

## ОСОБЕННОСТИ ФОНОННЫХ СПЕКТРОВ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

И.А.Господарев, В.И.Гришаев, А.В.Котляр, О.В.Круглов, Е.С.Сыркин, С.Б.Феодосьев

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

Проблема адекватного описания поведения фононных спектров и колебательных характеристик кристаллов, содержащих конечную концентрацию примеси, остается открытой, несмотря на существование мощного математического аппарата для исследования неупорядоченных систем [1] и наличие довольно большого числа работ, посвященного как аналитическому [2-4], так и численному решению (см., например, [5]) подобных задач. В данной работе нами предложен новый подход к задаче о квазичастичных возмущениях в неупорядоченных твердых растворах, основанный на классификации колебаний и технике расчета метода *J-матриц* [6,7], который позволил получить некоторые принципиально новые результаты. В основе этого метода лежит разбиение всего пространства  $H$  смещений атомов произвольной системы на подпространства  $H^{(\bar{h}_0)}$ , каждое из которых является линейной оболочкой, натянутой на векторы последовательности

$$\{\mathcal{E}^n \bar{h}_0\}_{n=0}^{\infty} = \bar{h}_0; \mathcal{E}\bar{h}_0; \mathcal{E}^2 \bar{h}_0; \dots; \mathcal{E}^n \bar{h}_0; \dots, \quad (1)$$

которую можно рассматривать как форму записи принципа Гюйгенса. В (1) оператор  $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')}$ , где  $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  - матрица силовых постоянных, описывающая взаимодействие между атомами с радиус-векторами  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}'$ , а  $m(\mathbf{r})$  и  $m(\mathbf{r}')$ - массы этих атомов. Каждое из подпространств  $H^{(\bar{h}_0)}$  инвариантно относительно оператора  $\mathcal{E}$ .

В базисе  $\{\bar{h}_n\}_{n=0}^{\infty}$ , получаемом последовательной ортонормализацией (1), оператор  $\mathcal{E}^{(\bar{h}_0)}$ , индуцируемый оператором  $\mathcal{E}$  в подпространстве  $H^{(\bar{h}_0)}$ , записывается в форме трехдиагональной *J-матрицы*  $\mathcal{E} = L_{ik} = a_n \delta_{ik} + b_n (\delta_{i,k+1} + \delta_{i+1,k})$ , обладающей простым спектром (индекс, нумерующий подпространства, здесь и далее опущен). Локальная функция Грина (ЛФГ)  $G(\omega^2)$  системы - матричный элемент оператора  $\mathcal{G}(\omega^2) = (\omega^2 \mathcal{E} - \mathcal{E})^{-1}$ , имеющий вид  $G_{00}(\omega^2) = (\bar{h}_0, \mathcal{G}(\omega^2) \bar{h}_0)$ , может быть представлен как:

$$G(\omega^2) = \lim_{n \rightarrow \infty} G_n(\omega^2); \quad G_n(\omega^2) = \frac{Q_n(\omega^2) - b_{n-1} Q_{n-1}(\omega^2) K_{\infty}(\omega^2)}{P_n(\omega^2) - b_{n-1} P_{n-1}(\omega^2) K_{\infty}(\omega^2)}, \quad (2)$$

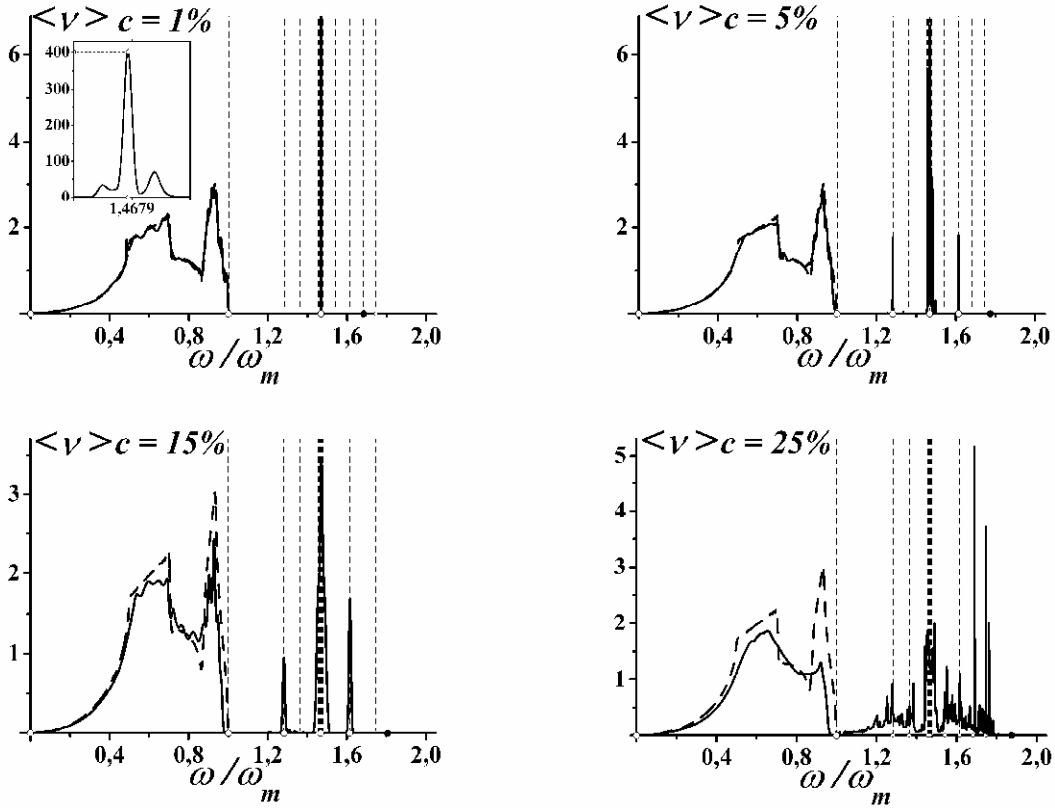
где  $P_n(\omega^2)$  и  $Q_n(\omega^2)$  - полиномы степени  $n$ , удовлетворяющие одному и тому же рекуррентному соотношению  $b_n \{P, Q\}_{n+1}(\omega^2) = (\omega^2 - a_n) \cdot \{P, Q\}_n(\omega^2) - b_{n-1} \{P, Q\}_{n-1}(\omega^2)$ , но при различных начальных условиях:  $P_{-1}(\omega^2) \equiv 0$ ;  $P_0(\omega^2) \equiv 1$  и  $Q_0(\omega^2) \equiv 0$ ;  $Q_1(\omega^2) \equiv b_0^{-1}$ . Функция  $K_{\infty}(\omega^2)$  определяется асимптотическим поведением элементов *J-матрицы*, определяемых в свою очередь топологией области квазинепрерывного спектра системы. Так, если все частоты квазинепрерывного спектра  $\omega \notin [0; \omega_m]$ , то

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = 2 \lim_{n \rightarrow \infty} b_n = \omega_m^2 / 2 \quad (3)$$

и функция  $K_\infty(\omega^2) = \frac{4}{\omega_m^2} \left\{ 2\omega^2 - \omega_m^2 + [i\Theta(\omega_m - \omega) - \Theta(\omega - \omega_m)] \sqrt{\omega^2 |\omega^2 - \omega_m^2|} \right\}$ , где  $\Theta(x)$ - функция Хевисайда.

Мнимая часть ЛФГ (2) существует только в полосе сплошного спектра и определяет спектральную плотность:  $\pi v(\omega) = \text{Im } G(\omega) = 2\omega \text{Im } G(\omega^2)$ . На рисунке сплошными линиями представлены зависимости  $\langle v(\omega) \rangle$  (символом  $\langle \dots \rangle$  обозначено усреднение по различным конфигурациям расположения примесных атомов) при значениях концентрации  $c=1; 5; 15$  и  $25\%$  легкой ( $m'/m = 1/4$ ) изотопической примеси замещения, находящейся в ГЦК кристаллической решетке (фононная плотность идеального ГЦК кристалла изображена штриховой линией на каждом из фрагментов). Прежде всего, оказывается, что хотя такая примесь, будучи изолированным дефектом, формирует в фононном спектре кристалла локальную частоту (ЛЧ), отделенную от полосы квазинепрерывного спектра широкой щелью, область сплошного спектра неупорядоченного раствора даже при  $c=1\%$  является односвязной, поскольку спектральная плотность в этой щели экспоненциально мала [1], но не обращается в нуль. Асимптотическое поведение элементов  $J$ -матрицы описывается соотношением (3), в котором максимальная частота (отмечена на всех фрагментах рисунка как  $\bullet$ , а под  $\omega_m$  далее понимается максимальная частота беспримесного кристалла) является возрастающей функцией концентрации. При  $c=1\%$ , на врезке, в масштабе, сильно увеличенном вдоль оси абсцисс и уменьшенном вдоль оси ординат изображен фрагмент функции  $\langle v(\omega) \rangle$  при  $\omega \approx \omega_l^{(1)}$  - положению ЛЧ от одной изолированной примеси. При  $c=5$  и  $15\%$  основной максимум находится на этой же частоте, но кроме того, при этих концентрациях имеют место два заметно удаленных от него пика: при  $\omega \approx \omega_l^{(2-)}$  и  $\omega \approx \omega_l^{(2+)}$ , то есть ЛЧ, обусловленными соответственно син- и противофазными колебаниями изолированной пары рядом расположенных примесей. Такой характер эволюции функции  $\langle v(\omega) \rangle$  с ростом  $c$  объясняется тем, что уравнение Лифшица [1,2], определяющее положение ЛЧ, содержит вещественную часть ЛФГ при  $\omega > \omega_m$ , для которой соотношение (2) выполняется с высокой точностью уже при  $n = 1$ , то есть когда спектральная плотность определяется по двум первым моментам [8]. Поэтому, при  $c \leq 30 \div 40\%$  заметный вклад в формирование примесной зоны вносят только такие конфигурации дефектных атомов, которые образованы примесями, непосредственно взаимодействующими друг с другом, то есть примесные пары, правильные треугольники и тетраэдры. ЛЧ, соответствующие таким *изолированным* дефектам нанесены на все фрагменты рисунка штриховыми линиями. Резонансные пики на функции  $\langle v(\omega) \rangle$  вблизи ЛЧ, соответствующих колебаниям примесных треугольников и тетраэдров отчетливо видны при  $c=25\%$ . Также штриховыми линиями изображены ЛЧ, соответствующая *одной* изолированной примеси, определяющей основной максимум, и сгруппировавшиеся вокруг нее ЛЧ, соответствующие парам атомов, являющихся вторыми, третьими и четвертыми соседями друг друга (то есть, когда изменяется только второй момент спектральной плотности, при неизменном первом). Эти колебания, как видно из рисунка, и определяют размытие основного максимума при малых  $c$ . Для всех этих ЛЧ в «двухмоментном приближении» можно написать простые аналитические выражения, описывающие их положение с высокой точностью ( $\sim 10^{-3} \div 10^{-4}$ ) [8]. Например:

$$\left[\omega_l^{(1)}\right]^2 = \frac{\omega_m^2}{4\sqrt{|\varepsilon|(1-\sqrt{|\varepsilon|})}} \Theta\left(-\frac{1}{4}-\varepsilon\right); \quad (4)$$



$$\left[\omega_l^{(2-)}\right]^2 = \left(\frac{\omega_m}{4}\right)^2 \frac{28|\varepsilon|-13+5\sqrt{14|\varepsilon|-5}}{(1-|\varepsilon|)(8|\varepsilon|-3)} \Theta\left(-\frac{15}{32}-\varepsilon\right); \quad (5)$$

$$\left[\omega_l^{(2+)}\right]^2 = \left(\frac{\omega_m}{4}\right)^2 \frac{52|\varepsilon|-17+7\sqrt{26|\varepsilon|-1}}{(1-|\varepsilon|)(8|\varepsilon|-1)} \Theta\left(-\frac{5}{32}-\varepsilon\right), \quad (6)$$

здесь  $\varepsilon = \Delta m / m$  - дефект массы. В рассматриваемом случае ( $\varepsilon = -3/4$ ) соответствующие локальные частоты равны:  $\omega_l^{(1)} \approx 1.4679\omega_m$ ;  $\omega_l^{(2-)} \approx 1.2821\omega_m$  и  $\omega_l^{(2+)} \approx 1.6141\omega_m$  (см. Рис.).

### Список литературы

- [1] И.М.Лифшиц, С.А.Гредескул, Л.А.Пастур, Введение в теорию неупорядоченных систем, Наука, М. (1982).
- [2] I.M.Lifshitz, A.M.Kosevich, Repts. Progr.Phys., **29**, 1, 217 (1966).
- [3] М.А.Иванов, Ю.Г.Погорелов, ЖЭТФ, **72**, 11, 2198 (1977).
- [4] Л.А.Фальковский, ЖЭТФ, **117**, 4, 735 (2000).
- [5] М.А.Иванов, В.С.Молодид, Ю.В.Скрипник, ФНТ, **30**, 10, 1086 (2004).
- [6] В.И.Пересада, в сб. Физика конденсированного состояния, ФТИНТ АН УССР, Харьков (1968) с. 172-210.
- [7] В.И.Пересада, В.Н.Афанасьев, В.С.Боровиков, ФНТ, **1**, 4, 461 (1975).
- [8] А.В.Котляр, Локализация колебаний вблизи примесного комплекса в кристаллической решетке, дипломная работа бакалавра физики (рук. С.Б.Феодосьев), ХНУ, Харьков (2002).