространств τ^i можно пользоваться соотношением (36) с использованием функции Грина идеальной решетки в данном подпространстве. Значения $G(\omega_m)$ вместе с пороговыми значениями дефекта массы приведены в табл. 2.

Таблица 2. Значения $G_{00}(\omega_m + 0)$ и пороговые значения дефекта массы для ГЦК решетки

$H^{(i)}$	$G_{00}(\omega_m + 0)$		ε^*	
	$n = 50$	$n = 1$	$n = 50$	$n = 1$
τ^1	12,30378	12,8	-0,162552	-0,15625
τ^3	7,562446	$\frac{64}{9}$	-0,264465	-0,28125
τ^4	9,315600	$\frac{32}{3}$	-0,214694	-0,18750
τ^5	7,039269	6,4	-0,284120	-0,31250
τ^6	8,817075	$\frac{64}{7}$	-0,226833	-0,21875
τ^8	4,000041	$\frac{64}{15}$	-0,499995	-0,46875

Максимальное расстояние между локальными частотами при фиксированном значении ε в различных циклических подпространствах, т.е. разность $\Delta\omega_l(\varepsilon) = \omega_l^{(\tau^1)}(\varepsilon) - \omega_l^{(\tau^8)}(\varepsilon)$, может служить для оценки ширины примесной зоны при конечной концентрации примеси s . Для рассматриваемого в данном разделе случая ГЦК кристаллической решетки с центральным взаимодействием между ближайшими соседями в подпространстве, порожденном смещением какого-либо атома, смещения его вторых соседей не входят в базисные векторы \vec{h}_1, \vec{h}_2 , т.е. не дают вклад ни в матричные элементы a_0 и b_0 , ни в два первых момента спектральной плотности. Поэтому если две изотопических примеси являются вторыми соседями друг друга, то характеристики локальных колебаний для такой пары примесей будут описываться выражениями (32)–(34), хотя множества атомов, с которыми взаимодействует каждая из них, пересекаются. Учет взаимодействия со вторыми соседями или нецентрального взаимодействия между ближайшими соседями приведет к снятию вырождения локальных

колебаний, которые, как и для случая рядом расположенных примесных атомов, станут зависеть от их взаимных смещений.

Для пар примесей, являющихся третьими и четвертыми соседями друг друга, взаимодействие между примесями приводит к изменению только матричного элемента b_0 (как и в подпространствах τ^2 – τ^6 для пары рядом расположенных примесей). Если примеси являются четвертыми соседями друг друга, то взаимодействие проявится только для смещений вдоль соединяющей их прямой, причем в этом случае зависимость от дефекта массы параметров η и β , а следовательно, и всех характеристик локальных колебаний тождественно совпадают: для синфазного смещения с аналогичными зависимостями в подпространстве τ^4 , а для противофазного — в подпространстве τ^5 (см. (П.3) и (П.4) соответственно).

Аналитические выражения для параметров η и β как функций дефекта массы ε , а также для условий существования и основных характеристик локальных колебаний приведены в формулах (П.7)–(П.13) Приложения.

2.3. Локальные колебания, обусловленные легкими слабо связанными примесями

Во многих случаях из элементов, образующих одинаковые кристаллические решетки (например, ГЦК), более легкие атомы обладают меньшими атомным радиусом и постоянной кристаллической решетки (см., например, табл. 3). Поэтому легкая примесь замещения во многих случаях попадает в решетку с межатомным расстоянием Δ , превышающим Δ_0 — расстояние, соответствующее минимуму характерного для данного примесного атома потенциала межатомного взаимодействия. Это, как правило, приводит к ослаблению связи примеси с окружением. Строго говоря, при этом должны возникнуть и нецентральные силы, однако несложные оценки (приведенные, например, в [36]) показывают, что в области значений Δ , где еще возможно существование локальных колебаний, нецентральные силы пренебрежимо малы и межатомное взаимодействие можно считать центральным.

Таблица 3. Атомные массы, атомные радиусы и постоянные решетки отвердевших инертных газов [35]

	m , а.е.	σ , Å	a , Å
Ar	39,94	3,405	5,40
Kr	83,80	3,624	5,59
Xe	131,30	3,921	6,20

Задача об условиях образования и характеристиках локальных колебаний в ГЦК кристаллической

решетке, содержащей примеси, отличающиеся и массой, и межатомным взаимодействием, рассмотрена в [24]. Как и в случае легкого изотопа, локальные колебания, обусловленные легкой слабо связанной примесью, возникают только в циклическом подпространстве, порожденном смещением самого примесного атома. Это подпространство преобразуется по неприводимому представлению τ^5 точечной группы O_h (обозначения из [34]).

Оператор возмущения $\hat{\Lambda}$ в этом подпространстве имеет три отличных от нуля матричных элемента [20,30,31]:

$$\Lambda_{00} = \frac{-\varepsilon + \gamma}{1 + \varepsilon} a_0; \quad \Lambda_{01} = \left(1 - \frac{1 + \gamma}{\sqrt{1 + \varepsilon}}\right) b_0, \quad \Lambda_{01} = \gamma \frac{\lambda_m}{8}, \quad (39)$$

и данное возмущение нельзя описать через параметры η и β . Но так как матричный элемент J -матрицы иде-

альной ГЦК решетки $a_1 = 9/16$, то при ослаблении силовых связей менее чем вдвое ($-1/2 \leq \gamma < 0$) данное обстоятельство только улучшает приближение функции Грина выражением (19). При большем ослаблении межатомного взаимодействия, существование локальных колебаний маловероятно, но возможность достаточно адекватного описания спектральных свойств по двум первым моментам сохранится, так как в этом случае колебания будут сильно локализованы (см., например, [37]).

Используя (39), для параметров η и β можно записать:

$$\eta(\varepsilon, \gamma) = \frac{\varepsilon - \gamma}{1 + \gamma}; \quad \beta(\varepsilon, \gamma) = \frac{\varepsilon - \gamma(2 + \gamma)}{(1 + \gamma)^2}. \quad (40)$$

Подставив эти значения в (20), (23) и (28), получим:

$$\left\{ \begin{aligned} \omega_l^2 &= \left(\frac{\omega_m}{2}\right)^2 \frac{1 - |\gamma|}{1 - |\varepsilon|} \frac{|\varepsilon - |\gamma|| (3 - |\varepsilon| - |\gamma|) + (1 - |\gamma|)^{3/2} \sqrt{|\varepsilon - |\gamma|| (2 - |\varepsilon|)}}{|\varepsilon - |\gamma|| (2 - |\gamma|)}; \\ \mu_0 &= \frac{\Theta \left(\frac{-1 + 4\gamma + \gamma^2}{4} - \varepsilon \right)}{2 [|\varepsilon - |\gamma|| (2 - |\gamma|)] \sqrt{|\varepsilon - |\gamma|| (2 - |\varepsilon|)}} \{ [2(1 + |\gamma|)^2 - 2(\varepsilon + \gamma^2)] \sqrt{|\varepsilon - |\gamma|| (2 - |\varepsilon|)} + (|\varepsilon - |\gamma||) (1 - |\gamma|)^{3/2} \}; \\ q &= \left\{ \frac{|\varepsilon - |\gamma|| - \sqrt{(1 - |\gamma|) |\varepsilon - |\gamma|| (2 - |\varepsilon|)}}}{|\varepsilon - |\gamma|| (2 - |\gamma|)} \right\}^2. \end{aligned} \right. \quad (41)$$

Эволюция локальных частот и интенсивностей локальных колебаний с изменением параметров γ и ε приведена на рис. 9, 10. Как и для всех рассмотренных в настоящей работе случаев, на этих рисунках проведено сравнение результатов (41) с расчетами по J -матрице ранга $n = 60$. Для легкой слабо связанной примеси согласие результатов обоих расчетов оказывается даже лучшим, чем для легкой изотопической примеси.

Заключение

Таким образом, аналитические выражения (20), (23) и (28), полученные в рамках приближения спектральной плотности кристаллической решетки с односвязной полосой квазинепрерывного спектра по известным двум первым ее моментам и поведению на концах этой полосы, с высокой точностью описывает характеристики локальных колебаний, обусловленных наличием легкой примеси (изотопической или слабо связанной) в плотноупакованных кристаллических структурах. Согласие будет тем

лучше, чем дальше отстоит локальный уровень от верхнего края полосы сплошного спектра, но и вблизи верхней границы согласие можно считать вполне удовлетворительным. В частности, условия существования локального колебания описываются выражением (21) с точностью 2–3%.

Применимость этих формул для других структур можно определить, исследовав скорость сходимости функции Грина вне полосы сплошного спектра с ростом ранга соответствующей J -матрицы, что отвечает стремлению формы фронта волны, распространяющейся в кристаллической решетке от локализованного источника, к сферической. Следует ожидать хорошего согласия данных формул для легких изотопических и легких слабо связанных примесей не только в плотноупакованных, но и других кристаллических решетках (в частности, и с многоатомными элементарными ячейками, но имеющих односвязную полосу сплошного спектра), в том числе и в сильно анизотропных слоистых и цепочечных кристаллах. Что касается сильно связанных примесей

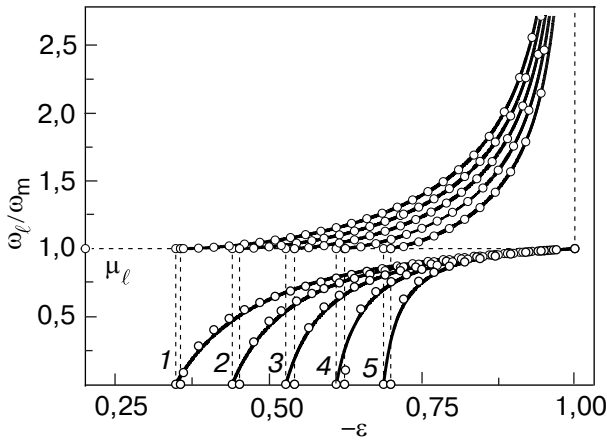


Рис. 9. Зависимость частоты и интенсивности локальных колебаний от дефекта массы изолированной примеси замещения в ГЦК кристаллической решетке с центральным взаимодействием ближайших соседей. Взаимодействие примесного атома со своими соседями слабее, чем в основной решетке. Кривые 1, 2, 3, 4, 5 соответствуют значениям $\Delta\alpha/\alpha = -0,1; -0,2; -0,3; -0,4$ и $-0,5$. Верхние кривые — частота локального колебания; нижние — его интенсивность на самом примесном атоме; $n = 1$ (сплошные линии); $n = 60$ (точки).

(особенно тяжелых), то в циклических подпространствах, порожденных смещениями самого примесного атома, такое согласие может быть ухудшено из-за большого отклонения от своего асимптотического значения матричного элемента a_1 (связанного с третьим моментом спектральной плотности). В тех же циклических подпространствах, где примесной атом покоится и ранг оператора возмущения $\hat{\Lambda}$ равен единице (см., например, [24]), следует ожидать хорошего согласия характеристик локальных колебаний с формулами (20), (21), (23) и (28).

При конечных концентрациях примеси размытие локального уровня будет в первую очередь обусловлено такими примесными конфигурациями, для которых характерно изменение первого момента спектральной плотности. В решетках со взаимодействием ближайших соседей — группами примесных атомов, каждый из которых является ближайшим соседом остальных (в ГЦК кристаллических решетках — это примесные пары, равносторонние треугольники и тетраэдры). Если частота локального колебания хорошо описывается формулой (20), то такое локальное колебание наблюдается в виде острого пика и при конечных концентрациях примесных атомов ($c \lesssim 5\%$). При $c \sim 5-10\%$ наряду с этим пиком должны наблюдаться два других, соответствующих син- и противофазным смещениям пар при-

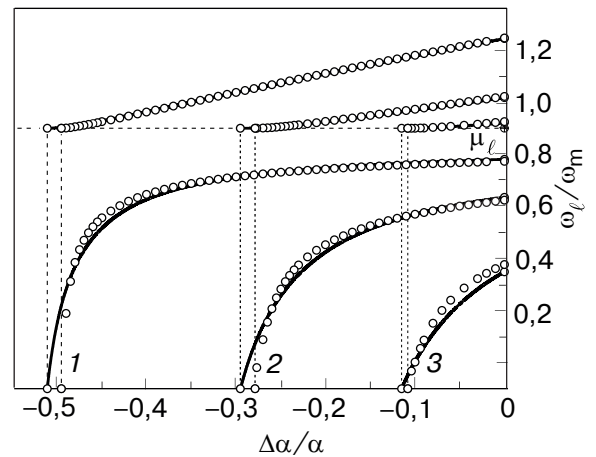


Рис. 10. Изменение частоты и интенсивности локальных колебаний легкой изолированной примеси замещения в ГЦК кристаллической решетке с центральным взаимодействием ближайших соседей по мере ослабления взаимодействия примесного атома со своим окружением 1, 2 и 3 соответствуют значениям $\Delta m/m =$ для примесей Ag в Xe, Ag в Kг и Kг в Xe. Верхние кривые — частота локального колебания; нижние — его интенсивность на самом примесном атоме; $n = 1$ (сплошные линии);

месных атомов^{*}. При дальнейшем росте концентрации эти пики размываются, сливаются и образуют примесную колебательную зону.

Авторы выражают глубокую благодарность А.М. Косевичу, А.С. Ковалеву и Е.С. Сыркину за плодотворные обсуждения и ценные замечания.

Приложение

В настоящем приложении для локальных колебаний, обусловленных различными смещениями изолированных пар легких изотопических примесей замещения, являющихся ближайшими, третьими и четвертыми соседями друг друга, приведены значения пороговых дефектов массы (как аргументы Θ -функций) и зависимости от дефекта массы локальных частот ω_l , интенсивностей μ_0 и параметров затухания q . Данные зависимости могут служить для идентификации различных локальных колебаний, возникающих при малых ($\sim 1-5\%$) концентрациях примесных атомов.

Шесть взаимно ортогональных собственных смещений пары ближайших соседей в ГЦК кристаллической решетке и порожденные этими смещениями (порождающими векторами \vec{h}_0) взаимно ортогональные циклические подпространства преобразуют по неприводимым представлениям $\tau^1 - \tau^8$ группы

* При недостаточной мощности дефекта локальная частота, соответствующая синфазным смещениям, может не выйти из полосы сплошного спектра.

O_h [34]. Ниже для каждого из этих подпространств приведены: индекс соответствующего представления, соответствующий порождающий вектор \vec{h}_0 , значения матричных элементов a_0 и b_0 идеальной ГЦК кристаллической решетки в этих подпространствах, зависимости параметров η и β (18) и основных параметров локального колебания от дефекта массы ε (16)

$$\tau^1: \vec{h}_0 = \frac{1}{2} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0, & 0, & 0 & 1 & 1 & 0 \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & 0 & -1 & -1 & 0 \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{5}{8}; \quad \eta(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon - 1}{5};$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{14}}{16}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{8\varepsilon + 1}{7};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{4} \right)^2 \frac{52|\varepsilon| - 17 + 7\sqrt{26|\varepsilon| - 1}}{(1 - |\varepsilon|)(8|\varepsilon| - 1)}; \\ \mu_0 = \frac{7(1 + 4|\varepsilon|) + (16|\varepsilon| - 9)\sqrt{26|\varepsilon| - 1}}{2(8|\varepsilon| - 1)\sqrt{26|\varepsilon| - 1}} \Theta\left(-\frac{5}{32} - \varepsilon\right); \\ q = \left(2 \frac{1 + 4|\varepsilon| - \sqrt{26|\varepsilon| - 1}}{8|\varepsilon| - 1} \right)^2; \end{array} \right. \quad (\text{П.1})$$

$$\tau^3: \vec{h}_0 = \frac{1}{2} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0, & 0, & 0 & 1 & -1 & 0 \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & 0 & -1 & 1 & 0 \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{14}}{16}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{8\varepsilon + 1}{7};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{4} \right)^2 \frac{4(9|\varepsilon| - 2) + 7\sqrt{2(9|\varepsilon| - 1)}}{(8|\varepsilon| - 1)(1 - |\varepsilon|)}; \\ \mu_0 = \frac{14\sqrt{2}|\varepsilon| + (16|\varepsilon| - 9)\sqrt{9|\varepsilon| - 1}}{2(8|\varepsilon| - 1)\sqrt{9|\varepsilon| - 1}} \Theta\left(-\frac{9}{32} - \varepsilon\right); \\ q = \left(2 \frac{4|\varepsilon| - \sqrt{2(9|\varepsilon| - 1)}}{8|\varepsilon| - 1} \right)^2; \end{array} \right. \quad (\text{П.2})$$

$$\tau^4: \vec{h}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0, & 0, & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{5}}{8}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon - 1}{5};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{2} \right)^2 \frac{4 + 6|\varepsilon| + 5\sqrt{1 + 3|\varepsilon|}}{2(1 - |\varepsilon|)(1 + 4|\varepsilon|)}; \\ \mu_0 = \frac{10|\varepsilon| + (8|\varepsilon| - 3)\sqrt{1 + 3|\varepsilon|}}{2(1 + 4|\varepsilon|)\sqrt{1 + 3|\varepsilon|}} \Theta\left(-\frac{3}{16} - \varepsilon\right); \\ q = \left(2 \frac{2|\varepsilon| - \sqrt{1 + 3|\varepsilon|}}{1 + 4|\varepsilon|} \right)^2; \end{array} \right. \quad (\text{П.3})$$

$$\tau^5: \vec{h}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0, & 0, & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & 0 & 0 & 0 & -1 \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{3}}{8}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon + 1}{3};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{2} \right)^2 \frac{2(5|\varepsilon| - 2) + 3\sqrt{5|\varepsilon| - 1}}{2(1 - |\varepsilon|)(4|\varepsilon| - 1)}; \\ \mu_0 = \frac{6|\varepsilon| + (8|\varepsilon| - 5)\sqrt{5|\varepsilon| - 1}}{2(4|\varepsilon| - 1)\sqrt{5|\varepsilon| - 1}} \Theta\left(-\frac{5}{16} - \varepsilon\right); \\ q = \left(2 \frac{2|\varepsilon| - \sqrt{5|\varepsilon| - 1}}{4|\varepsilon| - 1} \right)^2; \end{array} \right. \quad (\text{П.4})$$

$$\tau^6: \vec{h}_0 = \frac{1}{2} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0, & 0, & 0 & 1 & -1 & 0 \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & 0 & 1 & -1 & 0 \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{3\sqrt{2}}{16}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{8\varepsilon - 1}{9};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{4} \right)^2 \frac{4(1 + 7|\varepsilon|) + 9\sqrt{2(1 + 7|\varepsilon|)}}{(1 - |\varepsilon|)(1 + 8|\varepsilon|)}; \\ \mu_0 = \frac{36|\varepsilon| + (16|\varepsilon| - 7)\sqrt{2(1 + 7|\varepsilon|)}}{2(1 + 8|\varepsilon|)\sqrt{2(1 + 7|\varepsilon|)}} \Theta\left(-\frac{7}{32} - \varepsilon\right); \\ q = \left(2 \frac{4|\varepsilon| - \sqrt{2(1 + 7|\varepsilon|)}}{1 + 8|\varepsilon|} \right)^2; \end{array} \right. \quad (\text{П.5})$$

O_h

$$\tau^8: h_0 = \frac{1}{2} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0, & 0, & 0 & 1 & 1 & 0 \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{3}{8}; \quad \eta(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon + 1}{3};$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{10}}{16}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{8\varepsilon + 3}{5};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{4} \right)^2 \frac{28|\varepsilon| - 13 + 5\sqrt{14|\varepsilon| - 5}}{(1 - |\varepsilon|)(8|\varepsilon| - 3)}; \\ \mu_0 = \frac{5(4|\varepsilon| - 1) + (16|\varepsilon| - 11)\sqrt{14|\varepsilon| - 5}}{2(8|\varepsilon| - 3)\sqrt{14|\varepsilon| - 5}} \Theta\left(-\frac{15}{32} - \varepsilon\right); \\ q = \left(2 \frac{(1 - 4|\varepsilon| + \sqrt{14|\varepsilon| - 5})^2}{8|\varepsilon| - 3} \right)^2. \end{array} \right. \quad (\text{П.6})$$

Для случая ГЦК кристаллической решетки с центральным взаимодействием между ближайшими соседями в подпространстве, порожденном смещением какого-либо атома, вторые соседи не дают вклад ни в матричные элементы a_0 и b_0 , ни в два первых момента спектральной плотности. Поэтому, если две изотопических примеси являются вторыми соседями друг друга, то характеристики локальных колебаний для такой пары примесей будут описываться выражениями (32)–(34), хотя множества атомов, с которыми взаимодействует каждая из них, пересекаются.

Ниже приведены порождающие векторы и зависимости от ε основных характеристик локальных колебаний для различных взаимно ортогональных смещений изолированных пар изотопических примесей, являющихся третьими и четвертыми соседями друг друга:

$$\bar{h}_0 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0, & 0, & 0 & 1 & 1 & 2 \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & a & 1 & 1 & 2 \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{19}}{16}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{16\varepsilon - 3}{19};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{4} \right)^2 \frac{4(13|\varepsilon| + 6) + 19\sqrt{13|\varepsilon| + 3}}{(1 - |\varepsilon|)(16|\varepsilon| + 3)}; \\ \mu_0 = \frac{76|\varepsilon| + (32|\varepsilon| - 13)\sqrt{13|\varepsilon| + 3}}{2(16|\varepsilon| + 3)\sqrt{13|\varepsilon| + 3}} \Theta\left(-\frac{13}{64} - \varepsilon\right); \\ q = \left(4 \frac{4|\varepsilon| - \sqrt{13|\varepsilon| + 3}}{16|\varepsilon| + 3} \right)^2; \end{array} \right. \quad (\text{П.7})$$

$$\bar{h}_0 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0, & 0, & a & 1 & 1 & 2 \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & a & -1 & -1 & -2 \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{13}}{16}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{16\varepsilon + 3}{13};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{4} \right)^2 \frac{4(19|\varepsilon| - 6) + 13\sqrt{19|\varepsilon| - 3}}{(1 - |\varepsilon|)(16|\varepsilon| - 3)}; \\ \mu_0 = \frac{52|\varepsilon| + (32|\varepsilon| - 19)\sqrt{19|\varepsilon| - 3}}{2(16|\varepsilon| - 3)\sqrt{19|\varepsilon| - 3}} \Theta\left(-\frac{19}{64} - \varepsilon\right); \\ q = \left(4 \frac{4|\varepsilon| - \sqrt{19|\varepsilon| - 3}}{16|\varepsilon| - 3} \right)^2; \end{array} \right. \quad (\text{П.8})$$

$$\bar{h}_0 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0, & 0, & 0 & 1 & -1 & 0 \\ \frac{a}{2}, & \frac{a}{2}, & a & 1 & -1 & 0 \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{17}}{16}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{16\varepsilon - 1}{17};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{4} \right)^2 \frac{4(15|\varepsilon| + 2) + 17\sqrt{15|\varepsilon| + 1}}{(1 - |\varepsilon|)(16|\varepsilon| + 1)}; \\ \mu_0 = \frac{68|\varepsilon| + (32|\varepsilon| - 15)\sqrt{15|\varepsilon| + 1}}{2(16|\varepsilon| + 1)\sqrt{15|\varepsilon| + 1}} \Theta\left(-\frac{15}{64} - \varepsilon\right); \\ q = \left(4 \frac{4|\varepsilon| - \sqrt{15|\varepsilon| + 1}}{16|\varepsilon| + 1} \right)^2; \end{array} \right. \quad (\text{П.9})$$

$$\bar{h}_0 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ a & a & a & -1 & 1 & 0 \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & a & & & \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{15}}{16}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{16\varepsilon + 1}{15};$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_l^2 = \left(\frac{\omega_m}{4} \right)^2 \frac{4(17|\varepsilon| - 2) + 15\sqrt{17|\varepsilon| - 1}}{(1-|\varepsilon|)(16|\varepsilon| - 1)}; \\ \mu_0 = \frac{60|\varepsilon| + (32|\varepsilon| - 17)\sqrt{17|\varepsilon| - 1}}{2(16|\varepsilon| - 1)\sqrt{17|\varepsilon| - 1}} \Theta\left(-\frac{17}{64} - \varepsilon\right); \\ q = \left(4 \frac{4|\varepsilon| - \sqrt{17|\varepsilon| - 1}}{16|\varepsilon| - 1} \right)^2; \end{array} \right. \quad (\text{П.10})$$

$$\bar{h}_0 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 \\ a & a & a & \pm 1 & \pm 1 & \mp 1 \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & a & & & \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \beta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{1}{4};$$

величины ω_l^2 , μ_0 и q определяются выражениями (32)–(34) соответственно.

$$\bar{h}_0 = \frac{1}{2} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ a & a & 0 & 1 & 1 & 0 \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & & & \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{3}}{8}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon - 1}{5};$$

величины ω_l^2 , μ_0 и q определяются выражениями (П.3).

$$h_0 = \frac{1}{2} \left| \begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ a & a & 0 & -1 & -1 & 0 \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & & & \end{array} \right\rangle;$$

$$a_0 = \frac{1}{2}; \quad \eta(\varepsilon) = \varepsilon;$$

$$b_0 = \frac{\sqrt{5}}{8}; \quad \beta(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon + 1}{5};$$

величины ω_l^2 , μ_0 и q определяются выражениями (П.4).

Во всех случаях: при $\varepsilon = \varepsilon^*$; $\omega_l = \omega_m$; $\mu_0 = 0$ и $q = 1$; при $\varepsilon \rightarrow -1$; $\omega_l \rightarrow \infty$; $\mu_0 \rightarrow 1$ и $q \rightarrow 0$.

1. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **12**, 156 (1942).

2. И.М. Лифшиц, *ДАН СССР* **48**, 83 (1945).
 3. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **17**, 1076 (1948).
 4. I.M. Lifshitz, *Nuovo Cim. Suppl.* **3**, 716 (1956) [русский перевод в кн: И.М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва (1987), т. 1, с.106.
 5. I.M. Lifshitz and A.M. Kosevich, *Rep. Progr. Phys.* **29**, 217 (1966) [русский перевод в кн: И.М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва (1987), т. 1, с. 142.
 6. И.М. Лифшиц, *УМН* **7**, 171 (1952).
 7. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)*, Вища школа, Харьков (1988).
 8. А.М. Kosevich, *The Crystal Lattice (Phonons, Solitons, Dislocations)*, WILEY-VCH Verlag Berlin GmBH, Berlin (1999).
 9. А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейс, *Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении*, Мир, Москва (1965).
 10. А. Марадудин, *Дефекты и колебательный спектр кристаллов*, Мир, Москва (1968).
 11. Х. Бетгер, *Принципы динамической теории решетки*, Мир, Москва (1986).
 12. Ю.Г. Найдюк, Н.А. Черноплеков, Ю.Л. Шитиков, О.И. Шкляревский, И.К. Янсон, *ЖЭТФ* **83**, 1177 (1982).
 13. Ю.Г. Найдюк, И.К. Янсон, А.А. Лысых, Ю.Л. Шитиков, *ФТТ* **26**, 2734 (1984).
 14. Л.А. Фальковский, *Письма ЖЭТФ* **71**, 225 (2000).
 15. Л.А. Фальковский, *ЖЭТФ* **117**, 735 (2000).
 16. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, *ФТТ* **34**, 641 (1992).
 17. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, *ФТТ* **36**, 94 (1994).
 18. O. Braun and Yu.S. Kivshar, *Phys. Rep.* **306**, (1998).
 19. Г. Лейбфрид, Н.Бройер, *Точечные дефекты в металлах*, Мир, Москва (1981).
 20. В.И. Пересада, *Дисс. док. физ.-мат. наук*, Харьков, (1972).
 21. В.И. Пересада, *Физика конденсированного состояния*, ФТИНТ АН УССР, Харьков (1968), с. 172.
 22. В.И. Пересада, В.Н. Афанасьев, В.С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975).
 23. R. Haydock, in: *Solid State Phys.*, Н. Ehrenreich et al. (eds.), Academic Press, New York (1980), v. 35, p. 129.
 24. И.А. Господарев, А.В. Гришаев, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФТТ* **42**, 2153 (2000).
 25. М.А. Мамалуй, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФТТ* **38**, 3683 (1996).
 26. М.А. Мамалуй, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **24**, 8, 586 (1998).
 27. М.А. Мамалуй, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **25**, 586 (1999).
 28. Г. Сеге *Ортогональные многочлены*, Гос. изд-во физ.-мат. лит., Москва (1962).
 29. Н.И. Ахиезер, *Классическая проблема моментов*, Гос. изд-во физ.-мат. лит., Москва (1961).
 30. В.И. Пересада, В.П. Толстолужский, *О влиянии примесных атомов на термодинамические свойства ГЦК решетки*, Препринт ФТИНТ АН УССР, Харьков (1970).

31. В.И. Пересада, В.П. Толстолужский, *ФНТ* **3**, 788 (1977).
32. В.Н. Афанасьев, в сб.: *Физика конденсированного состояния*, ФТИНТ АН УССР, Харьков (1970), с. 10.
33. Г.Г. Сергеева, *ЖЭТФ* **48**, 158 (1965).
34. О.В. Ковалев, *Неприводимые представления пространственных групп*, изд-во АН УССР, Киев (1961).
35. А.Ф. Прихотько, В.Г. Манжелий, И.Я. Фуголь, Ю.Б. Гайдидей, И.Н. Крупский, В.М. Локтев, Е.В. Савченко, В.А. Слосарев, М.А. Стржемечный, Ю.А. Фрейман, Л.И. Шанский, *Криокристаллы*, Наукова думка, Киев (1983).
36. S.B. Feodosyev, I.A. Gospodarev, V.I. Grishaev, and E.S. Syrkin, *Fiz. Nizk. Temp.* **29**, 710 (2003).
37. S.B. Feodosyev, I.A. Gospodarev, M.A. Mamalui, and E.S. Syrkin, *J. Low Temp. Phys.* **111**, 441 (1998).

Local oscillations in crystal lattices with a simply connected region of the quasi-continuous phonon spectrum

A.V. Kotlyar and S.B. Feodosyev

It is shown, that the use of the oscillation classification, which is accepted in the J -matrices

method and is most natural in describing localized states, results in a very rapid convergence of the Green function for frequencies beyond the quasi-continuous spectral band of the crystal. This makes possible to derive rather general analytical expressions for the conditions of formation of local oscillations that are due to the existence of light impurity atoms in the crystal lattice whose quasi-continuous spectral region is simply connected. The accuracy of determining local oscillations frequencies and intensities by these expressions is illustrated with light substitutional impurities (isotopic and simply connected) in close-packed structures (fcc and hcp) and isolated pairs of isotopic impurities in the fcc crystal lattice. The results obtained can, in particular, be used to calculate simply and very accurately the fundamental lattice parameters and crystal imperfection by the known values of local frequencies.

Keywords: crystal lattice, phonon spectrum, Green function, Jacobi matrix, local vibration