

Локализация колебаний на дефектах в одномерных структурах со сложной элементарной ячейкой

М. А. Мамалуй, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,
Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: syrkin@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 16 марта 1998 г.

Получены точные аналитические выражения для функций Грина линейной цепочки с двухатомной элементарной ячейкой, содержащей изотопическую примесь замещения. Рассмотрены бесконечная цепочка и полуограниченная цепочка с примесью на свободном конце. Исследованы полное изменение фононного спектра, а также спектральные плотности колебаний примеси и ее ближайших соседей. Проанализированы условия возникновения и характеристики локальных и щелевых колебаний. Для широкого класса одномерных систем предложен общий способ получения точных решений методом якобиевых матриц.

Одержано точні аналітичні вирази для функцій Гріна лінійного ланцюжка з двохатомною елементарною коміркою, що містить ізотопічний домішок заміщення. Розглянуто необмежений ланцюжок і напівобмежений ланцюжок з домішком на вільному кінці. Досліджено повну зміну фононного спектра, а також спектральні густини коливань домішку та його найближчих сусідів. Проаналізовано умови виникнення та характеристики локальних та щілинних коливань. Для широкого класу одновимірних систем запропоновано загальний засіб отримання точних рішень методом якобійових матриць.

PACS: 61.72.-y; 68.35.-p

Получение точных аналитических выражений для колебательных характеристик линейных цепочек является одной из важнейших задач динамики кристаллической решетки. Точно решаемые одномерные модели традиционно применяются для определения основных закономерностей в поведении фононных спектров реальных трехмерных кристаллов и нередко используются для контроля и интерпретации асимптотических и численных результатов, получаемых для моделей более сложных и близких к реальности (см., например, [1–3]). Тем более, что квазиодномерное поведение квазичастичных возбуждений характерно не только для квазиодномерных систем. Оно присуще отдельным низкочастотным модам, отщепляющимся в слоистых кристаллах [4,5]. Такие моды имеют место даже в трехмерных кристаллических структурах, далеких от низкоразмерности по своим макроскопическим

свойствам, для которых характерно ослабление дальнего порядка кристаллической регулярности расположения атомов и значительная локальная анизотропия межатомного взаимодействия [6]. Так, в работах [7,8] результаты экспериментального исследования низкочастотной динамики сложных многослойных кристаллов $KDy(MoO_4)_2$ и $CsDy(MoO_4)_2$ весьма успешно интерпретировались на примере фононного спектра линейной цепочки с двухатомной элементарной ячейкой. Наличие отщепившихся квазиодномерных мод в фононных спектрах решеток с большим числом атомов в элементарной ячейке может служить обоснованием для изучения на основе одномерных моделей нелинейных свойств высокотемпературных сверхпроводников [9] и других ангармонических кристаллов. Данное обстоятельство также обуславливает повышенный

интерес к получению точных решений для гармонических колебаний линейных цепочек с более чем одним атомом в элементарной ячейке как нулевого приближения для анализа нелинейных свойств кристаллов, имеющих щель в колебательном спектре.

Интерес к одномерным моделям, в особенности со сложной элементарной ячейкой, возрос в связи со значительными успехами в синтезе практически одномерных структур, которые находят свое применение в микроэлектронике как один из элементов сверхминиатюрных полупроводниковых устройств [10]. Для интерпретации происходящих процессов необходим анализ поведения квазичастичных (в частности, фононных) спектров линейных цепочек с многоатомной элементарной ячейкой, содержащих разного рода дефекты (цепочка с примесями, полуограниченная цепочка, цепочка, ограниченная с обеих сторон, и т.д.). В последнее время появился ряд работ, посвященных рассмотрению таких задач. Так, в [11] были получены аналитические асимптотические выражения для частот и амплитуд колебаний атомов двухатомной линейной цепочки с изотопической примесью замещения. Колебательные моды ограниченной с обеих сторон двухатомной линейной цепочки рассмотрены в [12]. Особое внимание в этих работах уделялось колебаниям, локализованным в щели или за пределами квазисплошного спектра цепочки, что является особенно актуальным для анализа как квазиодномерного поведения трехмерных структур, так и характеристик синтезированных одномерных систем. Мощным и эффективным аппаратом для расчета колебательных характеристик кристаллов с нарушенной регулярностью в расположении атомов и особенно для описания локализованных колебаний является метод якобиевых матриц (рекурсивный метод) [13–15]. Применение этого метода позволило получить точные аналитические выражения для условий образования и характеристик локализованных колебаний, сформированных различными дефектами в линейной цепочке с одноатомной элементарной ячейкой, а также полное изменение дефектом сплошного спектра цепочки и частотные спектры отдельных атомов [16,17].

В настоящей работе методом якобиевых матриц получены точные аналитические выражения для условия возникновения и характеристик локальных и щелевых колебаний в линейной цепочке с двухатомной элементарной

ячейкой, содержащей изотопическую примесь замещения. Рассмотрены бесконечная цепочка и полуограниченная цепочка с примесью на свободном конце. Для широкого класса одномерных систем предложен общий метод получения точных решений.

Получение методом якобиевых матриц точных решений для одномерных колебательных систем

В методе якобиевых матриц все пространство смещений атомов цепочки H с помощью соответствующего выбора порождающих векторов $\mathbf{h}_0^{(i)}$ представим в виде прямой суммы ортогональных подпространств $H^{(i)}$, инвариантных относительно описывающего колебания цепочки оператора \mathbf{L} :

$$\mathbf{L}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\sqrt{m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}')}}$$

(так называемых циклических подпространств). Эти подпространства являются линейными оболочками, натянутыми на последовательность

линейно независимых векторов $\{\mathbf{L}^n \mathbf{h}_0^{(i)}\}_{n=0}^{\infty}$.

Ортонормализовав данную последовательность,

получим ортогональный базис $\{\mathbf{h}_n^{(i)}\}_{n=0}^{\infty}$, в

котором оператор $\mathbf{L}^{(i)}$, индуцированный

оператором \mathbf{L} в подпространстве $\mathbf{H}^{(i)}$, представляется в виде трехдиагональной якобиевой матрицы (\mathbf{J} -матрицы). Ее диагональные

матричные элементы будем обозначать $a_n^{(i)}$

($n = 0, 1, 2, \dots$), а недиагональные — $b_n^{(i)}$,

причем нумерующий подпространства верхний индекс (i) будем использовать только в тех случаях, когда будет необходимо различать разные циклические подпространства.

Частотные распределения колебаний атомов системы обычно выражаются через матричные элементы гриновского оператора $\mathbf{G} = (\lambda \mathbf{I} - \mathbf{L})^{-1}$ (λ — квадрат частоты — собственное значение оператора \mathbf{L}). Если в качестве порождающего вектора выбрать $\mathbf{h}_0 = |\mathbf{r} | \mathbf{u} \rangle \in H$ — смещение \mathbf{u} атома с радиус-вектором \mathbf{r} , то матричный элемент $G_{00}(\lambda) \equiv (\mathbf{h}_0, \mathbf{G} \mathbf{h}_0)$ будет содержать полную информацию о частотных характеристиках колебаний системы, в которых данный атом перемещается вдоль \mathbf{u} . Условия наличия у $G_{00}(\lambda)$ мнимой части определяют границы полос сплошного спектра колебаний, а сама мнимая

часть будет характеризовать частотное распределение колебаний данного атома внутри этих полос. Нормированная на единицу спектральная плотность равна

$$\rho_0(\lambda) = \frac{1}{\pi} \text{Im } G_{00}(\lambda). \quad (1)$$

Функция распределения квадратов частот $g(\lambda)$ равна среднему арифметическому спектральных плотностей, обусловленных линейно независимыми порождающими векторами $\mathbf{h}_0^{(i)}$.

Функция $G_{00}(\lambda)$ может иметь полюсы только вне сплошного спектра, т.е. в той области, где она является чисто вещественной функцией. Эти полюсы λ_d определяют квадраты дискретных частот колебаний (локальных или щелевых). Вычеты в данных полюсах

$$\mu_{d,0} = \text{rés}_{\lambda=\lambda_d} G_{00}(\lambda) \quad (2)$$

будут интенсивностями (или весами) данных колебаний.

Усредненный по времени квадрат амплитуды колебаний атома с радиус-вектором \mathbf{r} как функция квадрата частоты и температуры прямо пропорционален $\rho(\lambda)$ для колебаний с частотой, лежащей в полосе сплошного спектра, и $\mu_{d,0}$ для колебаний с дискретной частотой.

Если область непрерывного спектра односвязна и не имеет «люков», то матричные элементы \mathbf{J} -матрицы с ростом номера стремятся к некоторым предельным величинам, зависящим от значений верхней и нижней границ сплошной полосы [13]. Приравняв этим предельным значениям все a_i и b_i при $i \geq n$, для функции Грина получим [14,15]

$$G_{00}(\lambda) = \frac{Q_n(\lambda) - b_{n-1}Q_{n-1}(\lambda)K_\infty(\lambda)}{P_n(\lambda) - b_{n-1}P_{n-1}(\lambda)K_\infty(\lambda)}, \quad (3)$$

где функция $K_\infty(\lambda)$ выражается через предельные значения матричных элементов; $P_m(x)$ — полиномы, определяемые рекуррентным соотношением

$$b_m P_{m+1}(x) = (x - a_m)P_m(x) - b_{m-1}P_{m-1}(x) \quad (4)$$

при начальных условиях: $P_{-1}(x) \equiv 0$; $P_0(x) \equiv 1$, а полиномы $Q_m(x)$ определяются таким же рекуррентным соотношением, но при начальных условиях $Q_0(x) \equiv 0$; $Q_1(x) \equiv 1/b_0$.

Несложно убедиться, что векторы ортонормированного базиса $\left\{ \mathbf{h}_n^{(i)} \right\}_{n=0}^\infty$ связаны

важным для нашего дальнейшего рассмотрения соотношением

$$\mathbf{h}_n = P_n(\mathbf{L})\mathbf{h}_0. \quad (5)$$

Если область непрерывного спектра многосвязна, то асимптотическое поведение матричных элементов \mathbf{J} -матрицы может быть весьма сложным [19]. Однако в случае моделей линейных цепочек с многоатомными элементарными ячейками асимптотическое поведение данных элементов часто оказывается периодическим

$$\lim_{m \rightarrow \infty} a_{i+mk} = \alpha_i; \quad \lim_{m \rightarrow \infty} b_{i+mk} = \beta_i. \quad (6)$$

Тогда из (3) следует

$$K_\infty(\lambda) = \frac{\tilde{P}_k(\lambda) + \beta_{k-1} \tilde{Q}_{k-1}(\lambda) \pm \sqrt{[\tilde{P}_k(\lambda) - \beta_{k-1} \tilde{Q}_{k-1}(\lambda)]^2 - 4}}{2\beta_{k-1} \tilde{P}_{k-1}(\lambda)}, \quad (7)$$

где полиномы $\tilde{P}_n(\lambda)$ и $\tilde{Q}_n(\lambda)$ построены с помощью матричных элементов α_i и β_i .

Для спектральной плотности $\rho_0(\lambda)$ из (1) и (3) следует

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{\text{Im } K_\infty(\lambda)}{|P_n(\lambda) - b_{n-1}P_{n-1}(\lambda)K_\infty(\lambda)|^2}. \quad (8)$$

Легко видеть, что функция (8) аналитическая. Поэтому она называется аналитической аппроксимацией спектральной плотности. Если данное выражение для некоторой системы точное, то истинная спектральная плотность является аналитической функцией квадрата частоты. Это характерно для одномерных структур. В решетках большей размерности полная фононная плотность всегда имеет так называемые особенности Ван Хофа. Для таких структур выражение (8) — приближение спектральной плотности, точно описывающее поведение ее $2n - 1$ первых моментов.

Выражения (3), (7) и (8) для функции Грина и спектральной плотности будут точными, если, начиная с какого-то номера n , элементы \mathbf{J} -матрицы становятся равными своим предельным значениям. Такое поведение матричных элементов означает периодическую повторяемость атомных смещений в

базисных векторах $\left\{ \mathbf{h}_n^{(i)} \right\}_{n=0}^\infty$ и периодическую

зависимость от номера n модулей данных векторов. Это возможно, если число возбужденных атомов в них не испытывает неограниченного роста при

возрастании n , а также является периодической функцией номера, что характерно для колебания в волновой зоне. Очевидно, что для линейных цепочек с взаимодействием ближайших соседей базисные векторы будут вести себя соответствующим образом, если:

а) цепочка полуограничена (в этом случае в качестве порождающего вектора следует выбрать смещение концевой атома [17]);

б) цепочка бесконечна в обе стороны, но имеет центр симметрии.

Поместим в центр симметрии начало координат и перенумеруем атомы по мере удаления от этого центра в обе стороны как $\{\pm n^{(i)}\}_{n=0}^{\infty}$.

Возможны два случая:

1) в центре симметрии находится атом, тогда

$$H = H^{(0)} \oplus H^{(\pm 1)}, \quad (9)$$

где базис $\{\mathbf{h}_n^{(0)}\}_{n=0}^{\infty}$ в подпространстве

$H^{(0)}$ образован смещением данного атома ($n = 0$) и синфазными (антисимметричными) смещениями

атомов с номерами $\pm n$, а базис $\{\mathbf{h}_n^{(\pm 1)}\}_{n=0}^{\infty}$ —

противофазными (симметричными) смещениями атомов с номерами $\pm(n+1)$ (атом $n = 0$ в этом подпространстве неподвижен);

2) в центре симметрии атома нет (т.е. ни один из атомов не имеет номер $n = 0$), тогда

$$H = H^{(+)} \oplus H^{(-)}, \quad (10)$$

где базисы $\{\mathbf{h}_n^{(+)}\}_{n=0}^{\infty}$ и $\{\mathbf{h}_n^{(-)}\}_{n=0}^{\infty}$ соответственно

образованы синфазными и противофазными смещениями атомов с номерами $\pm(n+1)$ (один частный случай такой симметрии был рассмотрен в [17]).

Легко убедиться, что для каждого из четырех рассмотренных базисов выполняется соотношение (5) и каждое из подпространств является циклическим. Поскольку смещение атома с номером $\pm n$ равно среднему арифметическому векторов, принадлежащих взаимно ортогональным подпространствам (в первом случае $\mathbf{h}_n^{(0)}$ и $\mathbf{h}_{n-1}^{(\pm 1)}$, во втором случае $\mathbf{h}_{n-1}^{(+)}$ и $\mathbf{h}_{n-1}^{(-)}$), функция Грина колебаний этого атома может быть выражена через среднее арифметическое соответствующих диагональных элементов гриновского оператора системы \mathbf{G} , записанного в предложенных базисах.

Используя (5), можно легко получить

$$\rho_n(n) \equiv \frac{1}{\pi} \text{Im } G_{nn}(\lambda) = P_n^2(\lambda) \rho_0(\lambda); \quad (11)$$

$$\mu_{d,n} \equiv \text{rés}_{\lambda = \lambda_d} G_{nn}(\lambda) = P_n^2(\lambda_d) \mu_{d,0}. \quad (12)$$

Из (11), (12) в частности, следует, что при любом n области существования мнимой части функций $G_{nn}(\lambda)$ (т.е. полосы непрерывного спектра) одинаковы, полюса функций $G_{nn}(\lambda)$, определяющие квадраты частот дискретных колебаний (локальных или щелевых) λ_d , также совпадают для всех n . Формула (12) позволяет найти степень локализации и характер затухания таких колебаний.

Бесконечная двухатомная линейная цепочка, содержащая изотопическую примесь замещения

Рассмотрим задачу об изменении изотопической примесью замещения фононного спектра линейной цепочки с двухатомной элементарной ячейкой и проанализируем условия возникновения в такой системе локализованных состояний и их характеристики.

Пусть имеется периодическая линейная цепочка с двухатомной элементарной ячейкой, атомы которой имеют массы m_1 и m_2 . Каждый из атомов может служить центром симметрии, поэтому разбиение пространства атомных смещений на циклические подпространства следует производить по формуле (9). Совместим начало координат с одним из атомов массой m_1 и выберем его смещение в качестве порождающего вектора $\mathbf{h}_0^{(0)}$. Такой выбор не нарушает общности рассмотрения. Порождающим вектором $\mathbf{h}_0^{(\pm 1)}$ будет симметричное смещение ближайших соседей данного атома (т.е. атомов массой m_2), тогда

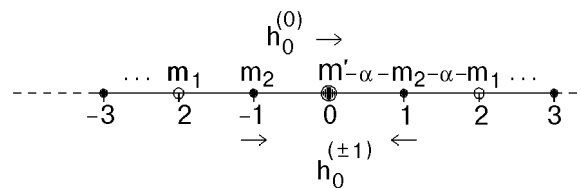


Рис. 1. Схематическое изображение модели бесконечной одномерной цепочки с локальным дефектом.

$$\mathbf{h}_n^{(0)} = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} n & 1 \\ -n & 1 \end{vmatrix} \rangle; \quad \mathbf{h}_{n-1}^{(\pm 0)} = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} n & 1 \\ -n & -1 \end{vmatrix} \rangle. \quad (13)$$

Оператор \mathbf{L} в данном случае может быть записан как

$$\mathbf{L}(|n - n'\rangle) = \begin{cases} \frac{1}{2} \sqrt{\lambda_1 \lambda_2}; & |n - n'| = 1; \\ \lambda_1; & n = n' = 2k; \\ \lambda_2; & n = n' = 2k + 1; \\ 0; & |n - n'| > 1, \end{cases} \quad (14)$$

где $\lambda_i = 2\alpha/m_i$ ($i = 1, 2$).

Теперь, если в начало координат вместо атома массой m_1 помещена изотопическая примесь массой m' (см. рис. 1), то колебания цепочки с примесью будут описываться оператором $\mathbf{L} + \mathbf{\Lambda}^{(i)}$, где оператор возмущения $\mathbf{\Lambda}^{(i)}$ в координатном представлении имеет вид

$$\mathbf{\Lambda}^{(i)} = \frac{-\varepsilon \lambda_1}{1 + \varepsilon} \delta_{n,0} + \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon}} - 1 \right) \left(\frac{\lambda_1 \lambda_2}{2} \right)^{1/2} (\delta_{n,-1} + \delta_{n,1}) \quad (15)$$

($\varepsilon \equiv (m' - m_1)/m_1$; $\delta_{i,k}$ — символ Кронекера).

Легко видеть, что в циклическом подпространстве $H^{(\pm 1)}$ оператор $\mathbf{\Lambda}^{(i)}$ индуцирует нулевой оператор, а оператор \mathbf{L} представляется в виде \mathbf{J} -матрицы с элементами

$$a_{2k}^{(\pm 1)} = \lambda_2; \quad a_{2k+1}^{(\pm 1)} = \lambda_1; \quad b_n^{(\pm 1)} = \frac{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2}}{2}, \quad (16)$$

($k, n = 0, 1, 2, 3, \dots$).

В циклическом подпространстве $H^{(0)}$ оператор $\mathbf{L} + \mathbf{\Lambda}^{(i)}$ имеет вид следующей якобиевой матрицы

$$\tilde{a}_0^{(0)} = \frac{\lambda_1}{1 + \varepsilon}; \quad a_{2k}^{(0)} = \lambda_1; \quad a_{2k+1}^{(0)} = \lambda_2; \\ \tilde{b}_0^{(0)} = \left(\frac{\lambda_1 \lambda_2}{2(1 + \varepsilon)} \right)^{1/2}; \quad b_n^{(0)} = \frac{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2}}{2}, \quad (17)$$

$k, n = 1, 2, 3, \dots$; тильдой отмечены матричные элементы, зависящие от возмущения, вносимого примесью:

$$\{\tilde{a}, \tilde{b}\}_0^{(0)} = \{\tilde{a}, \tilde{b}\}_0^{(0)}(\varepsilon),$$

а соответствующие матричные элементы невозмущенного оператора \mathbf{L}

$$\{\tilde{a}, \tilde{b}\}_0^{(0)} = \{\tilde{a}, \tilde{b}\}_0^{(0)}(0).$$

По данным матричным элементам с помощью (3) и (7) получим выражения для функций Грина в обоих циклических подпространствах (знак перед радикалом в (7) выбираем таким образом, чтобы спектральные плотности были положительными).

В подпространстве $H^{(0)}$

$$G_{00}^{(0)}(\lambda, \varepsilon) = \frac{1 + \varepsilon}{R^{(0)}(\lambda, \varepsilon)} \times \\ \times \left\{ \varepsilon(\lambda - \lambda_2) + \mathcal{L}(\Theta) \left[\left| \frac{(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)}{\lambda} \right| \right]^{1/2} \right\}, \quad (18)$$

где

$$R^{(0)}(\lambda, \varepsilon) \equiv -\lambda^2(1 - \varepsilon^2) + \lambda[\lambda_2(1 - \varepsilon^2) + 2\lambda_1] - \lambda_1(\lambda_1 + \lambda_2), \quad (19)$$

а через $\mathcal{L}(\Theta)$ обозначена комбинация функций Хевисайда, определяющая полосы непрерывного спектра:

$$\mathcal{L}(\Theta) \equiv i[\Theta(\lambda)\Theta(\lambda_1 - \lambda) + \Theta(\lambda - \lambda_2)\Theta(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)] + \\ + \Theta(\lambda - \lambda_1)\Theta(\lambda_2 - \lambda) - \Theta(\lambda - \lambda_1 - \lambda_2). \quad (20)$$

В подпространстве $H^{(\pm 1)}$

$$G_{00}^{(\pm 1)}(\lambda) = \frac{2}{\lambda_1 \lambda_2} \times \\ \times \left\{ (\lambda - \lambda_2) + \mathcal{L}(\Theta) \left[\left| \frac{\lambda(\lambda - \lambda_1)(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)}{\lambda - \lambda_2} \right| \right]^{1/2} \right\}. \quad (21)$$

Отсюда следует, что непрерывный спектр рассматриваемой цепочки (как в отсутствие примеси, так и при ее наличии) состоит из двух полос одинаковой ширины $\Omega_0^2 \equiv \{\lambda_1, \lambda_2\}_{\min}$, разделенных целью шириной $\{\lambda_1, \lambda_2\}_{\max} - \{\lambda_1, \lambda_2\}_{\min} \equiv \omega_0^2 - \Omega_0^2$. Верхняя граница сплошного спектра $\lambda_{\max} = \lambda_1 + \lambda_2$.

Определенные в полосах сплошного спектра спектральные плотности равны

$$\rho_0^{(0)}(\lambda, \varepsilon) = \frac{1}{\pi R^{(0)}(\lambda, \varepsilon)} \times \\ \times (1 + \varepsilon) \left[\left| \frac{(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)}{\lambda} \right| \right]^{1/2}; \quad (22)$$

$$\rho_0^{(\pm 1)}(\lambda) = \frac{2}{\pi \lambda_1 \lambda_2} \left[\left| \frac{\lambda(\lambda - \lambda_1)(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)}{\lambda - \lambda_2} \right| \right]^{1/2} \quad (23)$$

Пусть $\mathbf{n} = |n\rangle$ — вектор единичного смещения атома с номером m . Как отмечалось выше, он равен полусумме двух взаимно ортогональных векторов $\mathbf{h}_n^{(0)}$ и $\mathbf{h}_{n-1}^{(\pm 1)}$. Тогда из (17), (18) следует

$$\rho(n, \lambda, \varepsilon) = \frac{1}{2} \left\{ \rho_n^{(0)}(\lambda, \varepsilon) + \rho_{n-1}^{(\pm 1)}(\lambda) \right\} = \frac{1}{2} \left\{ [P_n^{(0)}(\lambda, \varepsilon)]^2 \rho_0^{(0)}(\lambda, \varepsilon) + [P_{n-1}^{(\pm 1)}(\lambda)]^2 \rho_0^{(\pm 1)}(\lambda) \right\}; \quad (24)$$

$$\mu_d(n, \varepsilon) = \frac{\mu_{d,n}^{(0)}}{2} = \frac{1}{2} [P_n^{(0)}(\lambda_d, \varepsilon)]^2 \mu_{d,0}^{(0)}$$

(так как рассматриваемый оператор возмущения не действует в циклическом подпространстве $H^{(\pm 1)}$, то в этом подпространстве колебаний с дискретными частотами не будет).

Для идеальной цепочки функция $R^{(0)}(\lambda, 0) = (\lambda - \lambda_1)(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)$ и спектральная плотность $\rho(2k, \lambda)$, порожденная смещением атома массой m_1 , равна

$$\rho(2k, \lambda) = \rho_0^{(0)} = \frac{1}{\pi} \left[\left| \frac{\lambda - \lambda_2}{\lambda(\lambda - \lambda_1)(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)} \right| \right]^{1/2} \quad (25)$$

(отметим, что $\text{Re } G_{00}^{(0)}(\lambda, 0) = 0$).

Данный результат для идеальной линейной цепочки можно также достаточно просто получить «традиционным» методом — разложением по плоским волнам. Если искать решения уравнений движения

$$\ddot{u}^{(i)}(na, t) = -\lambda_{(i)} [2u^{(i)}(na, t) -$$

$$- u^{(3-i)}((n+1)a, t) - u^{(3-i)}((n-1)a, t)]$$

($u^{(i)}(na, t)$ ($i = 1, 2$) — смещение из положения равновесия атома i -й подрешетки, находящегося в n -ом узле цепочки) в виде

$$u^{(i)}(n, t) = \frac{1}{\sqrt{m_i}} \sum_{k, \sigma} e^{(i)}(k, \sigma) \exp i [kna - t\sqrt{\lambda_{\sigma}(k)}]$$

(индекс σ нумерует колебательные ветви), то получим

$$(\lambda_i - \lambda) \left[\frac{1}{\sqrt{m_i}} e^{(i)}(k, \sigma) \right] -$$

$$- \lambda_{3-i} \cos ka \left[\frac{1}{\sqrt{m_{3-i}}} e^{(3-i)}(k, \sigma) \right] = 0. \quad (26)$$

Сразу заметим, что уравнения (26) инвариантны относительно изменения знака k , поэтому собственные значения и собственные функции будут четными функциями данной переменной, т.е. спектр будет простым и $e^{(i)}(k, \sigma) = e^{(i)}(\lambda_{\sigma})$.

Квадраты собственных частот удовлетворяют следующим дисперсионным соотношениям:

$$\lambda_{\sigma}(k) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \pm \left[\left(\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} \right)^2 + \lambda_1 \lambda_2 \cos^2 ka \right]^{1/2} \quad (27)$$

(знак «-» перед радикалом соответствует акустической, а «+» — оптической ветви). Соответствующие этим собственным значениям собственные функции $e^{(i)}(\lambda_{\sigma})$, нормированные условием $\sum_i [e^{(i)}(\lambda_{\sigma})]^2 = 1$, могут быть записаны как

$$e^{(i)}(\lambda_{\sigma}) = \left[\left| \frac{\lambda_{\sigma} - \lambda_{3-i}}{2\lambda_{\sigma} - (\lambda_1 + \lambda_2)} \right| \right]^{1/2} \quad (28)$$

Заметим, что квадратам собственных частот λ_1 и λ_2 соответствует значение $ka = \pi/2$, т.е. колебания атомов одной элементарной ячейки сдвинуты по фазе на четверть периода. Атом массой m_1 покоится при $\lambda = \lambda_2$, а атом массой m_2 имеет при этом максимальную амплитуду, и наоборот, при $\lambda = \lambda_1$ максимальную амплитуду имеет атом массой m_1 , а покоится атом массой m_2 .

Нормированная на единицу функция распределения квадратов частот для идеальной двухатомной цепочки имеет вид

$$g(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \frac{|\lambda_1 + \lambda_2 - 2\lambda|}{\sqrt{\lambda(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)(\lambda_1 + \lambda_2 - 2\lambda)}} \quad (29)$$

Спектральная плотность, порожденная смещением атома подрешетки i в кристаллографическом направлении l , может быть выражена следующим образом [3, 13, 20]:

$$\rho_l^{(i)} = \frac{V_0}{(2\pi)^q} \sum_{\sigma} \oint_{\lambda_{\sigma}(\mathbf{k})=\lambda} \frac{dS}{\nabla_{\mathbf{k}} \lambda_{\sigma}(\mathbf{k})} \left| e^{(i)}(\mathbf{k}, \sigma) \right|^2$$

(q — размерность пространства; V_0 — q -мерный объем элементарной ячейки). Для рассматриваемой одномерной системы получим

$$\rho^{(i)}(\lambda) = 2g(\lambda) [e^{(i)}(\lambda_{\sigma})]^2 \quad (30)$$

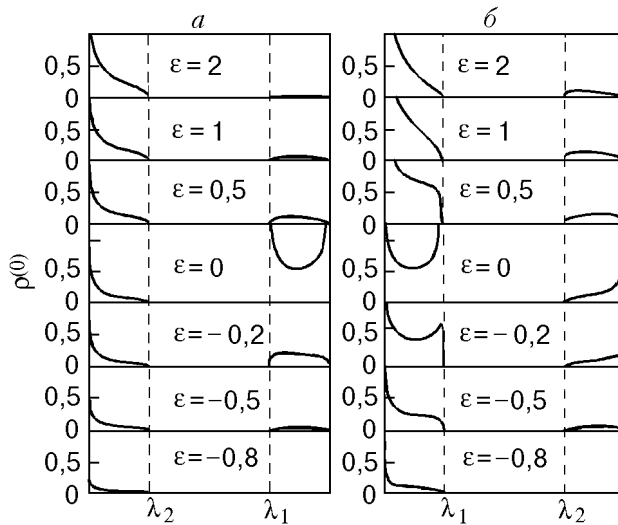


Рис. 2. Эволюция с изменением дефекта массы спектральных плотностей примесного атома. Примесь в легкой подрешетке ($\lambda_1 > \lambda_2$) (а). Примесь в тяжелой подрешетке ($\lambda_2 > \lambda_1$) (б).

Для спектральной плотности, порожденной смещением атома массой m_1 , (30) совпадает с (25). Очевидно, что спектральная плотность, порожденная смещением атома массой m_2 (функция $\rho(2k+1, \lambda)$), получится, если в (25) или (30) величины λ_1 и λ_2 поменять местами, такой же результат получается из (23)–(25). Функция распределения квадратов частот рассматриваемой цепочки (29) равна [13] полусумме $\rho(2k, \lambda)$ и $\rho(2k+1, \lambda)$.

Каждая из данных спектральных плотностей имеет корневые особенности на краях непрерывного спектра при $\lambda = 0$ и $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$ (см. рис. 2 при $\varepsilon = 0$). Спектральная плотность, порожденная смещением тяжелого атома, имеет корневую особенность на верхней границе акустической зоны (Ω_0^2) и стремится к нулю $\sim \sqrt{\lambda}$ на нижней границе оптической зоны (ω_0^2). Спектральная плотность, порожденная смещением легкого атома, наоборот, стремится к нулю $\sim \sqrt{\lambda}$ при $\lambda \rightarrow \Omega_0^2$ и имеет корневую особенность при $\lambda = \omega_0^2$. Поэтому образование легкой изотопической примесью локальных колебаний с частотами, большими $\sqrt{\lambda_1 + \lambda_2}$, должно происходить без порога, т.е. при $\varepsilon < 0$,

независимо от того в тяжелой или легкой подрешетке находится примесь (максимальной частоте колебаний соответствуют одновременные противофазные смещения атомов обеих подрешеток).

Также без порога должно происходить отщепление щелевого колебания от верха акустической зоны при наличии легкой примеси в тяжелой подрешетке и от дна оптической зоны при наличии тяжелой примеси в легкой подрешетке.

Как уже отмечалось, амплитуды колебаний атомов тяжелой подрешетки обращаются в нуль при частоте ω_0 , а амплитуды колебаний атомов легкой подрешетки — при частоте Ω_0 . Поэтому при данных частотах изотопическая примесь не будет влиять на колебания атомов подрешетки. Следовательно, отщепление щелевых колебаний от верха акустической зоны под влиянием изотопической примеси в легкой подрешетке и от дна оптической зоны, если изотопическая примесь находится в тяжелой подрешетке, должно быть, по крайней мере, существенно затруднено.

Вычисление полюсов функции Грина (18) (т.е. корней квадратного трехчлена (19)) приводит к следующему результату:

$$\lambda_{l,g} = \frac{1}{2} \left\{ \lambda_2 + \frac{2\lambda_1}{1 - \varepsilon^2} \pm \left[\lambda_2^2 + \left(\frac{2\lambda_1 \varepsilon}{1 - \varepsilon^2} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}. \quad (31)$$

Полюс, соответствующий знаку «+» перед радикалом, при $\varepsilon = 0$ равен $\lambda_1 + \lambda_2$ и убывает с ростом ε . Следовательно, он соответствует локальному колебанию с квадратом частоты $\lambda_l \gg \lambda_1 + \lambda_2$. Полюс, соответствующий знаку «-», также убывает с ростом ε , но при $\varepsilon = 0$ равен λ_1 . Он соответствует щелевому колебанию с квадратом частоты $\lambda_g \in [\Omega_0^2, \omega_0^2]$.

Вычет функции (18) в точках $\lambda_{l,g}$, т.е. интенсивность локального или щелевого колебания, можно представить следующим образом:

$$\mu_{l,0} = \frac{|\varepsilon - \varepsilon|}{2(1 - \varepsilon)} \left[1 + \frac{2\lambda_1 - \lambda_2(1 - \varepsilon^2)}{\sqrt{4\lambda_1^2 \varepsilon^2 + \lambda_2^2(1 - \varepsilon^2)^2}} \right]; \quad (32)$$

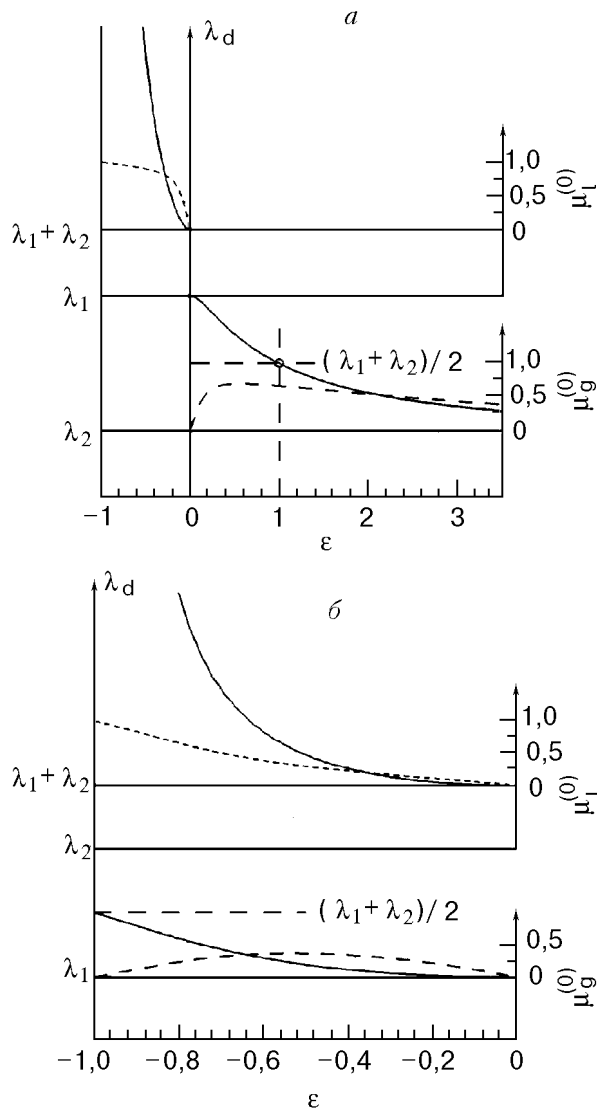


Рис. 3. Зависимость квадратов частот и интенсивностей локальных и щелевых колебаний, обусловленных изотопической примесью в бесконечной цепочке: ($\lambda_1 > \lambda_2$) (а); ($\lambda_2 > \lambda_1$) (б).

$$\mu_{g,0} = \begin{cases} \frac{|\epsilon| + \epsilon}{2(1 - \epsilon)} \left[\frac{2\lambda_1 - \lambda_2(1 - \epsilon^2)}{\sqrt{4\lambda_1^2\epsilon^2 + \lambda_2^2(1 - \epsilon^2)^2}} - 1 \right]; & \lambda_1 > \lambda_2; \\ \frac{|\epsilon| - \epsilon}{2(1 - \epsilon)} \left[1 - \frac{2\lambda_1 - \lambda_2(1 - \epsilon^2)}{\sqrt{4\lambda_1^2\epsilon^2 + \lambda_2^2(1 - \epsilon^2)^2}} \right]; & \lambda_1 < \lambda_2. \end{cases} \quad (33)$$

Эволюция с изменением параметра ϵ спектральных плотностей $\rho_0^{(0)}(\lambda, \epsilon)$ приведена на рис. 2, а зависимости от ϵ квадратов дискретных частот и интенсивностей соответствующих колебаний — на рис. 3.

Если $\lambda_1 > \lambda_2$ (примесь в легкой подрешетке), то, как уже отмечалось выше, и локальные и щелевые колебания образуются без порога,

отщепляясь соответственно от верха оптической зоны при $\epsilon < 0$ и от ее дна при $\epsilon > 0$. Квадрат частоты локальных колебаний при $\epsilon \rightarrow -1$ (т.е. $m'/m_1 \rightarrow 0$) стремится к бесконечности $\sim (1 - \epsilon^2)^{-1}$, а интенсивность — к единице, т.е. колебания становятся все более локализованными. Квадрат частоты щелевого колебания при $\epsilon \rightarrow \infty$ стремится к верхней

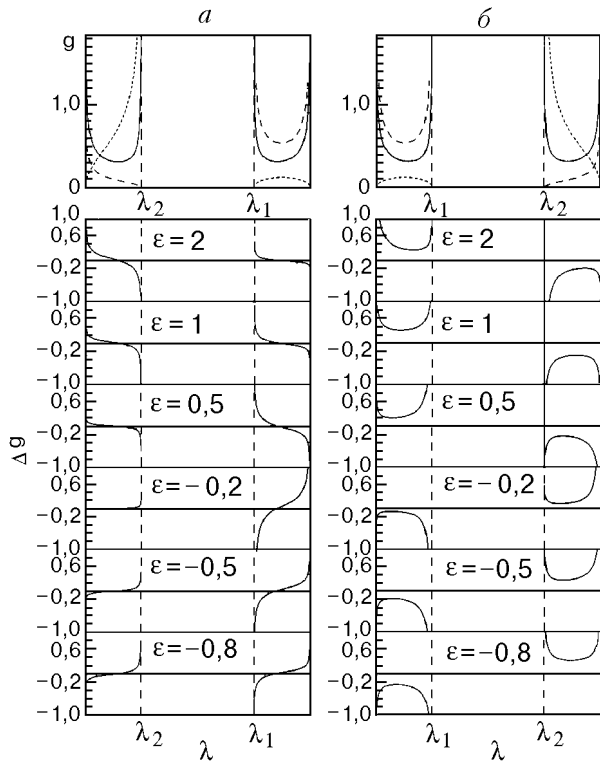


Рис. 4. Формирование полной фоновой плотности $g(\lambda)$ двухатомной линейной цепочки спектральными плотностями $\rho^{(0)}(\lambda)$ (длинные штрихи) и $\rho^{(\pm 1)}(\lambda)$ (короткие штрихи), а также функция $\Delta g(\lambda)$ для разных значений дефекта массы: $(\lambda_1 > \lambda_2)$ (а); $(\lambda_2 > \lambda_1)$ (б).

границе акустической зоны ($\Omega_0^2 = \lambda_2$) также $\sim (1 - \epsilon^2)^{-1}$. Интенсивность этого колебания вначале резко возрастает, а затем медленно убывает, по мере приближения к Ω_0^2 данное колебание все более и более делокализуется. Отметим, что при $\epsilon = 1$ (т.е. примесь вдвое тяжелее атома легкой подрешетки) независимо от соотношения между m_1 и m_2 квадрат частоты щелевого колебания находится точно в середине щели

$$\lambda_g(1) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \equiv \frac{\lambda_{\max}}{2}. \quad (34)$$

Интенсивность данного колебания

$$\mu_{g,0}(1) = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1} \equiv \frac{\omega_0^2 - \Omega_0^2}{\omega_0^2}. \quad (35)$$

Легкая примесь в тяжелой подрешетке ($\lambda_1 < \lambda_2$) приводит к беспороговому образованию и локального и щелевого колебаний одновременно. При этом с убыванием ϵ локальные колебания становятся все более локализованными — $\mu_{l,0} \rightarrow \rightarrow 1$, а $\lambda_l \rightarrow \infty$. Щелевое же колебание, отщипнувшееся в этом случае от верха акустической зоны, локализовано слабо. Зависимость $\mu_{g,0}(\epsilon)$ почти симметрична на интервале $\epsilon \in [-1, 0]$ и при $\epsilon = -1$ обращается в нуль, квадрат частоты данного колебания достигает середины щели. В верхней половине щели возникновение щелевых колебаний в данном случае невозможно.

Тяжелая примесь в тяжелой подрешетке не приводит к образованию дискретных колебаний. В спектральной плотности $\rho^{(0)}(\lambda, \epsilon)$ при этом с ростом ϵ происходит «перекачка» фононов из оптической зоны в акустическую.

Полное изменение изотопической примесью замещения фоновой спектра линейной цепочки с двухатомной элементарной ячейкой может быть описано с помощью введенной Лифшицем функции сдвига $\xi(\lambda, \epsilon)$ как:

$$\Delta g(\lambda) = \frac{\partial \xi(\lambda, \epsilon)}{\partial \lambda}.$$

Функция сдвига вычисляется с помощью метода якобиевых матриц [13] и для рассматриваемой задачи имеет вид

$$\xi(\lambda, \epsilon) = \pm \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \left\{ \epsilon \left[\frac{\lambda(\lambda - \lambda_2)}{(\lambda - \lambda_1)(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)} \right]^{1/2} \right\}, \quad (36)$$

где знак «+» соответствует акустической зоне, в которой дисперсия колебаний положительна, а «-» — оптической (дисперсия отрицательна). Эволюция с изменением параметра ϵ зависимостей

$$\Delta g(\lambda) = \pm \epsilon g(\lambda) \frac{\lambda_1 [2\lambda_2 - 2\lambda(\lambda_1 + \lambda_2) + \lambda(\lambda_1 + \lambda_2)]}{|2\lambda - \lambda_1 - \lambda_2| [|\lambda - \lambda_1| (\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda) + \epsilon^2 \lambda (\lambda - \lambda_2)]}$$

приведена на рис. 4. В линейном по концентрации примеси p приближении полная фоновая плотность выразится как $g(\lambda, \epsilon) = g(\lambda) + p \Delta g(\lambda)$.

Легко видеть, что $\xi(\lambda)|_{\omega_0^2}^{\Omega_0^2} = \text{sgn}(\varepsilon) \Theta(\lambda_2 - \lambda_1)$, а $\xi(\lambda)|_{\omega_0^2}^{\lambda_1 + \lambda_2} = -1$, что подтверждает выводы, следующие из приведенного выше анализа перераспределения колебаний между зонами.

С ростом номера n (т.е. расстояния от примесного атома) интенсивность колебания с дискретной частотой убывает по закону (12). Легко доказать с помощью метода математической индукции, что амплитуды дискретных колебаний по мере удаления элементарной ячейки от примесного атома образуют убывающую геометрическую прогрессию. Знаменатель этой прогрессии q равен

$$q_{l,g} = \frac{P_4(\lambda_{l,g})}{P_2(\lambda_{l,g})} = \frac{P_3(\lambda_{l,g})}{P_1(\lambda_{l,g})} = \frac{2\lambda_1\varepsilon \pm \sqrt{4\lambda_1^2\varepsilon^2 + \lambda_2^2(1-\varepsilon^2)^2}}{\lambda_2(1-\varepsilon^2)}, \quad (37)$$

где, как и в (31), знак «+» перед радикалом соответствует локальному, а «-» — щелевому колебанию. Интенсивности дискретных колебаний образуют геометрическую прогрессию со знаменателем q^2 и суммой равной единице.

Отметим, что в системе любой размерности, если элементы якобиевой матрицы оператора $\mathbf{L} + \mathbf{\Lambda}$ с ростом номера n стремятся к каким-нибудь предельным значениям, то при достаточно больших n характер затухания амплитуд дискретных колебаний будет определяться (37), т.е. будет экспоненциальным. В частности, только экспоненциальный характер может иметь на больших расстояниях от дефекта затухание локальных колебаний в решетке с одноатомной элементарной ячейкой.

Амплитуда колебаний на дискретной частоте примесного атома будет выше, чем амплитуда колебаний соседнего атома, если

$$|P_1(\lambda_d, \varepsilon)| < \left(\frac{2\lambda_1}{\lambda_2(1+\varepsilon)} \right)^{1/2}. \quad (38)$$

Это неравенство тождественно выполняется для локального колебания, обусловленного легкой примесью в легкой подрешетке. Для локального колебания, обусловленного легкой примесью в тяжелой подрешетке, данное неравенство выполняется при

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_2} > \frac{(1+\varepsilon)(1-2\varepsilon)}{1-3\varepsilon} \quad (39)$$

(в этом случае $\varepsilon < 0$ и $\lambda_1 < \lambda_2$). Невыполнение (39), как следует из (37), означает, что амплитуда колебаний на дискретной частоте легкого атома в каждой элементарной ячейке будет выше, чем у тяжелого, хотя легкий атом находится дальше от дефекта. То есть экспоненциальное затухание амплитуды колебаний будет «промодулировано» некоторыми осцилляциями. Для обусловленного легкой примесью в тяжелой подрешетке щелевого колебания неравенство (38) не выполняется никогда. Данное колебание локализовано в основном на ближайших соседях примеси (легких атомах).

Для щелевого колебания, обусловленного тяжелой примесью в легкой подрешетке, неравенство (38) будет выполняться также при условии (39), только в этом случае $\varepsilon > 0$ и $\lambda_1 > \lambda_2$. Неравенство (39) не выполняется, когда λ_g находится вблизи верхней границы акустической зоны, на которой амплитуды колебаний атомов легкой подрешетки обращаются в нуль. С частотами близкими к Ω_0 колеблются главным образом тяжелые атомы, поэтому амплитуды колебаний со щелевой частотой у более удаленных от дефекта тяжелых атомов будут выше, чем у менее удаленных легких.

Полуограниченная двухатомная линейная цепочка с изотопической примесью замещения на свободном конце

Рассмотрим полубесконечную цепочку ($n \geq 0$) с двухатомной элементарной ячейкой. Атом массой m_1 , находящийся на свободном конце цепочки ($n = 0$), замещен изотопической примесью массой m' . Тогда оператор возмущения $\mathbf{\Lambda}^{(si)}$ в координатном представлении имеет вид

$$\mathbf{\Lambda}^{(si)} = -\mathbf{L}\Theta(-n) - \frac{1+\varepsilon\lambda_1}{2(1+\varepsilon)}\delta_{n,0} + \left(\frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon}} - 1 \right) \frac{\sqrt{\lambda_1\lambda_2}}{2}\delta_{n,1}, \quad (40)$$

где в качестве невозмущенного оператора \mathbf{L} выбран динамический оператор идеальной бесконечной двухатомной цепочки (14), а обозначения $\lambda_i (i = 1, 2)$ и ε соответствуют (15).

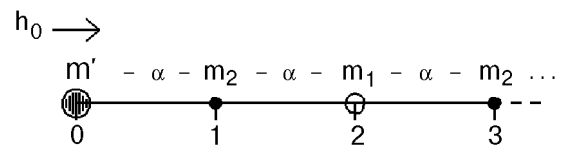


Рис. 5. Схематическое изображение модели полубесконечной одномерной цепочки.

Выбрав в качестве порождающего вектора смещение $\mathbf{h}_0 = |0\rangle$ (см. рис. 5), с помощью процедуры $\{\mathbf{L}^n \mathbf{h}_0\}_{n=0}^{\infty}$ получим семейство базисных векторов: $\{\mathbf{h}_n\}_{n=0}^{\infty} = \{|n(-1)^n\rangle\}_{n=0}^{\infty}$, натянутая на них линейная оболочка совпадает с полным пространством смещений атомов данной системы H . \mathbf{J} -матрица оператора $\mathbf{L} + \mathbf{\Lambda}^{(si)}$ в этом базисе имеет вид

$$\tilde{a}_0 = \frac{1}{2} \frac{\lambda_1}{1 + \varepsilon}; a_{2k} = \lambda_1; a_{2k-1} = \lambda_2; \quad (41)$$

$$\tilde{b}_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_1 \lambda_2}{1 + \varepsilon} \right)^{1/2}; b_n = \frac{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2}}{2}; k, n = 1, 2, 3, \dots$$

Функция Грина данной системы может быть записана как

$$G_{00}^{(si)}(\lambda, \varepsilon) = \frac{2(1 + \varepsilon)}{R^{(si)}(\lambda, \varepsilon)} \times \left\{ (1 + 2\varepsilon)(\lambda - \lambda_2) + \mathcal{L}(\Theta) \left(\left| \frac{(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)}{\lambda} \right| \right)^{1/2} \right\}, \quad (42)$$

где $\mathcal{L}(\Theta)$ определяется в (20);

$$R^{(si)}(\lambda, \varepsilon) = 4\varepsilon(1 + \varepsilon)\lambda^2 + 2\lambda[\lambda_1 - 2\lambda_2\varepsilon(1 + \varepsilon)] - \lambda_1(\lambda_1 + \lambda_2). \quad (43)$$

Эта функция имеет в точках

$$\lambda_{l,g}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left\{ \lambda_2 + \frac{\lambda_1}{2\varepsilon(1 + \varepsilon)} \mp \operatorname{sgn}(\varepsilon) \left[\lambda_2^2 + \lambda_1^2 \left[\frac{1 + 2\varepsilon}{2\varepsilon(1 + \varepsilon)} \right]^2 \right]^{1/2} \right\} \quad (44)$$

полюсы с вычетами

$$\mu_{l,g} = \frac{(1 + 2\varepsilon) \mp [1 + 2\varepsilon][\Theta(\lambda_1 - \lambda_2) \pm \Theta(\lambda_2 - \lambda_1)]}{4\varepsilon} \times \left\{ 1 \pm \frac{\lambda_1 + 2\lambda_2\varepsilon(1 + \varepsilon)}{\sqrt{\lambda_1^2(1 + 2\varepsilon)^2 + 4\lambda_2^2\varepsilon^2(1 + \varepsilon)^2}} \right\} \quad (45)$$

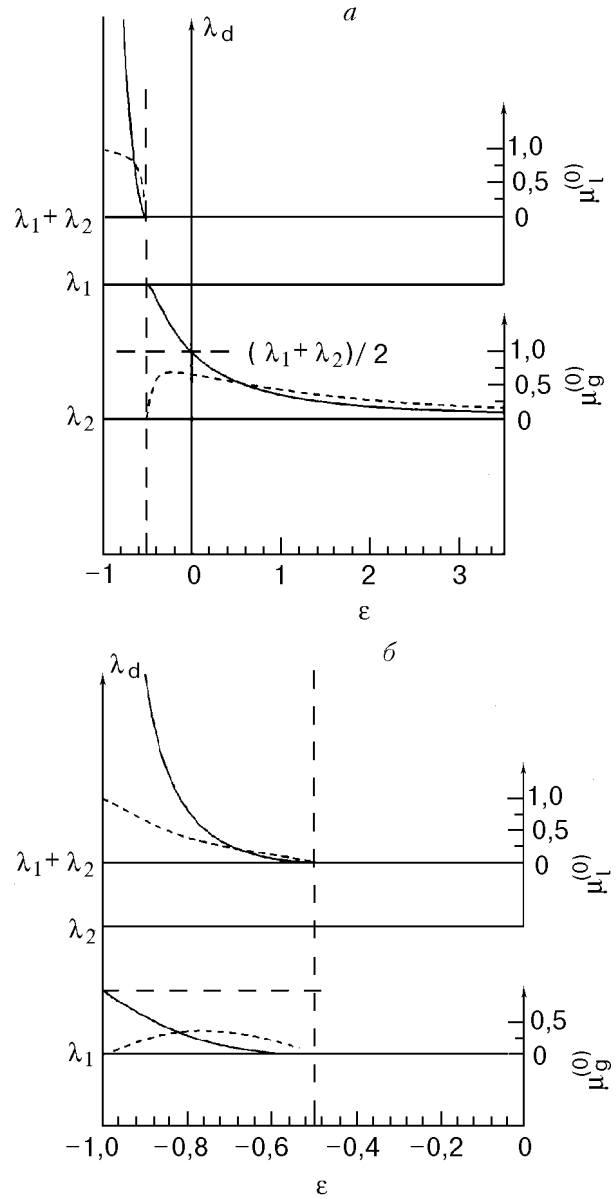


Рис. 6. Зависимость квадратов частот и интенсивностей дискретных колебаний в полубесконечной цепочке: ($\lambda_1 > \lambda_2$) (а); ($\lambda_2 > \lambda_1$) (б).

(во всех комбинациях «±» или «∓» верхний знак соответствует локальному, а нижний — щелевому колебанию). При $\varepsilon = 0$ (43) примет вид

$$R^{(si)}(\lambda, 0) = \lambda_1 [2\lambda - (\lambda_1 + \lambda_2)],$$

его единственный, соответствующий щелевому колебанию, корень равен

$$\lambda_g(0) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2}. \quad (46)$$

Интенсивность данного колебания на концевом атоме

$$\mu_g^{(0)}(0) = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1} \Theta(\lambda_1 - \lambda_2), \quad (47)$$

и щелевое колебание возникает только в том случае, когда $\lambda_1 > \lambda_2$, т.е. на конце цепочки находится атом из легкой подрешетки. Квадрат частоты этого колебания лежит точно в середине щели. Отметим, что это полностью соответствует характеристикам щелевого колебания, обусловленного наличием в легкой подрешетке неограниченной цепочки тяжелого изотопа с $m'/m_1 = 2$ (34), (35).

Легко убедиться, что $\lim_{\varepsilon \rightarrow -0} \lambda_f(\varepsilon) = -\infty$, а для

щелевых колебаний при $\varepsilon = 0$ выражения (44) и (45) переходят в (46) и (47) соответственно.

Спектральная плотность колебаний концевого атома, определенная в полосах сплошного спектра, имеет вид

$$\rho^{(si)}(\lambda, \varepsilon) = \frac{2(1+\varepsilon)}{\pi R^{(si)}(\lambda, \varepsilon)} \left(\left| \frac{(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)}{\lambda} \right| \right)^{1/2}, \quad (48)$$

что также совпадает с (25) при $\varepsilon = 1$. При всех значениях ε сохраняется характерная для фононного спектра одномерных структур корневая особенность при $\lambda = 0$. При $\varepsilon = -1/2$ функция

$$R^{(si)}(\lambda, \varepsilon) = R^{(s)}(\lambda, -\frac{1}{2}) = (\lambda - \lambda_1)(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)$$

и (48) совпадает с (25) — спектральной плотностью соответствующего атома в идеальной бесконечной цепочке, т.е. дефицит массы компенсирует влияние свободной поверхности. Иными словами, влияние на фононный спектр и колебательные характеристики линейной цепочки ее свободного конца полностью аналогично влиянию изотопической примеси с массой вдвое большей массы концевого атома цепочки.

Наконец, сопоставив (18) с (42), получим

$$G_{00}^{(si)}(\lambda, \varepsilon) = G_{00}^{(0)}(\lambda, 1 + 2\varepsilon), \quad (49)$$

откуда следуют аналогичные соотношения для спектральных плотностей и характеристик дискретных колебаний.

Характеристики дискретных колебаний представлены на рис. 6 как функции параметра ε . Независимо от соотношения между λ_1 и λ_2 $\mu_f(-1/2) = \mu_g(-1/2) = 0$, т.е. $\varepsilon = -1/2$ является пороговым значением для всех дискретных колебаний. При $\varepsilon < -1/2$ от верхней границы оптической зоны $\lambda_1 + \lambda_2$ отщепляется локальное

колебание с квадратом частоты $\lambda_f(\varepsilon)$. С дальнейшим уменьшением ε ($\varepsilon \in [-1/2, 1]$) частота и интенсивность этого колебания возрастают ($\lambda_f(\varepsilon) \rightarrow \infty$; $\mu_f(\varepsilon) \rightarrow 1$). Значение $\lambda_g(1/2) = \lambda_1$, т.е. при $\lambda_1 < \lambda_2$ от верхней границы акустической зоны $\Omega_0^2 = \lambda_1$ отщепляется щелевое колебание, квадрат частоты которого с дальнейшим уменьшением массы концевого атома стремится к нижней границе оптической зоны $\omega_0^2 = \lambda_2$, а интенсивность изменяется немонотонным образом, уменьшаясь до нуля (при $\varepsilon = -1$). Данное щелевое колебание «сосуществует» с локальным, как в случае легкой примеси в тяжелой подрешетке бесконечной цепочки.

При $\lambda_1 > \lambda_2$, как отмечалось выше (46), (47), щелевое колебание существует и при $\varepsilon = 0$. Из (44), (45) легко убедиться, что для $\varepsilon > 0$ с ростом массы примеси частота этого колебания убывает до верхней границы акустической зоны ($\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \lambda_g(\varepsilon) = \Omega_0^2 = \lambda_2$), а интенсивность стремится к нулю.

При $\varepsilon \in [0, -1/2]$ частота щелевого колебания растет до нижней границы оптической зоны ($\lambda_g(-1/2) = \omega_0^2 = \lambda_1$), а интенсивность уменьшается до нуля. Дальнейшее уменьшение массы примеси приводит к исчезновению щелевого и образованию локального колебания.

Заключение

Для бесконечных линейных цепочек с периодическим расположением атомов (со сколь угодно большим, но конечным периодом), содержащих неупорядоченные дефектные кластеры, с помощью метода якобиевых матриц могут быть получены точные аналитические выражения для функции Грина при наличии в системе центра симметрии. Точное решение получается с помощью разбиения всего пространства смещений на полную систему двух циклических подпространств, образованных симметричными и антисимметричными относительно данного центра смещениями. Для полубесконечной цепочки такое точное решение может быть получено всегда. Соответствующее единственное циклическое подпространство (являющееся полной системой) порождается смещением концевого атома цепочки.

Мнимые части диагональных элементов функции Грина и вычеты в полюсах данной функции, которые характеризуют амплитуды колебаний атомов соответственно на частотах,

лежащих в области сплошного спектра, и на дискретных частотах, зависят от номера этого диагонального элемента, как $P_n^2(\lambda)$. Амплитуды обусловленных дефектом дискретных колебаний вне дефектного кластера образуют убывающую геометрическую прогрессию, т.е. затухают экспоненциально.

Для линейной цепочки с двухатомной элементарной ячейкой, в которой каждый из атомов является центром симметрии, сплошной спектр квадратов собственных частот состоит из двух полос одинаковой ширины. Спектральные плотности обоих атомов (а следовательно, и их амплитуды колебаний) имеют корневые особенности в нуле и на верхней границе всего спектра. Амплитуда колебаний тяжелого атома имеет еще одну корневую особенность на верхней границе акустической зоны (Ω_0^2) и обращается в нуль на нижней границе оптической (ω_0^2). Амплитуда колебаний легкого атома, наоборот, обращается в нуль при $\lambda = \Omega_0^2$ и имеет корневую особенность при $\lambda = \omega_0^2$.

Наличие в такой цепочке легкой изотопической примеси замещения приводит к беспороговому образованию локальных колебаний, отщепляющихся от верхней границы оптической зоны, независимо от того в какую из подрешеток помещена примесь. Кроме того, если легкая примесь помещена в тяжелую подрешетку, то от верхней границы акустической зоны отщепляется щелевое колебание, локализованное в основном на ближайших соседях примеси.

Тяжелая примесь в легкой подрешетке приводит к образованию щелевого колебания, отщепляющегося от нижней границы оптической зоны. Тяжелая примесь в тяжелой подрешетке не образует колебаний с дискретными частотами, а обуславливает «перекачку» фононов из оптической зоны в акустическую.

Влияние свободного конца цепочки на колебательные характеристики полностью аналогично влиянию тяжелого изотопа с $m'/m = 2$. Характеристики колебаний полубесконечной цепочки с изотопической примесью на конце могут быть получены из соответствующих характеристик бесконечной цепочки заменой $\epsilon \rightarrow 1 + 2\epsilon$.

Авторы с удовольствием пользуются возможностью поблагодарить А. М. Косевича, автора классических результатов и классических книг по динамике решетки, за постоянное внимание к нашим работам. Естественно, и настоящая работа детально обсуждалась с Арнольдом Марковичем, 70-летие которого

отмечается в июле этого года. В результате этих обсуждений им был высказан ряд ценных замечаний и пожеланий, которые были нами с благодарностью учтены.

1. И. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **17**, 1076 (1947).
2. А. А. Марадулин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс, *Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении*, Мир, Москва (1965).
3. А. М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Вища школа, Харьков (1988).
4. А. М. Kosevich, E. S. Syrkin, and S. B. Feodosyev, *Phys. Low-Dim. Str.*, **3**, 47 (1994).
5. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, О. Я. Шамфарова, *ФНТ* **17**, 745 (1991).
6. S. B. Feodosyev, I. A. Gospodarev, A. M. Kosevich, and E. S. Syrkin, *Phys. Low-Dim. Str.*, **10/11**, 209 (1995).
7. В. И. Кутько, Ю. Н. Харченко, Н. М. Нестеренко, А. А. Гуркас, *ФНТ* **22**, 785 (1996).
8. В. И. Кутько, *ФНТ* **24**, 393 (1998).
9. N. M. Plakida, V. L. Aksenov, and S. L. Drechsler, *Europhys. Lett.*, **4**, 1309 (1987).
10. Proc. *11th NATO ASI Conf. «Quantum Dot Materials for Nonlinear Optic Applications»*, Sept. 15-26, Bressanone, Italy (1996).
11. Ф. Г. Басс, В. Л. Фалько, С. И. Ханкина, *УФЖ* **38**, 901 (1993).
12. Е. Я. Глушко, В. А. Хрисанов, *ФНТ* **23**, 1215 (1997).
13. В. И. Пересада, в сб.: *Физика конденсированного состояния*, ФТИАН УССР, Харьков (1968), с.172.
14. В. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, В. С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975).
15. R. Haydock, in: *Solid State Physics*, **35**, H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (eds.). Academic Press, New York (1980) p.129.
16. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **20**, 586 (1994).
17. М. А. Мамалуй, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФТТ* **38**, 3683 (1996).
18. Н. И. Ахиезер, *Классическая проблема моментов*, Гос. изд-во физ.-мат. лит., Москва (1961).
19. Ю. Я. Томчук, Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук, ХГУ, Харьков (1964).
20. А. М. Kosevich, E. S. Syrkin, and S. B. Feodosyev, *Phys. Lett.* **A167**, 94 (1992).

Localization of vibrations on defects in one-dimensional structures with complex unit cell

M. A. Mamalui, E. S. Syrkin, and S. B. Feodosyev

Exact analytical expressions are derived for the Green functions of a linear chain with a two-atom unit cell containing an isotopic substitutional impurity. An infinite chain and a half-infinite one with the impurity at the free end are considered. The total change of the phonon spectrum and the spectral densities of vibrations of the impurity and its nearest neighbours are investigated. The characteristics and the conditions for the formation of local and gap vibrations are analyzed. A general method of obtaining exact solutions by the Jacobi matrices

technique is formulated for a wide class of one-dimensional systems.