

Колебательный спектр неупорядоченной линейной цепочки с легкими изотопическими примесями. Область исходной зоны

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

*Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины
пр. Вернадского, г. Киев, 3603142, Украина*

E-mail: ivanov@imp.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 18 ноября 2005 г., после переработки 6 февраля 2006 г.

Проведен расчет колебательного спектра неупорядоченных линейных цепочек с легкими примесями замещения внутри области невозмущенной зоны. Определена общая структура спектра и функция спектрального сдвига. Результаты численного счета сопоставлены с известными аналитическими выражениями. Исследован характер статистического распределения частот колебаний на различных участках спектра и показано, что при достаточной концентрации примеси на не слишком широких спектральных интервалах имеет место полностью хаотическое распределение собственных частот. Установлено, что в высокочастотной половине зоны по мере роста концентрации в спектре возникают все более отчетливые серии минимумов и максимумов, положение которых не зависит от концентрации и сгущается к внешнему краю зоны. Установлено выражение, которое определяет значения этих особых частот.

Проведено розрахунок коливального спектра неупорядкованих лінійних ланцюжків з легкими домішками заміщення усередині області незбуреної зони. Визначено загальну структуру спектра і функцію спектрального зсуву. Результати чисельного розрахунка зіставлені з відомими аналітичними виразами. Досліджено характер статистичного розподілу частот коливань на різних ділянках спектра і показано, що при достатній концентрації домішки на не занадто широких спектральних інтервалах має місце цілком хаотичний розподіл власних частот. Установлено, що у високочастотній половині зони при зростанні концентрації в спектрі виникають усе більш виразні серії мінімумів і максимумів, положення яких не залежить від концентрації і згущається до зовнішнього краю зони. Установлено вираз, що визначає значення цих особливих частот.

PACS: 63.22.+m

Ключевые слова: примесь, беспорядок, цепочка, фонон, спектр.

1. Введение

В работах [1,2] проанализирована структура колебательного спектра вблизи частоты локальной моды длинной неупорядоченной цепочки с легкими изотопическими примесями замещения. Представляет интерес рассмотреть, как внесение легких примесей изменяет плотность состояний внутри исходной зоны.

Очевидно, что с появлением все большего числа собственных частот в окрестности частоты локального колебания будет происходить уменьшение ко-

личества состояний внутри исходной зоны. Моды будут «вымываться» из зоны и переходить в область локальных колебаний. Причем это «вымывание» из основной зоны будет происходить не равномерно по всей шкале частот, а преимущественно из ее высокочастотного края. Аналитическое описание такого явления впервые дано И.М. Лифшицем [3]. Он использовал метод разложения плотности колебательных состояний в ряд по концентрации примесей. Однако этот метод не может быть эффективно применен для описания спектра в высокочастотной

области и при высокой концентрации примесей. Более эффективным может оказаться расчет спектра в рамках приближения когерентного потенциала [4], хотя и для такого подхода существуют ограничения на применимость на высокочастотном краю исходной зоны. Оба эти метода представляют спектр в виде гладкой монотонной функции, однако, как показывают численные расчеты, плотность состояний внутри основной акустической зоны имеет тонкую структуру и на ней наблюдается целый ряд максимумов и минимумов.

Ряд авторов изучали структуру спектра такой системы, в частности, в работах [5,6] с использованием метода матрицы переноса [7] было показано, что на определенных частотах в одномерных неупорядоченных цепочках не может быть колебаний.

В настоящей работе, используя численные расчеты спектра длинной неупорядоченной одномерной цепочки, основанные на методе Дина [8,9], будет проиллюстрировано изменение спектра внутри исходной акустической зоны при внесении в цепочку легких примесей и проведено сравнение численно рассчитанного спектра с аналитическими результатами, полученными как в линейном приближении по концентрации примесей, так и в рамках приближения когерентного потенциала. Рассмотрено образование неоднородностей на ряде частот внутри зоны, а также предложено выражение, определяющее положение этих неоднородностей.

2. Общая структура спектра и функция спектрального сдвига

В настоящей работе, как и в [1], рассматривается полностью неупорядоченная цепочка атомов двух сортов, взаимодействующих только со своими ближайшими соседями. Анализ проведен в рамках изотопической модели, когда атомы отличаются между собой лишь массами (c — концентрация легких атомов с массой m_d , m_0 — масса атомов матрицы, $\varepsilon = (m_0 - m_d)/m_0 > 0$ — дефект масс, а максимальная частота колебаний тяжелой матрицы принимается равной единице: $\omega_0^2 = 1$).

На рис. 1 показан общий вид плотности состояний $\rho(\omega^2)$ ($\int_0^1 \rho(\omega^2) d\omega^2 = 1$) внутри исходной зоны при дефекте масс $\varepsilon = 0,9$ и различных значениях концентрации легких атомов. На рисунке видно, что в области частот, меньших $1/2$, спектральная плотность является гладкой монотонной функцией, мало отличающейся от плотности состояний тяжелой матрицы (меньше примерно в $\sqrt{1-c\varepsilon}$ раз, в соответствии с приближением когерентного потенциала). Высокочастотная же область спектра, на-

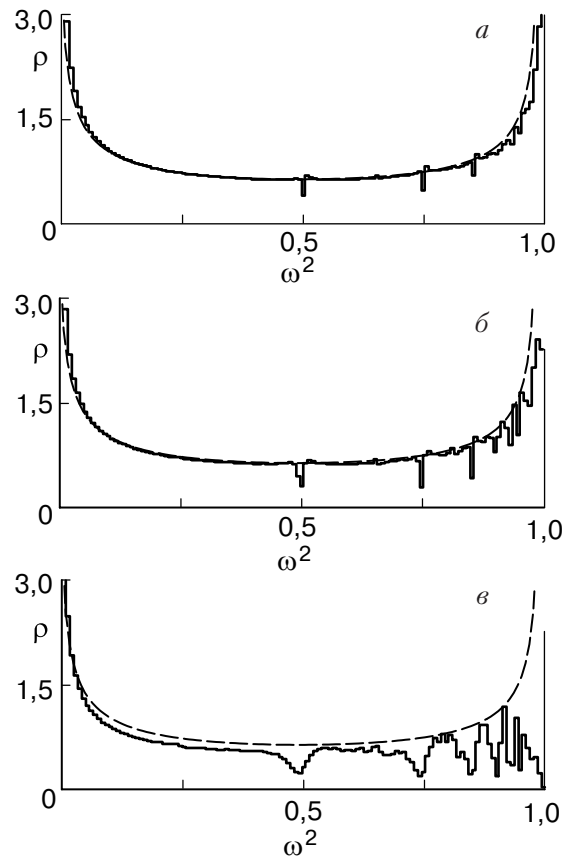


Рис. 1. Общий вид плотности состояний основной зоны линейной неупорядоченной цепочки с легкими примесями замещения при $\varepsilon = 0,9$ и следующих значениях концентраций c : $1/25$ (а); $1/10$ (б); $1/3$ (в). Пунктирной линией здесь и ниже показана плотность состояний тяжелой матрицы.

против, может становиться достаточно сильно изрезанной при повышении концентрации примесей. При этом в плотности состояний появляется целый ряд минимумов и максимумов, что впервые показал Дин [8].

Прежде чем перейти к рассмотрению тонкой структуры спектра, проанализируем, как ведет себя интегральная плотность состояний и определим характер заполнения различных частотных интервалов собственными частотами колебаний неидеальной цепочки.

Сравним численно рассчитанный спектр с хорошо известными аналитическими выражениями. Поскольку аналитические результаты не показывают тонкую структуру спектра, выберем так называемую функцию спектрального сдвига, которая сглаживает немонотонности внутри зоны:

$$\Delta P(\omega^2) = P(\omega^2) - P_0(\omega^2), \quad (1)$$

где $P(\omega^2) = \int_0^{\omega^2} \rho(x) dx$ — число состояний рассматриваемой неидеальной цепочки с частотами, меньши-

ми ω ; $P_0(\omega^2) = \int_0^{\omega^2} \rho_0(x) dx$ — та же величина для идеальной цепочки. Выбор величины $\Delta P(\omega^2)$ обусловлен, в том числе, тем, что она весьма чувствительна к наличию примесей в цепочке. В линейном приближении по концентрации [3] выражение (1) можно записать в следующем виде:

$$-\Delta P(\omega^2) = \frac{c}{\pi} \arctg\left(\frac{\varepsilon\omega}{\sqrt{1-\omega^2}}\right) + \frac{c}{2}\theta(\omega^2 - 1). \quad (2)$$

Таким образом, согласно (2), модуль спектрального сдвига стремится к $c/2$ при приближении к краю невозмущенной зоны, а на самом краю скачком возрастает на такую же величину.

Сравним это выражение с результатами численных расчетов. На рис. 2 показаны функции спектрального сдвига, вычисленные по методу Дина (непрерывная линия), и кривая, следующая из выражения (2) (пунктирная линия), для цепочки с дефектом масс $\varepsilon = 0,9$ при концентрациях легкой примеси $c = 1/10$ и $1/2$. Как видно на рисунке, при низких концентрациях расхождение между выражением (2) и численным расчетом имеет место только в некоторой окрестности верхнего края зоны. При высоких же концентрациях, в частности для $c \sim 1/2$, такое расхождение становится намного большим,

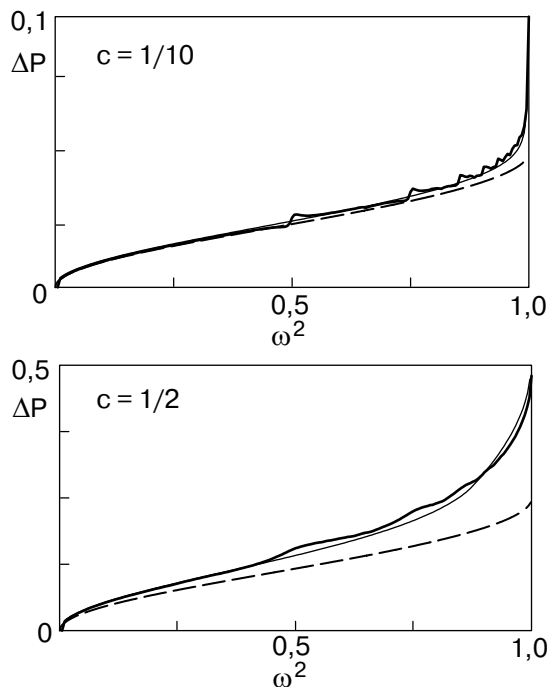


Рис. 2. Функция спектрального сдвига ΔP при $\varepsilon = 0,9$. Непрерывная линия — численный расчет, непрерывная тонкая линия получена в рамках приближения когерентного потенциала, пунктирная линия соответствует линейному приближению (2).

хотя в низкочастотной области ($\omega^2 < 1/2$) согласие, тем не менее, сохраняется.

Значительно более высокую точность дает расчет спектра в рамках приближения когерентного потенциала (ПКП) (см., например, [4]). Плотность состояний, рассчитанная в рамках ПКП, показана на рис. 2 тонкой сплошной линией. Видно, что в таком приближении хорошее согласие с результатами расчета по методу Дина сохраняется во всей области частот невозмущенной тяжелой матрицы при значениях концентрации легкой примеси вплоть до $c \sim 1/2$. Это не удивительно, поскольку хорошо известно (см., например, [10]), что критерий применимости ПКП хорошо выполняется внутри непрерывного спектра, за исключением его краев, в том числе при достаточно больших значениях параметра ε . Действительно, на рисунках, представленных ниже, такие расхождения будут хорошо видны вблизи верхнего края непрерывного спектра.

3. Исследование характера статистического распределения собственных частот

Представляет интерес рассмотреть характер распределения интервалов между отдельными частотами в области невозмущенного спектра. Очевидно, что в отсутствие примесей собственные частоты распределены равномерно и одинаково удалены друг от друга (если рассматривать относительно узкий спектральный интервал, на котором можно пренебречь изменением величины плотности состояний). Однако, как показывают численные расчеты, наличие даже одной примеси в многомиллионной цепочке приводит к довольно сильному смещению собственных частот. С увеличением концентрации происходит все большее смещение и перераспределение линий внутри зоны, а часть их переходит за край зоны — в область локальных колебаний.

Чтобы более подробно исследовать динамику перераспределения собственных частот колебаний при изменении концентрации примесных атомов, в том числе показать переход от упорядоченного к беспорядочному заполнению спектра, построим в шкале квадратов частот нормированную функцию распределения $p(r)$ интервалов r между соседними частотами колебаний ($\int_0^\infty p(r) dr = 1$). С этой целью вычислим частоты всех мод внутри некоторой области шириной $\Delta\omega^2$. Величину этой области будем выбирать достаточно небольшой, чтобы не учитывать изменения интервалов между частотами соседних мод вследствие изменения величины плотности состояний, но при этом содержащей достаточное для статистики количество собственных частот. На рис. 3

для различных значений концентраций приведены функции распределения $p(r)$ в области шириной $\Delta\omega^2 = 0,001$ вблизи частоты $\omega^2 = 0,3$. Для идеальной цепочки, как отмечалось, все собственные частоты расположены на одинаковых интервалах друг от друга: $\bar{r} = \Delta\omega^2/n$, где n — общее количество мод интервала $\Delta\omega^2$. Этот факт проявляется в наличии острого пика на рис. 3,а. С ростом концентрации примесей распределение $p(r)$ быстро уширяется (рис. 3,б,в), и при концентрациях, больших $c \approx 10^{-3}$, переходит в экспоненциальное распределение, соответствующее тому, что все имеющиеся здесь частоты хаотически разбросаны по интервалу:

$$p(r) = \frac{1}{\bar{r}} \exp\left(-\frac{r}{\bar{r}}\right). \quad (3)$$

Единственный параметр такого распределения — средняя величина интервала между частотами \bar{r} .

Такой случайный характер распределения интервалов наблюдается не только в области, где плотность состояний — монотонная функция, но, как показывают проведенные расчеты, даже там, где спектр имеет ярко выраженную структуру.

Другим критерием оценки случайности распределения собственных частот может выступать дисперсия количества мод, попадающих в фиксированный частотный интервал. Для количественного определения этой величины снова рассмотрим некоторый интервал $\Delta\omega^2$ и разобьем его на K равных ячеек. Размер одной ячейки Δ выберем таким образом, чтобы в него попадало достаточное для статистики количество мод (в данных расчетах использованы ячейки, в которые попадает порядка 10^2 собственных частот), а количество ячеек $K = \Delta\omega^2/\Delta$ — достаточным для усреднения дисперсии (в нашем случае всегда $K = 10^3$).

Для удобства определим дисперсию распределения частот D как дисперсию величины $n_k/\sqrt{\bar{n}_k}$, т.е.

$$D = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \frac{(n_k - \bar{n}_k)^2}{\bar{n}_k}, \quad (4)$$

где n_k — количество частот в k -й ячейке, \bar{n}_k — их среднее значение. Можно отметить, что из-за зависимости плотности состояний от частоты значения \bar{n}_k будут, вообще говоря, не одинаковыми для различных ячеек. Поэтому значения \bar{n}_k , в принципе, должны вычисляться путем генерации большого числа цепочек с одинаковыми параметрами с последующим усреднением по реализациям цепочек. Однако для большинства областей спектра, где отсутствуют особенности в плотности состояний, для нахождения \bar{n}_k достаточно ограничиться простыми оценками, например, в приближении когерентного потенциала.

При анализе дисперсии D в первую очередь отметим, что в идеальной цепочке, когда соседние частоты расположены на одинаковом расстоянии друг от друга, дисперсия будет иметь практически нулевое значение. Некоторое отличие значения D от нуля возникает в этом случае за счет несоразмерности ширины ячеек с частотными интервалами между отдельными модами и имеет порядок $1/N_\Delta$, где $N_\Delta = \sum_k \bar{n}_k$ (общее число собственных частот на

рассматриваемом интервале $\Delta\omega^2$. При увеличении концентрации примесей число частот внутри каждой ячейки уже не будет постоянным, что приведет

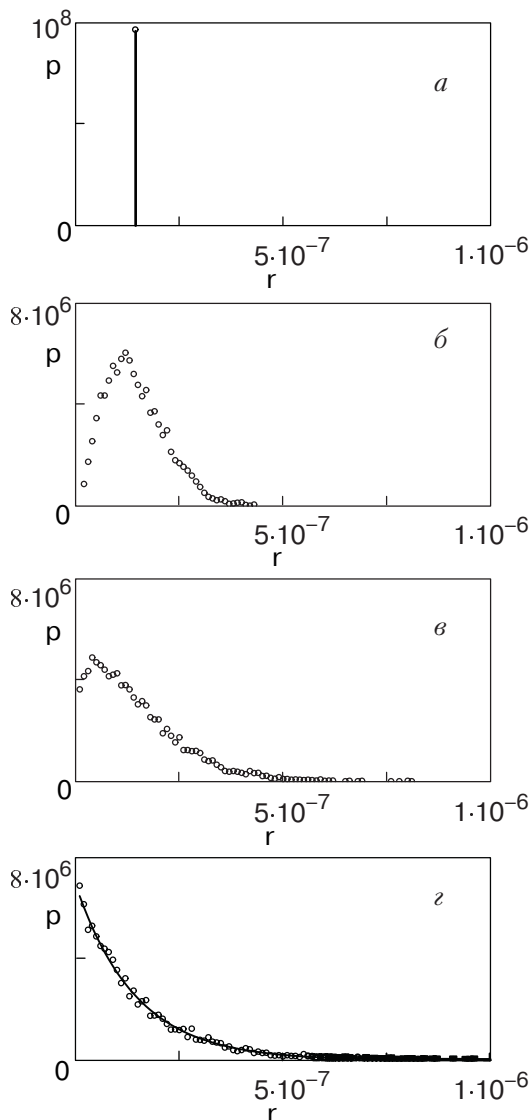


Рис. 3. Распределение расстояний между соседними уровнями в области частот $\omega^2 = (0,3; 0,31)$ при $\varepsilon = 0,9$. Кружками показаны численные значения, непрерывной линией — рассчитанные аналитически: идеальная цепочка (а); $c = 10^{-6}$ (б); 10^{-5} (в); 10^{-3} (г).

к возрастанию дисперсии. Наконец, при некоторой, все еще относительно небольшой концентрации, распределение частот становится полностью случайным, а соответствующая величина дисперсии D должна стремиться к единице.

На рис. 4,а показана зависимость дисперсии от концентрации примеси вблизи частоты $\omega^2 = 0,3$, где приведены зависимости для двух различных размеров ячейки, отличающихся друг от друга в десять раз. При очень низких концентрациях примеси (меньших 10^{-5}) величина дисперсии мала и имеет порядок величины, связанный с отмеченной выше

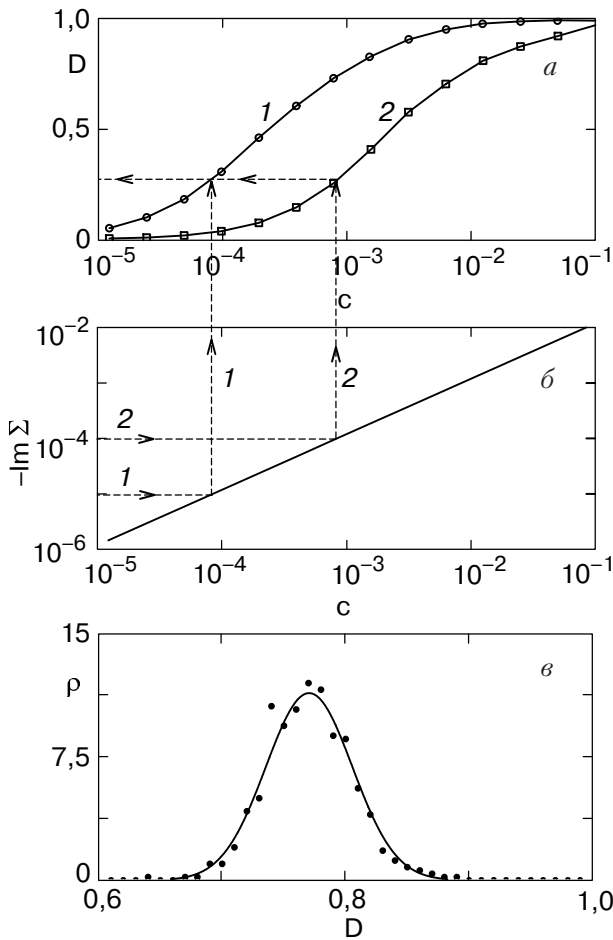


Рис. 4. а – Зависимость дисперсии заполнения интервала D от концентрации примеси в области спектра $\omega^2 = 0,3$ при $\varepsilon = 0,9$ и следующих размерах ячейки Δ : 10^{-5} (1), 10^{-4} (2). Точки, отвечающие каждому значению дисперсии, получены в результате усреднения по 10^3 реализациям цепочки длиной $N = 10^7$. б – Зависимость мнимой части собственной энергии от концентрации примеси. в – Функция распределения $\rho(D)$ значений дисперсии D при $\omega^2 = 0,3$, $\varepsilon = 0,9$, $c = 10^{-3}$, $\Delta = 10^{-5}$. Точками обозначены численные значения, полученные при 500 реализациях цепочки и интервале разбиения $\Delta D = 0,01$. Сплошная линия – интерполяция гауссовским распределением при $\bar{D} = 0,77$ и ширине распределения $\sigma = 0,035$.

несоразмерностью ячеек и интервалов между частотами. Это еще раз подтверждает, что при низких концентрациях имеет место практически эквидистантное распределение собственных частот. При увеличении концентрации примесей значение D растет, и в некоторой характерной области концентраций (которая зависит от ширины ячейки и ее расположения на шкале частот) происходит насыщение, так что дисперсия, как уже отмечалось выше, выходит на единичное значение, отвечающее полностью случайному распределению собственных частот. Соответственно, и флуктуации числа частот внутри каждой ячейки должны отвечать случайному распределению, т.е. иметь порядок величины $\sqrt{n_k}$.

Тот факт, что величина дисперсии D действительно является статистически достоверной величиной, слабо зависящей от заданной реализации цепочки, демонстрирует рис. 4,в. Здесь для одной из концентраций приведена нормированная на единицу функция распределения значений величины D , рассчитанная для набора различных реализаций цепочек. Видно, что ширина этого распределения σ небольшая и при рассмотренных значениях параметров оказывается равной 0,035.

Оценим качественно характерные величины концентраций, при которых происходит переход к полностью случайному распределению собственных частот. Для этого воспользуемся значением собственной энергии $\Sigma(c, \omega^2)$, рассчитанной в приближении когерентного потенциала [10]. Величина $\Sigma(c, \omega^2)$ описывает сдвиг и уширение исходной моды колебаний цепочки частотой ω . На ее значении сказывается как смещение, так и хаотичный разброс собственных частот, обусловленный наличием в цепочке примесей. Поэтому можно предположить, что в случае, когда выбранный размер ячейки Δ будет больше, чем значение $\text{Im } \Sigma(c, \omega^2)$ (на соответствующей частоте и при рассматриваемой концентрации), флуктуации смещений собственных частот так же окажутся меньше, чем Δ . В результате степень стохастичности распределения собственных частот будет относительно небольшой, а значение дисперсии $D \ll 1$. Наоборот, если $\text{Im } \Sigma(c, \omega^2) > \Delta$, то величина дисперсии $D \rightarrow 1$.

Наряду с зависимостью от концентрации параметра D (рис. 4,а), на рис. 4,б при тех же значениях частот в двойном логарифмическом масштабе приведена зависимость от концентрации величины $\text{Im } \Sigma(c, \omega^2)$. Здесь же горизонтальными штрих-пунктирными линиями показаны значения Δ , для которых были произведены расчеты дисперсии. Видно, что в рассмотренных случаях при тех значениях концентрации, для которых выполняется условие

$$\Delta = \text{Im} \Sigma(c, \omega^2), \quad (5)$$

дисперсия имеет приблизительно одно и то же значение: $D \approx 0.25$. Аналогичные расчеты, проведенные на других частотных интервалах и с другими значениями дефекта масс, подтверждают этот результат. Таким образом, выражение (5) действительно может быть использовано в качестве оценки тех характерных значений концентрации, при которых заполнение отдельной ячейки происходит случайным образом, а число мод в ней флуктуирует как число частиц в выделенном объеме бoльцмановского газа.

Представляет интерес отметить еще одну возможность использования введенной здесь дисперсии для качественного анализа структуры спектра: для достаточно быстрого определения тех областей спектра, где плотность состояний имеет существенно немонотонный характер, связанный с возникновением достаточно узких пиков или провалов. Если для таких участков спектра в выражении (4) для среднего числа частот в некоторой ячейке \bar{n}_k вместо его значения, полученного в результате усреднения по различным реализациям цепочки, использовать наперед заданное значение, вычисленное, например, в приближении когерентного потенциала, то нетрудно видеть, что величина D может оказаться больше и даже много больше единицы. Так, для участка спектра $\omega^2 = (0,97; 0,98)$, на котором находится несколько максимумов и минимумов, вычисленное таким образом значение рассматриваемого параметра при концентрации $c = 1/10$ оказывается равным $D = 5,37$ для $\varepsilon = 0,5$ и $D = 9,97$ для $\varepsilon = 0.9$. Следовательно, анализ значений дисперсии позволяет сразу выделить участки спектра с существенными особенностями в плотности состояний, а затем уже более подробно рассматривать эти области.

4. Структура неоднородностей внутри зоны

В работах [5,6] было показано, что в спектрах неупорядоченных цепочек могут возникать серии частот, на которых плотность колебательных состояний равна нулю: $\rho(\omega^2) = 0$. В использованных в настоящей работе обозначениях эти частоты равны

$$\omega_{p,q}^2 = \omega_{\max}^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{2} \frac{p-q}{p}\right), \quad (6)$$

где $\omega_{\max}^2 = (1 - \varepsilon)^{-1}$ — квадрат максимальной частоты колебаний цепочки, состоящей только из легких атомов, p и q — целые положительные числа, причем $p > q$, а допустимые значения чисел q , определяющие номера серий линий, ограничены следующими неравенствами:

$$q \leq \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \leq \text{ctg}^2 \frac{\pi}{2(q+1)}.$$

При этом первая из этих серий, соответствующая $q = 1$ и всем $p > 1$, образуется при отношении массы легкого атома к тяжелому меньшем $1/2$ ($\varepsilon > 1/2$). При отношении масс меньшем $1/3$ ($\varepsilon > 2/3$) будет образовываться вторая серия, отвечающая $q = 2$, при $\varepsilon > 3/4$ — третья и так далее. В [5] было сделано утверждение, что численные расчеты, проведенные Дином [8], указывают на наличие в спектрах неупорядоченных цепочек именно таких «запрещенных» областей. Однако этот вывод требует все же более подробного анализа и, как будет показано ниже, не согласуется с полученными в настоящей работе результатами для тяжелой матрицы с легкими примесями.

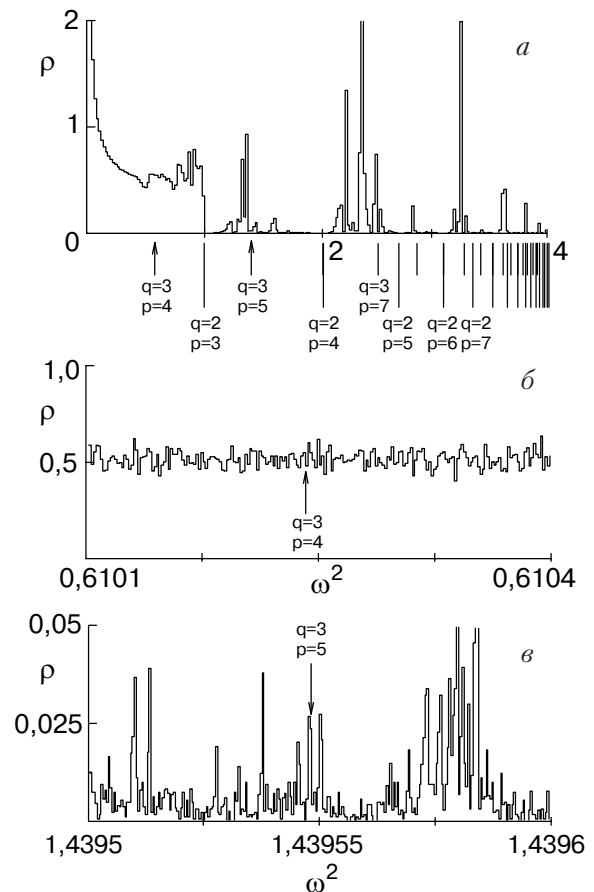


Рис. 5. Плотность состояний неупорядоченной цепочки при $\varepsilon = 0,76$ и $c = 1/3$. Ниже горизонтальной оси отмечены положения частот, отвечающие ряду (5) с соответствующими значениями чисел p и q : а — общая структура спектра; б — область внутри исходного спектра вблизи частоты, отвечающей выражению (6) при $q = 3$, $p = 4$; в — область вне исходного спектра вблизи частоты, отвечающей $q = 3$, $p = 5$.

На рис. 5 показана плотность состояний, рассчитанная при дефекте масс $\varepsilon = 0,76$ и концентрации $c = 1/3$.

Линиями, проведенными ниже горизонтальной оси, обозначены частоты, отвечающие выражению (6), на некоторых из которых для наглядности указаны соответствующие значения p и q . Как видно, большинство указанных частот лежит выше максимальной частоты колебаний цепочки, состоящей только из тяжелых атомов, и сгущаются к максимальной частоте ω_{\max}^2 . Начиная с $\varepsilon = 2/3$ некоторые из частот (6) попадают внутрь спектра исходной тяжелой цепочки. Так, при $\varepsilon = 0,76$ такой частотой является $\omega^2 = 0,61019420$, отвечающая $q = 3$ и $p = 4$. При больших значениях дефекта масс таких частот будет все больше, так, например, для $\varepsilon = 0,9$ их будет семь.

Однако в рамках проведенных здесь расчетов не обнаруживается ни глубоких минимумов, ни заметных особенностей в плотности колебательных состояний на таких частотах. Так, на рис. 5 подробно показана плотность состояний $\rho(\omega^2)$ в окрестности одной частоты, определенной в (6), при $\varepsilon = 0,76$. Видно, что в этой области не наблюдается никаких особенностей в спектре, превышающих обычный статистический разброс, который был рассмотрен в предыдущем разделе. Таким образом, настоящие расчеты указывают на отсутствие в спектрах неупорядоченных цепочек «запрещенных» областей с шириной, превышающей среднее расстояние между модами, где бы $\rho(\omega^2) = 0$ и положение которых определялось бы выражениями (6), по крайней мере для области спектра, отвечающей исходному спектру цепочки атомов тяжелого изотопа. Аналогичные расчеты (см. рис. 5,в) показывают, что и вне исходной зоны тяжелых атомов не всегда возникают области с нулевой плотностью состояний на частотах, определенных в (6). Здесь спектр, скорее, имеет иерархическую структуру, аналогичную рассмотренной в [1,2], даже при достаточно высокой концентрации легких атомов.

Как было сказано выше, для цепочки с легкими примесями спектр внутри исходной зоны, тем не менее, имеет ряд достаточно острых минимумов и максимумов в высокочастотной области, которые сгущаются к частоте $\omega_0^2 = 1$ (рис. 1). Можно попытаться описать положение частот таких особенностей с помощью выражения, подобного (6). С этой целью запишем его в следующем виде:

$$\omega_{i,j}^2 = \sin^2\left(\frac{\pi}{2} \cdot \frac{i-j}{i}\right), \quad j = 1, \dots, i-1, \quad (7)$$

т.е. вместо предельной частоты $\omega_{\max}^2 = (1-\varepsilon)^{-1}$ цепочки легких атомов здесь подставлена максималь-

ная частота тяжелой матрицы: $\omega_0^2 = 1$. Это выражение соответствует j -му колебанию цепочки, состоящей из $i+1$ тяжелого атома с закрепленными концами. В неупорядоченной цепочке выражение (7) в первом приближении соответствует частотам резонансов, обусловленных отрезками, содержащими $i-1$ тяжелый атом, с обеих сторон от которых расположены легкие примесные атомы, на которых происходит отражение звуковой волны. Действительно, на рис. 1 наблюдаются особенности плотности состояний на частотах $\omega^2 = 0,5; 0,75; 0,854$ и так

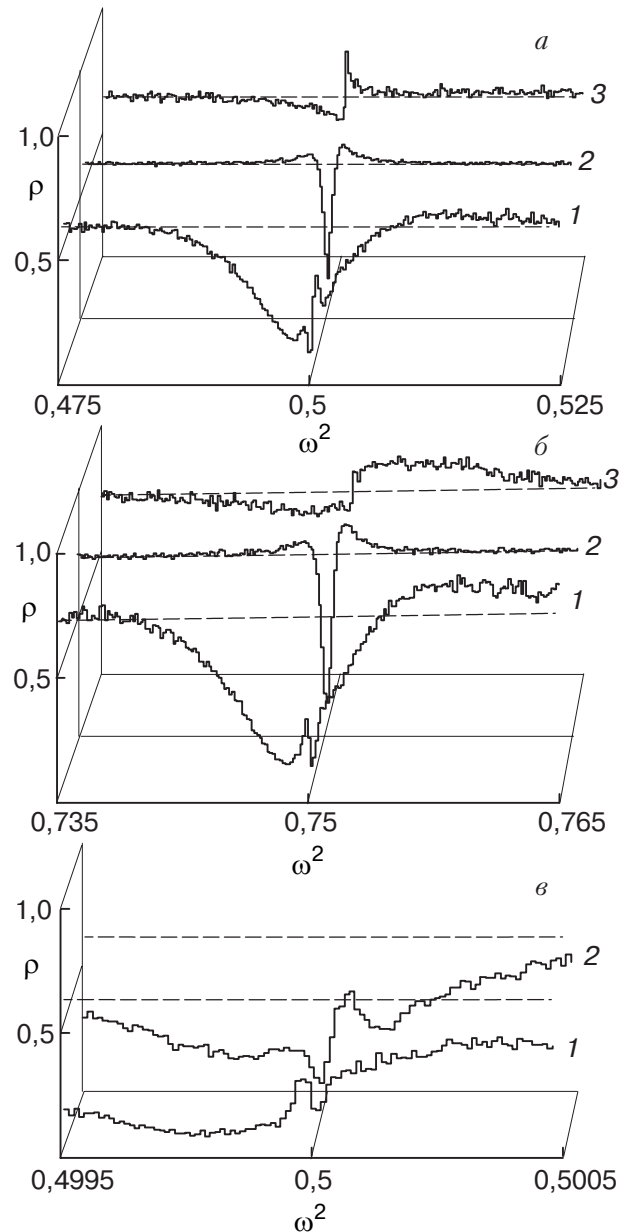


Рис. 6. Плотность состояний внутри зоны на разных участках спектра: а и б — $\varepsilon = 0,9$, $c = 1/10$ (1); $\varepsilon = 0,9$, $c = 1/100$ (2); в — $\varepsilon = 0,5$, $c = 1/10$ (3); в — $\varepsilon = 0,9$, $c = 1/10$ (1); $\varepsilon = 0,9$, $c = 1/100$ (2).

далее, что соответствует частотам (7) для $j = 1$ и $i = 1, i = 2, i = 3$.

Рассмотрим подробнее поведение плотности состояний в окрестности этих частот. На рис. 6 приведен спектр в районах первых двух частот ($\omega^2 = 0,5; 0,75$) ряда (7). Видно, что на плотности состояний имеется провал в окрестности частоты (7) и пик, который расположен справа от этой частоты. На рис. 6,а,б ширины особенностей спектра уменьшаются с понижением концентрации примесей (кривые 1 и 2). Глубина провала практически одинакова для различных концентраций, что более наглядно показано на рис. 6,в, на котором в крупном масштабе представлена плотность состояний в окрестности $\omega^2 = 0,5$. Численный расчет спектра для ряда концентраций показал, что ширина на полуглубине данных провалов практически линейно зависит от концентрации примеси. Форма и глубина этих минимумов, напротив, зависит от дефекта масс и мало зависит от концентрации (рис. 6а,б, кривые 1 и 3). Как и в случаях, описанных в работах [5], провал в плотности состояний «открывается» при массе примеси менее чем одна вторая от массы примеси основного кристалла.

В высокочастотной области при достаточно большом отношении масс атомов примесного и основного типов спектр так же состоит из серий провалов и пиков, частоты которых полностью соответствуют выражению (7). На рис. 7 представлена динамика изменения верхнего края зоны при уменьшении массы примеси. Толстая непрерывная линия соответствует численно рассчитанному спектру, тонкая непрерывная — расчет в рамках ПКП, пунктир — спектр идеальной цепочки. На рисунке приведена расшифровка индексов i и j выражения (7) для некоторых максимумов и минимумов в спектре. Как видно, при дефекте масс, когда параметр $\varepsilon \gtrsim 0,5$, в спектре появляются максимумы, частоты которых с высокой точностью соответствуют первому ряду при $i = 1$, при дальнейшем уменьшении массы примеси на месте этих максимумов возникают минимумы, а на частотах второго ряда ($j = 2$) возникает серия максимумов. Как показали вычисления спектра для других концентраций, амплитуда особенностей в спектре возрастает с уменьшением массы примеси, а их ширина возрастает с увеличением концентрации примеси.

5. Заключение

Проведен расчет колебательного спектра неупорядоченных линейных цепочек с легкими примесями замещения внутри исходной акустической зоны. Сравнение численно рассчитанного спектра с известными аналитическими выражениями показало, что для низкой концентрации примеси ($c < 1/10$)

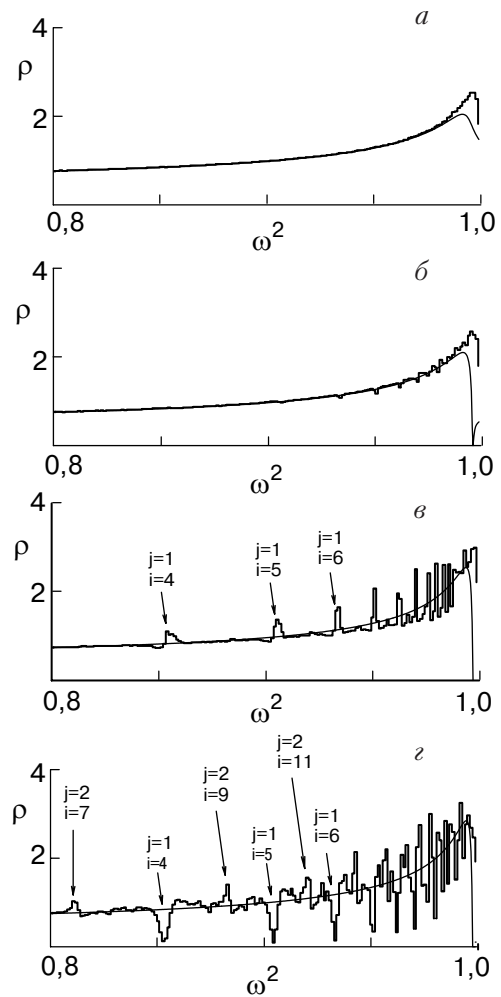


Рис. 7. Плотность состояний вблизи верхнего края зоны тяжелой матрицы ($c = 1/10$) при $\varepsilon = 0,2$ (а); $0,3$ (б); $0,5$ (в); $0,9$ (г). Непрерывная линия — численный расчет, тонкая непрерывная — расчет в рамках ПКП. Стрелками обозначены частоты ряда (7) с соответствующими значениями чисел i и j .

сглаженный спектр практически на всем интервале частот (за исключением высокочастотного края зоны) можно с достаточной точностью описать в рамках линейного приближения по концентрации. Для высокой концентрации примеси линейное приближение дает приемлемую точность только на низкочастотной половине спектра. Для эффективного расчета спектра при любых концентрациях (вплоть до $c \sim 1/2$) и практически на всем интервале частот основной зоны можно использовать приближение когерентного потенциала.

Детальное рассмотрение участков спектра меньших ширины исходной акустической зоны показало, что в идеальной цепочке все собственные частоты расположены упорядоченно и на одинаковом расстоянии друг от друга, но внесение в цепочку, состоящую из сотен миллионов атомов, даже од-

ной примеси нарушает их эквидистантность. С ростом концентрации примеси распределение частотных интервалов между двумя соседними модами становится экспоненциальным, что отвечает их хаотическому распределению. Предложен статистический параметр D , имеющий характер определенным образом выбранной дисперсии, который может служить мерой случайности в распределении собственных частот.

Показано, что в высокочастотной части исходной зоны, начиная с ее середины, в спектре неидеальной цепочки возникает достаточно сложная структура, состоящая из серий минимумов и максимумов, положение которых сгущается к высокочастотному краю зоны. Такая структура отчетливо проявляется с уменьшением массы примесей, когда параметр ϵ становится порядка или больше 0,5. Приведено выражение, которое определяет частоты этих особенностей в спектре, и рассмотрена структура первых двух наиболее интенсивных минимумов.

В дальнейшем представляется интересным продолжить численные исследования колебательных спектров длинных неупорядоченных линейных цепочек: рассмотреть, как влияет внесение тяжелых примесей на структуру спектра внутри зоны невозмущенного кристалла, а также сравнить полученную численно плотность состояний с имеющимися аналитическими выражениями.

1. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, В.С. Молодид, *ФНТ* **30**, 217 (2004).
2. М.А. Иванов, В.С. Молодид, Ю.В. Скрипник, *ФНТ* **30**, 1086 (2004).
3. И.М. Лифшиц, Г.И. Степанова, *ЖЭТФ* **33**, 485 (1956).
4. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, *ФТТ* **32**, 2965 (1990).

5. J. Hori, *Progr. Theor. Phys.* **31**, 940 (1964).
6. H. Matsuda, *Prog. Theor. Phys.* **31**, 161 (1964).
7. R.E. Borland, *Proc. Phys. Soc.* **83**, 1027 (1964).
8. P. Dean, *Proc. Roy. Soc.* **A254**, 507 (1960).
9. P. Dean, *Proc. Roy. Soc.* **A260**, 263 (1961).
10. Yu.V. Skrypyk, B.I. Min, and V.S. Molodid, *Phys. Rev.* **B70**, 224203 (2004).

Vibrational spectrum of one-dimensional linear chain with light isotopic impurities. Initial band domain

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

The vibrational spectra of disordered linear chains with light substitutional impurities were calculated inside the unperturbed band domain. The overall structure of the spectra and the spectral shift function were determined. The numerical results were compared to the known analytical expressions. The character of statistical distribution of vibrational frequencies were investigated in different spectral domains. It is shown that for an appropriate concentration of impurities there is a completely chaotic distribution of frequencies in not too wide spectral intervals. It is found that in a high-frequency part of the band more and more distinct series of minima and maxima appear with increasing in the impurity concentration, the positions of which do not depend on concentration and crowd together towards the band edge. An expression which determines these particular frequencies is derived.

Keywords: impurity, disorder, chain, phonon, spectrum.