

Структура колебательного спектра двухкомпонентной неупорядоченной цепочки произвольного состава

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

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

Статья поступила в редакцию 3 марта 2008 г.

Основываясь на методе Дина, в изотопическом приближении проведен детальный расчет и анализ колебательного спектра длинных неупорядоченных линейных цепочек при произвольных соотношениях между концентрациями двух компонентов. Особое внимание уделено случаю преобладания легких атомов. Показано, что в области непрерывного спектра возникает большое количество резонансных особенностей, отвечающих колебательным модам коротких цепочек легких атомов с закрепленными концами. Ширины образующихся провалов линейно зависят от концентрации тяжелых атомов, а их глубины от концентрации не зависят и определяются отношением масс атомов. С ростом этого отношения, начиная с двух, провалы последовательно превращаются в запрещенные зоны, ширины которых также линейно зависят от концентрации тяжелых атомов. Найдены и проанализированы новые условия раскрытия таких зон и показано, что они не могут попадать внутрь спектра идеальной цепочки тяжелых атомов. Прослежено, как происходит переход от структуры квазинепрерывного спектра с серией провалов к иерархической структуре локальных колебаний, которая имеет место при малых концентрациях легких атомов.

Спируючись на метод Діна, в ізотопічному наближенні виконано детальні розрахунки та аналіз коливального спектра довгих неупорядкованих лінійних ланцюжків при довільному співвідношенні між концентраціями двох компонентів. Особливу увагу приділено випадку більш високої концентрації легких атомів. Показано, що в області неперервного спектра з'являється велика кількість резонансних особливостей, які відповідають коливальним модам коротких ланцюжків легких атомів із закріпленими кінцями. Ширини виникаючих провалів лінійно залежать від концентрації важких атомів, в той час як їхні глибини не залежать від концентрації і визначаються співвідношенням мас атомів. Зі зростанням цього відношення, починаючи з двох, провали послідовно перетворюються в заборонені зони, ширини яких теж лінійно залежать від концентрації важких атомів. Знайдені та проаналізовані нові умови розкриття таких зон та показано, що вони не можуть попадати вглиб спектра ідеального ланцюжка важких атомів. Простежено, як відбувається перехід від структури квазинепрервного спектра з серією провалів до ієрархічної структури локальних коливань, яка має місце при малих концентраціях легких атомів.

PACS: **63.22+m** Фононы в низкоразмерных структурах и малых частицах;
63.50.+x Колебательные состояния в неупорядоченных системах;
63.20.Pw Локализованные моды.

Ключевые слова: примеси, неупорядоченные цепочки, спектр, фононы.

1. Введение

Уже в первых работах И.М. Лифшица был сделан вывод о том, что в окрестности частоты примесного локального колебания спектр имеет сложную иерархическую структуру [1–3]. Так, спектральные линии,

которые соответствуют колебаниям изолированных легких атомов, являются точками сгущения линий примесных пар, те, в свою очередь, оказываются точками сгущения линий, отвечающих тройкам примесей, и т.д. В дальнейшем существенный вклад в разви-

тие теории неупорядоченных систем внесли работы А.М. Косевича [4–7].

Наличие сложной структуры в высокочастотной части спектра неупорядоченных кристаллов, в первую очередь таких простейших систем, какими являются неупорядоченные линейные цепочки, было подтверждено численными расчетами, проведенными П. Динем в середине 60-х годов двадцатого столетия [8–10]. Считалось, что внутри области концентрационного уширения локальной моды как для трехмерных, так и для одномерных систем, плотность состояний является достаточно плавной функцией [11]. Однако существующие в то время вычислительные возможности не позволили детально проанализировать спектр таких систем из-за существенных ограничений на длину цепочки. В настоящее время вычислительная техника позволяет рассматривать цепочки с числом атомов, соответствующим размеру образца порядка нескольких сантиметров и более (в данной работе будут моделироваться цепочки длиной до $6 \cdot 10^9$ атомов). В результате оказывается возможным исследовать тонкую структуру спектра таких систем значительно более подробно, вплоть до того, что удастся определять положения отдельных уровней спектра, в том числе и внутри области концентрационного уширения и квазинепрерывной области. Это, в свою очередь, может способствовать более глубокому пониманию процессов формирования спектров неупорядоченных систем, а также выработке адекватного аналитического его описания.

В наших работах [12,13] детально рассмотрен колебательный спектр неупорядоченных цепочек в области локальных колебаний и сопоставлены результаты численного и некоторого приближенного аналитического расчетов. Интересно отметить, что при всех уменьшениях масштаба, насколько это позволяет вычислительная процедура, полностью сохраняется самоподобная структура спектра относительно любого из уровней. Такая иерархическая структура остается неизменной и глубоко в области концентрационного уширения, что позволяет говорить о том, что в окрестности локальной моды спектр обладает характерными особенностями фрактала. В работе [14] проведен расчет колебательного спектра неупорядоченных линейных цепочек также с легкими примесями замещения, но внутри исходной квазинепрерывной области спектра. Основным выводом работы состоял в том, что в высокочастотной части этой области, начиная с ее середины, возникает достаточно сложная структура, состоящая из серий провалов и максимумов, положения которых сгущаются к высокочастотному краю зоны, и определены положения таких особенностей.

Однако особый интерес вызывает исследование всей области спектра при различных произвольных соотно-

шениях концентраций легких и тяжелых атомов, включая все области квазинепрерывного спектра. В какой-то мере вопрос о возникновении серий особенностей в этих областях был поднят еще в 60-х годах прошлого столетия японскими авторами Хори и Матсудой [15,16], которыми отмечено существование в спектрах особых точек с нулевой плотностью состояний при произвольных концентрациях компонентов. Однако структура этих особенностей оставалась неясной.

Представляет поэтому интерес подробно проанализировать колебательный спектр неупорядоченной линейной цепочки при вариациях состава и отношений масс легких и тяжелых атомов в максимально широких пределах. Численному решению этих вопросов и будет посвящена настоящая работа. Все расчеты будут выполнены методом Дина [8–10] с использованием длинных неупорядоченных двухатомных цепочек произвольного состава в рамках изотопической модели. Особое внимание будет уделено анализу условий возникновения тех или иных особенностей внутри различных участков квазинепрерывного спектра, а также определению характера их зависимости от соотношения масс и концентрации компонентов. В том числе это будет относиться к возникновению серий запрещенных областей спектра с нулевой плотностью состояний. Будет также прослежено, как с изменением состава происходит переход от квазинепрерывной структуры спектра с сериями особенностей к иерархической структуре локальных колебаний.

2. Общая структура спектров неупорядоченных линейных цепочек

В качестве модели выберем линейную одномерную неупорядоченную цепочку, состоящую из N атомов двух сортов с массами m_L и m_H ($m_L < m_H$). Будем полагать, что атомы обоих типов расположены в узлах решетки случайным образом и взаимодействуют только с ближайшими соседями, причем силовая постоянная γ одинакова для всех атомов (изотопическая модель). Уравнения движения такой системы имеют вид:

$$m_i \ddot{u}_i = \gamma (u_{i-1} + u_{i+1} - 2u_i), \quad (1)$$

где u_i — смещение i -го атома, а m_i принимает значение m_L , если i -й узел занят легким атомом, или m_H — если тяжелым. Перейдем далее к безразмерным переменным, полагая равными единице массу легкого атома и максимальную частоту колебаний системы (максимальную частоту колебаний цепочки, составленной из легких атомов): $m_L = 1$, $\omega_0^2 = 4\gamma/m_L = 1$.

Использованный в данной работе подход, основанный на методе Дина [8–10], в настоящее время позволяет проводить расчеты для весьма длинных неупорядоченных цепочек (с $N \sim 10^8 - 10^{10}$) произвольного состава и полу-

чать значения как для спектральной плотности частот такой цепочки, так и для положений всех отдельных частот колебаний практически с произвольной степенью точности. Практически все приведенные ниже расчеты будут выполнены для цепочек с $N = 5 \cdot 10^8$, когда почти достигается термодинамический предел ($N \rightarrow \infty$), и только в отдельных случаях, где это указано, будут приводиться данные для более длинных цепочек. В то же время на каждом из графиков будут представлены лишь по 200 значений соответствующих величин (гистограмм), поскольку большее число таких значений трудно как для воспроизведения, так и для восприятия.

Проиллюстрируем вначале общую динамику изменения спектрального распределения частот рассматриваемой неупорядоченной цепочки при изменении ее состава. На рис. 1 схематически представлены типичные результаты, полученные при $m_H = 3$ для разных значений атомной концентрации тяжелых атомов c . Здесь приведены спектры, отвечающие как преобладанию легких атомов (рис. 1,а,б), так и тяжелых атомов (рис. 1,в), а также при равной их концентрации

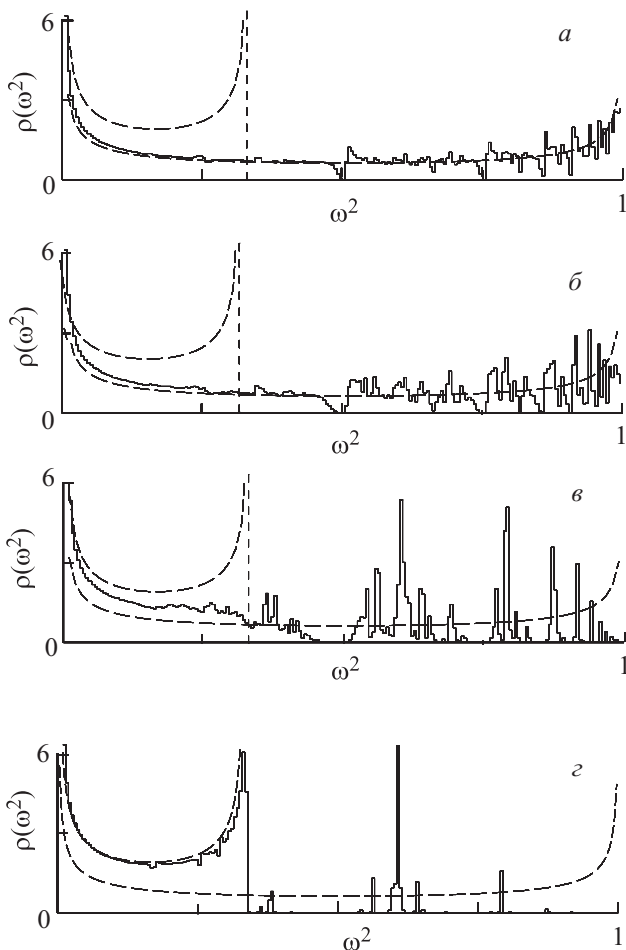


Рис. 1. Изменение структуры спектральной плотности линейной цепочки с ростом концентрации c тяжелых атомов при различной концентрации. c : 0,1 (а); 0,2 (б); 0,5 (в); 0,9 (г). $m_H = 3$.

(рис. 1,г). По горизонтальной оси отложены значения квадратов частот ω^2 , а по вертикальной – плотность состояний $\rho(\omega^2)$, нормированная на единицу. Пунктирной линией показаны спектры идеальных цепочек, состоящих из атомов разных сортов. Вертикальной пунктирной линией обозначена верхняя граница спектра идеальной тяжелой цепочки с массой m_H .

Характерной особенностью приведенных спектров является наличие большого числа разного рода резонансов (в частности, провалов и сопровождающих их всплесков в плотности состояний), которые существуют при любом составе цепочки. В том случае, когда в цепочке преобладают легкие атомы, спектр в целом остается похожим на спектр идеальной цепочки, состоящей из таких атомов, однако в нем присутствует целый ряд неоднородностей, расположенных преимущественно в высокочастотной области (рис. 1,а). Эти неоднородности представляют собой расположенные рядом пик и провал, который на некоторых частотах оказывается настолько глубоким, что здесь возникает запрещенная зона. С ростом концентрации ширина и интенсивность этих особенностей заметно увеличиваются (рис. 1,б), однако их положение на шкале частот остается неизменным. Анализ такого рода особенностей для цепочек с преобладанием легких атомов, как уже отмечалось во введении, и будет в основном посвящена настоящая работа. В случае, когда концентрации разных атомов становятся сравнимыми, высокочастотная половина спектра оказывается практически полностью структурированной (рис. 1,в). При дальнейшем увеличении количества тяжелых атомов в низкочастотной части спектра формируется зона, отвечающая таким атомам, а спектр в высокочастотной области можно рассматривать как проявление структуры локальных колебаний, возникающих при наличии изолированных легких примесей в тяжелой матрице [12,13].

3. Структура спектра неупорядоченной цепочки при преобладании тяжелых атомов

Случай, когда концентрация легких атомов относительно мала, подробно рассмотрен нами в работах [12–14]. Здесь кратко остановимся только на некоторых из этих результатов, которые будут необходимы для дальнейшего изложения.

На рис. 2 показан характер изменения спектра линейной цепочки с преобладанием тяжелых атомов при одной и той же их концентрации ($c = 0,8$), но при разных значениях массы m_H . На рисунке хорошо видно, что спектр в низкочастотной (слабовозмущенной и квазинепрерывной) области и в области локальных колебаний является принципиально разным не только на «макроскопическом» уровне, т.е. по общему виду, но и на «микроскопическом», а именно по характеру

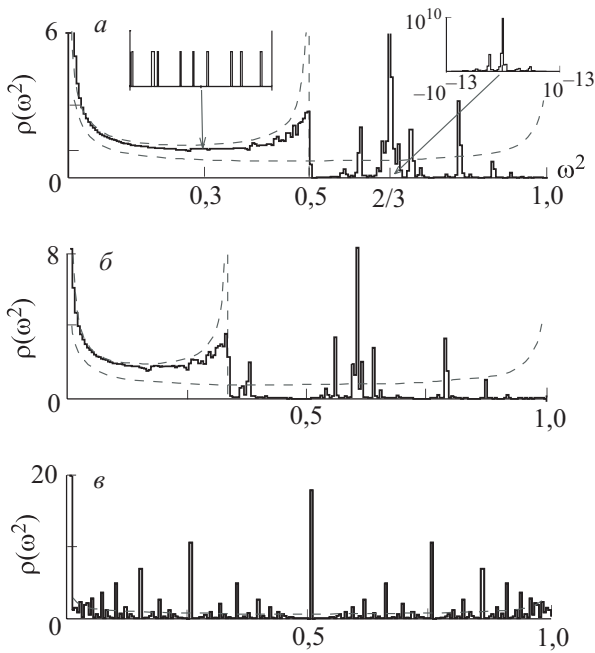


Рис. 2. Изменение структуры спектра неупорядоченной цепочки с преобладанием тяжелых атомов при увеличении их массы m_H : 2 (а); 3 (б); 50 (в), $c = 0,1$. Остальные обозначения такие же, как и на рис. 1. На «врезанных» графиках показан характер спектра в более детальном масштабе.

статистического распределения положений отдельных уровней.

Остановимся сначала на высокочастотной области спектра, рассмотренной в [12,13]. На правом вынесенном графике на рис. 2,а в максимально крупном масштабе представлена более тонкая структура локальной моды. Хорошо видно, что центральный пик является точкой сгущения для других пиков, которые в свою очередь являются точками сгущения следующих по иерархии уровней. Весьма существенно, что при всех последовательных уменьшениях масштаба, насколько это позволяет вычислительная процедура (более чем на десять порядков), полностью сохраняется самоподобная структура спектра относительно любого из уровней. Такая иерархическая структура окрестности локального колебания остается неизменной и глубоко в области концентрационного уширения, где можно было бы предполагать псевдонепрерывное поведение плотности состояний. Все это позволяет говорить о том, что в окрестности локальной моды спектр обладает характерными особенностями фрактала.

При увеличении массы атомов тяжелого типа (рис. 1,б,в) область невозмущенной зоны становится все более узкой, и в предельном случае бесконечно большой массы примеси спектр становится четко структурированным и симметричным относительно своего центра.

Иная картина, как уже отмечалось, наблюдается в низкочастотной области спектра, соответствующей колебаниям цепочки, состоящей только из тяжелых атомов. Как видно на рис. 2,а,б, здесь плотность состояний является квазинепрерывной функцией. Причем в левой ее половине эта функция носит гладкий характер и только оказывается несколько меньше плотности состояний исходной «тяжелой» зоны. Однако, начиная с центра зоны, особенно на ее высокочастотной половине, возникают все более отчетливые серии минимумов и максимумов.

Характер распределения частот отдельных колебательных мод в этой области существенно отличается от иерархической структуры вблизи локального уровня и подробно рассмотрен в [14]. Была найдена функция распределения частотных интервалов между двумя соседними модами и показано, что она носит экспоненциальный характер без корреляционного провала в центре (одномерная функция распределения Пуассона). Радиус спадающей указанной функции определяется средней плотностью состояний в рассматриваемой области спектра. Таким образом, распределение частот отдельных мод носит полностью хаотический характер. Пример расчета положений отдельных колебательных мод спектра и характер их распределения показан на левом вынесенном графике на рис. 2,а.

Перейдем теперь к описанию характера особенностей, которые присутствуют в области спектра идеальной цепочки, состоящей только из тяжелых атомов. Соответствующие провалы и всплески хорошо видны на рис. 1,з, рис. 2,а и 2,б, а также на рис. 3,б. Нетрудно видеть, что их положения на частотной шкале не зависят от концентрации атомов (в данном случае лег-

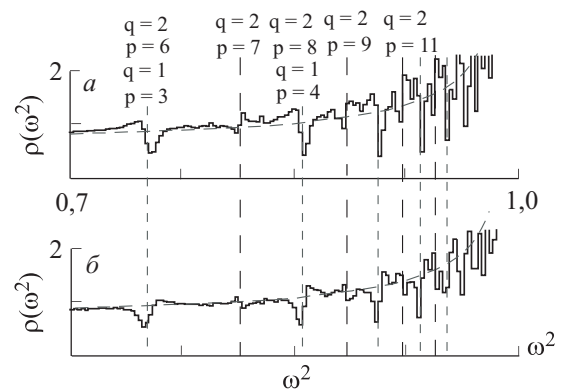


Рис. 3. Характер особенностей в плотности состояний линейной цепочки в высокочастотной области непрерывного спектра. Малая концентрация не очень тяжелых атомов $m_H = 1,8$, $c = 0,1$ (а); край зоны непрерывного спектра тяжелых атомов при малой концентрации легких атомов $m_H = 5$, $c = 0,9$ (б). Шкалы частот для обоих графиков совмещены. Вертикальными линиями обозначены некоторые из частот ряда (1).

ких), и они сгущаются при приближении к верхнему краю невозмущенной зоны тяжелых атомов. Глубины провалов практически одинаковы для различных концентраций, но растут с увеличением отношения масс атомов разного типа. Существенно, однако, что и в центре провала плотность состояний всегда остается конечной, а распределение частот отдельных мод и интервалов между соседними модами остается таким же случайным, как и в слабозвозмущенных областях спектра.

Рассматриваемые здесь особенности спектра имеют вид резонансов и по своему виду отвечают резонансному взаимодействию мод квазинепрерывного спектра с некоторыми пространственно локализованными модами, обусловленными наличием легких примесей. В качестве таких объектов, частоты локализованных колебаний которых попадают в рассматриваемую здесь относительно низкочастотную область спектра, можно представить короткие цепочки из тяжелых атомов, ограниченные легкими атомами. Частоты колебаний легких атомов существенно больше, чем тяжелых, и их положения за время колебаний тяжелых атомов успевают многократно измениться, так что в среднем их можно полагать неподвижными. Поэтому мы приходим к возможности интерпретации указанных особенностей спектра исходя из модели колебаний ограниченной цепочки тяжелых атомов с закрепленными концами. Пусть такая цепочка состоит из $n \geq 1$ тяжелых атомов плюс еще два закрепленных атома. Частоты ее колебаний можно записать в следующем виде:

$$\omega_H^2(p, q) = \omega_{0H}^2 \sin^2\left(\frac{\pi}{2} \frac{p-q}{p}\right), \quad \omega_{0H}^2 = \frac{1}{m_H},$$

$$1 \leq q \leq p-1, \quad (2)$$

где ω_{0H}^2 — квадрат частоты верхнего края зоны идеальной цепочки тяжелых атомов; p и q — целые положительные числа; $p = n + 1 \geq 2$ характеризует длину цепочки, а q описывает номер колебательной моды этой цепочки и пробегает значения от 1 до $p-1$.

Все проведенные численные расчеты, представленные в [14], а также в настоящей работе, показывают, что все провалы, которые возникают в области колебаний тяжелой цепочки при относительно невысокой концентрации легких атомов, действительно носят характер резонансов, а положения их центров описываются выражениями (2). Отметим также, что в рамках такого подхода становится понятным, что ширины провалов линейно растут с повышением концентрации, однако их глубины практически не зависят от концентрации, поскольку в точке минимума рост интенсивности компенсируется увеличением ширины.

4. Структура спектра цепочки при преобладании легких атомов

Перейдем к рассмотрению цепочек, состоящих главным образом из легких атомов, при относительно небольшой концентрации тяжелых атомов. В этом случае локальные моды не возникают, так что спектр практически всюду имеет псевдонепрерывную структуру с хаотически распределенными отдельными уровнями [14]. Но на фоне такого распределения снова должны проявляться серии различных резонансов, в некоторой степени аналогичные тем, которые имеют место для цепочек, состоящих, в основном, из тяжелых атомов и рассмотренных в предыдущем разделе. Однако в рассматриваемом здесь случае ситуация существенно зависит от отношения масс атомов разного сорта.

4.1 Особенности плотности состояний при меньших отношениях масс атомов ($m_H < 2$)

Рассмотрим сначала более подробно верхний край зоны, где наличие особых частот особенно явно выражено в структуре спектра. В случае, когда масса m_H не сильно превышает m_L , а концентрация относительно тяжелых атомов невелика, в плотности состояний действительно возникает целый ряд резонансных провалов, амплитуда которых увеличивается с ростом m_H . В качестве иллюстрации на рис. 3,а показан спектр цепочки при $m_H = 1,8$ и концентрации тяжелых атомов $c = 0,1$. Пунктирной линией показана плотность колебательных состояний идеальной легкой цепочки. Интересно тот факт, что описанная система особенностей очень похожа на ту, которая наблюдается внутри основной зоны при преобладании тяжелых атомов. Для иллюстрации этого на рис. 3,б приведен аналогичный расчет, выполненный для верхнего края основной зоны тяжелых атомов при $m_H = 5$ и относительно малой концентрации легких атомов $c = 0,9$. Масштаб выбран таким образом, чтобы ширины зон тяжелых и легких атомов совпадали между собой. Видно, что при наложении друг на друга обе картины оказываются очень похожими, в первую очередь положениями резонансных особенностей (на рис. 3 тонкими вертикальными пунктирными линиями отмечены некоторые частоты, отвечающие выражению (2), и указаны соответствующие им значения величин p и q). На графиках отчетливо видны минимумы на частотах, соответствующих значению $q = 1$, а также ряд менее интенсивных особенностей на частотах, которые соответствуют $q = 2$. Отметим только, что по своему виду особенности на рис. 3,а и 3,б оказываются, скорее, зеркально симметричными между собой относительно номинального положения особенностей согласно (2).

Поэтому можно полагать, что и в случае неупорядоченных цепочек с преобладанием легких атомов возникающие особенности носят характер резонан-

сов и обусловлены взаимодействием колебаний квази-непрерывного спектра с некоторыми пространственно локализованными модами, обусловленными наличием тяжелых примесей. Такими структурами, частоты которых попадают в рассматриваемую здесь высокочастотную область спектра, могут служить короткие цепочки из легких атомов, ограниченные тяжелыми атомами. Частоты колебаний последних существенно меньше, чем у легких, так что эффективно их можно полагать неподвижными. Поэтому снова приходим к возможности интерпретации указанных особенностей спектра исходя из частот колебаний теперь уже ограниченной цепочки легких атомов с закрепленными концами. Соответственно частоты колебаний такой цепочки имеют вид

$$\omega_L^2(p, q) = \sin^2\left(\frac{\pi}{2} \frac{p-q}{p}\right), \quad 1 \leq q \leq p-1, \quad (3)$$

а индексы $p = n + 1 \geq 2$ и q имеют тот же смысл, как и в выражении (2). Именно на таких частотах и проявлялись особенности как на рис. 3,а, так и на рис. 1,а,б, а также на всех последующих графиках. Подтверждением резонансного характера провалов служит тот факт, что и в данном случае с увеличением концентрации примесных (тяжелых) атомов ширина провала растет, однако его глубина от концентрации практически не зависит. На рис. 4 приведена зависимость от концентрации тяжелых атомов полуширины одного из минимумов. Вследствие того, что формирование левого и правого «склонов» может иметь различную природу, будем рассматривать левую (Δ_L) и правую (Δ_R) полуширину в отдельности. Как видно на этом рисунке, зависимости Δ_L и Δ_R от концентрации носят линейный характер, причем такая зависимость сохраняется в достаточно широком интервале концентраций (рис. 4,б).

4.2 Условия возникновения областей спектра с нулевой плотностью состояний (запрещенных областей)

С увеличением массы тяжелых атомов глубины резонансных провалов, которые видны на рис. 3,а, существенно возрастают. Чтобы проследить такой рост, рассмотрим более подробно структуру спектра в окрестности какого-либо из резонансов. На рис. 5 показана плотность состояний в окрестности одной из наиболее интенсивных особенностей, расположенной на частоте $\omega^2 = 0,75$ ($p = 3, q = 1$), при различных значениях массы m_H , но одинаковых концентрациях тяжелых атомов ($c = 0,1$). При этом полностью аналогичным оказывается поведение и других резонансов серии с $q = 1$, в том числе и центрального резонанса с частотой $\omega^2 = 0,5$, отвечающего $p = 2$. Как видно, при $m_H = 1,5$ (рис. 5,а) особенность в этой области спектра

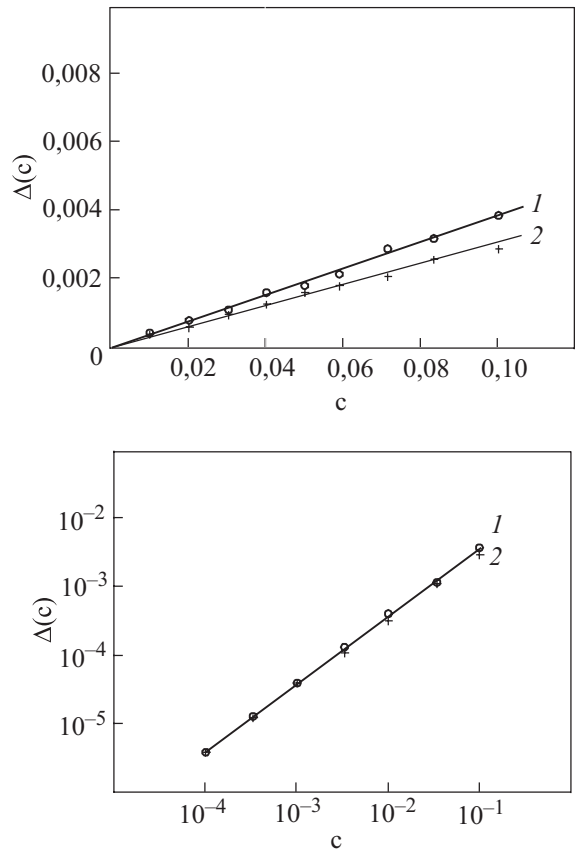


Рис. 4. Зависимость полуширин провалов от концентрации тяжелых атомов. $\omega^2 = 0,75$ ($q = 1, p = 3$); $m_H = 1,9$. 1 – Δ_L ; 2 – Δ_R . линейный масштаб (а); двойной логарифмический масштаб (б).

имеет еще достаточно сложную форму. При $m_H = 1,9$ (рис. 5,б) эта особенность имеет четкий вид провала, а в его центре плотность состояний оказывается много меньше исходной плотности. Можно ожидать, что с дальнейшим ростом m_H на месте таких провалов будут возникать запрещенные зоны.

В этой связи необходимо отметить работы [15,16], в которых на основании математического анализа уравнений движения был сделан вывод о том, что в спектрах неупорядоченных цепочек существуют некоторые особые частоты с нулевой плотностью состояний ($\rho(\omega^2) = 0$). Значения этих частот как раз описываются выражениями (3). Однако для существования таких частот или областей спектра параметр q , согласно [15,16], должен удовлетворять еще двум условиям (на параметр p ограничения не накладываются):

$$q \leq m_H - 1, \quad (4)$$

$$\text{ctg}^2\left(\frac{\pi}{2(q+1)}\right) \leq m_H - 1. \quad (5)$$

Условие (4) достаточно понятно: новые серии особых частот возникают по мере увеличения дефекта масс. Условие же (5), с нашей точки зрения, достаточ-

но противоречиво. Формально оно может быть получено следующим образом. Для определенной цепочки, состоящей из $n = p - 1$ легких атомов, наименьшей является частота с $q = p - 1$:

$$\omega_L^2(p, p-1) = \omega_L^2(q+1, q) = \sin^2\left(\frac{\pi}{2(q+1)}\right).$$

Если принять условие, что эта частота не должна попадать в область спектра, отвечающую колебаниям цепочки, состоящей только из тяжелых атомов, т.е.

$$\sin^2\left(\frac{\pi}{2(q+1)}\right) > \frac{1}{m_H}, \quad (6)$$

то получаем неравенство, тождественное с (5).

При анализе утверждений авторов [15,16] в первую очередь остается непонятным, что такое частоты с нулевой плотностью состояний, так как физический смысл имеет только нулевая вероятность попадания уровней в конечный частотный интервал. Поэтому условия возникновения особенностей с нулевой плотностью состояний и вообще их общий вид требуют дальнейшего рассмотрения. Собственно анализу этих вопросов и посвящена оставшаяся часть данной работы. Как будет видно в дальнейшем, даже условие (4) не оказывается строгим условием возникновения областей с нулевой плотностью состояний, т.е. запрещенных областей спектра. Его, скорее, можно рассматривать как тенденцию. Что же касается условия (5), то в нем утверждается, что плотность состояний не должна принимать нулевых значений на всех частотах серии с данным значением q (и произвольными значениями параметра p), если наименьшая из таких частот попадает внутрь области спектра идеальной тяжелой цепочки. Однако ниже будут приведены примеры, когда запрещенные области спектра все-таки возникают вблизи частот такой серии. При этом общим условием возникновения запрещенной зоны, помимо (4), оказывается следующее неравенство:

$$\omega_L^2(p, q) = \sin^2\left(\frac{\pi}{2} \frac{p-q}{p}\right) > \frac{1}{m_H}. \quad (7)$$

Содержание этого условия состоит в требовании того, чтобы только рассматриваемая резонансная частота, характеризуемая параметрами p и q , не попала в область спектра идеальной тяжелой цепочки.

Представляет интерес подробно проследить, как с ростом m_H происходит переход глубокого минимума в запрещенную зону. Поскольку для не очень длинных цепочек количество отдельных уровней в области минимума может оказаться не очень большим, а расстояние между соседними уровнями соизмеримым с шириной запрещенной зоны, то для определения момента образования запрещенной зоны необходимо использовать цепочки максимально большой длины. Поэтому на рис. 5,6, где именно и анализируется момент образования запрещенной области, представлены результаты расчета неупорядоченной цепочки, состоящей из $N = 6 \cdot 10^9$ атомов. Здесь выбраны три различные значения массы тяжелых атомов, близкие к двум, когда, собственно, и должна возникать запрещенная зона, отвечающая серии $q = 1$. На этом рисунке видно, что при $m_H = 1,98$ плотность состояний в районе особенности имеет конечное ненулевое значение. При $m_H = 1,99$, на первый взгляд, наблюдается запрещенная зона. Однако

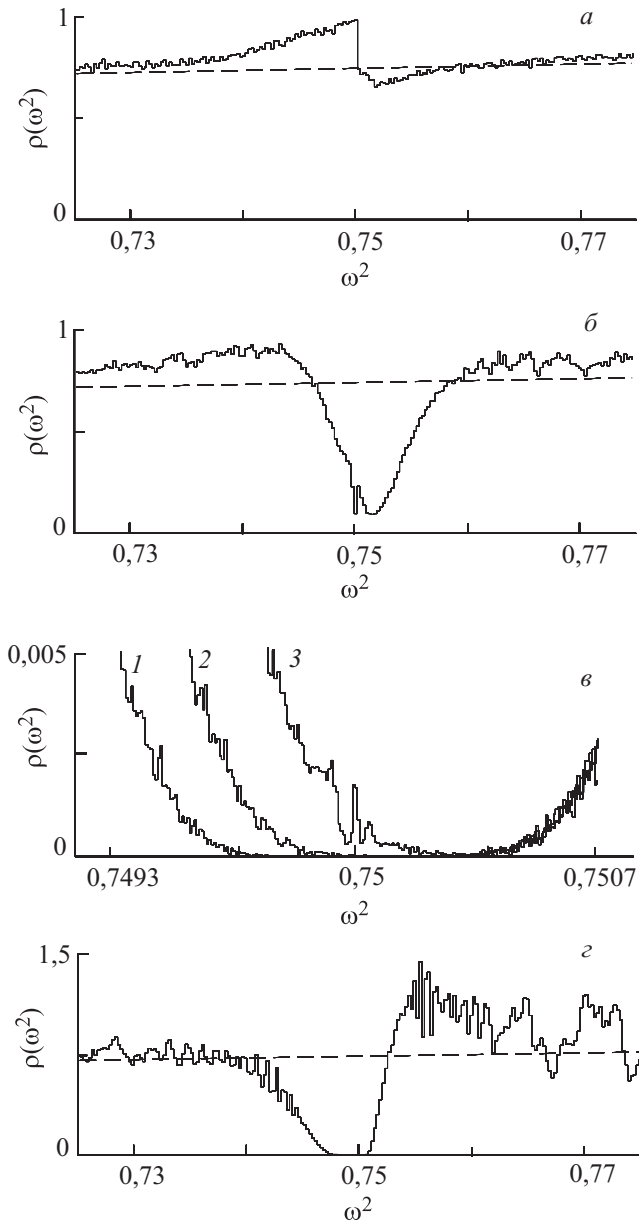


Рис. 5. Изменение спектра длинной цепочки в области $\omega^2 = 0,75$ ($q = 1, p = 3$) при увеличении массы тяжелой примеси m_H : 1,5 (а); 1,9 (б); 1 – 1,98; 2 – 1,99; 3 – 2,0 (в); 2,5 (г).

точный расчет показывает, что в этой области все же находится несколько отдельных уровней, положение которых зависит от реализации (на интервале частот $\Delta\omega^2 = 3,5 \cdot 10^{-4}$ остается только 9 уровней вместо $1,5 \cdot 10^3$ в невозмущенной зоне). Это свидетельствует о том, что и в этом случае плотность состояний имеет конечное, хотя и очень маленькое значение. И только при $m_H = 2,0$ формируется запрещенная зона. Аналогичным образом рассмотрено формирование запрещенных зон и вблизи других частот серии $q = 1$, в том числе на центральной резонансной частоте $\omega_L^2(2,1) = 0,5$ ($p = 2$). Оказалось, что все такие зоны возникают вблизи $m_H = 2,0$ (для больших значений p это значение оказывается немного меньшим), поэтому соответствующие результаты здесь не приводятся. На рис. 5,а показана уже хорошо сформировавшаяся запрещенная зона (при $m_H = 2,5$), края которой имеют явно несимметричную форму.

4.3 Особенности плотности состояний при больших массах тяжелых атомов ($m_H > 2$)

Перейдем теперь к анализу поведения спектров неупорядоченных цепочек при дальнейшем увеличении масс тяжелых атомов (и относительно малой их концентрации). Согласно (4), при $m_H \geq 3$ должна образоваться следующая серия частот с нулевой плотностью состояний, отвечающая $q = 2$. Однако, согласно (5), такая серия может возникать только при $m_H \geq 4$.

Исходя из результатов численного счета посмотрим, как будет происходить образование этой и других новых серий запрещенных областей.

Для удобства сначала приведем схему, на которой наглядно изображено положение особых частот, отвечающих выражению (3) при различных значениях параметров p и q (рис. 6). По горизонтальной оси на этой схеме отложены квадраты частот. По вертикальной оси с левой стороны отложены значения m_H . Жирной непрерывной линией в этих переменных показана зависимость квадрата частоты верхнего края зоны иде-

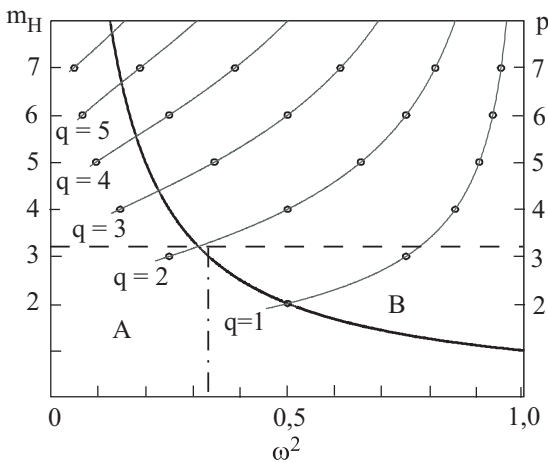


Рис. 6. Схема образования серий особых частот в плотности состояний.

альной цепочки, состоящей только из тяжелых атомов, от массы этих атомов ($\omega_{0H}^2 = 1/m_H$). С правой стороны по вертикальной оси отложены различные значения p . Кружками на схеме обозначены резонансные частоты в соответствии с (3), так что все частоты цепочки с заданным значением p (но разными q) расположены на одной горизонтали. Тонкими непрерывными линиями соединены частоты с одними и теми же (приведенными в таблице) значениями номера колебаний q . Одинаковые значения масштабов для m_H и p на вертикальных осях связаны с тем, что, согласно (4), условие возникновения области с нулевой плотностью состояний вблизи наименьшей частоты с данным p , т.е. для $q = p - 1$, имеет вид $p \leq m_H$. Значит, при указанном выборе масштаба условие (4) выполняется для всех частот цепочек, у которых $p \ll m_H$. Точно также можно показать, что условие (4) для серии с заданным q выполняется в том случае, когда нижайшая частота этой серии имеет ординату меньшую, чем величина m_H . Условие же (5) соответствует тому, что нижайшая частота этой серии лежит выше линии ω_{0H}^2 .

Проиллюстрируем на примере $m_H = 3,2$, как можно на основе рис. 5 определить, какие запрещенные области должны были бы существовать для заданного значения m_H , исходя из условий (4) и (5). Для этого нужно сначала провести горизонтальную линию, соответствующую значению m_H (на рис. 6 эта линия показана пунктиром). Затем из точки пересечения этой линии с кривой $\omega_{0H}^2(m_H)$ провести вниз вертикальную линию (на рис. 6 показана штрихпунктирной линией). Тогда условие (4) будет выполняться для серий линий с $q = 1$ и $q = 2$, которые начинаются как в области «А», так и «В». Условиям же (5) будут удовлетворять только серии, которые начинаются в области «В», т.е. для $m_H = 3,2$ запрещенные зоны должны были бы возникнуть только вблизи серии частот, отвечающих $q = 1$.

В действительности же, как показывают проведенные в настоящей работе численные расчеты, условия образования областей с нулевой плотностью состояний имеют несколько более сложный характер. Как следует из результатов предыдущего раздела (рис. 5,а), серия запрещенных областей, отвечающая $q = 1$, действительно начинается при массе m_H , близкой к двум, что соответствует условиям (4) и (5). Однако для серий с $q > 2$ такое соответствие, как будет показано ниже, уже не имеет места, хотя качественно тенденция, отвечающая условию (4), все же сохраняется.

Так, на рис. 7 показаны результаты расчетов для областей спектра вблизи частот, отвечающих значению $q = 2$ в (3), при различных значениях параметра p в случае, когда $m_H = 3$ (четные значения p на этом рисунке не приведены, так как соответствующие им частоты совпадают со значениями, отвечающими $q = 1$). Как видно на рис. 6, при $m_H = 3$ самый низкочастотный уровень этой

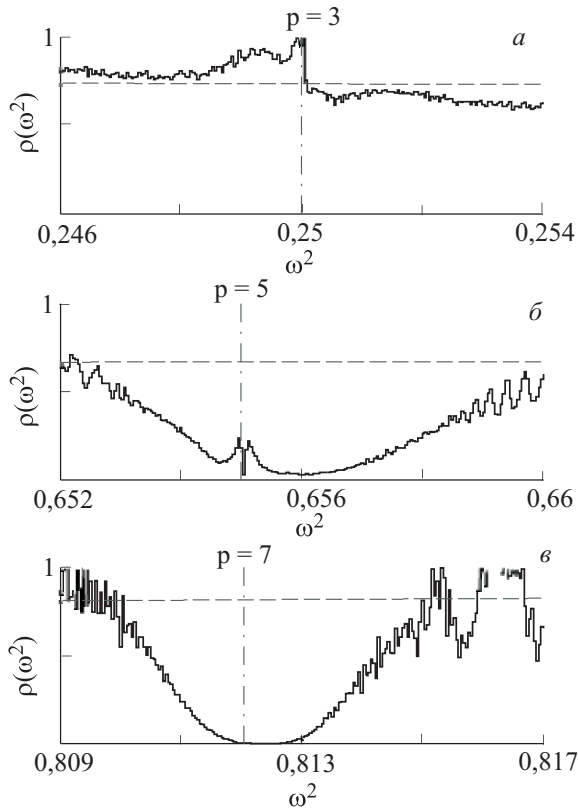


Рис. 7. Поведение спектра вблизи серии частот, отвечающих значению $q = 2$ в (3). $m_H = 3, c = 0, 1$. При различных p : 3 (а); 5 (б); 7 (в).

серии ($p = 3$) попадает внутрь зоны тяжелых атомов. Поэтому, исходя из условия (5), можно было бы полагать, что в рассматриваемом случае ($q = 2, m_H = 3$) области с нулевым значением плотности состояний не должны возникать ни при каких значениях параметра p . На частоте, отвечающей $p = 3$, как видно на рис. 7,а, действительно имеет место только небольшая неоднородность с относительно малой амплитудой. Однако для всех других линий серии $q = 2$, расположенных вне области непрерывного спектра тяжелых атомов (левее сплошной линии на рис. б), возникают хорошо выраженные провалы. Причем, если при $p = 5$ это все еще глубокий минимум, который имеет ненулевое «дно» (рис. 7,б), то, начиная с $p = 7$, в плотности состояний образуются четко выраженные запрещенные зоны (рис. 7,в). При небольшом увеличении массы тяжелого атома (когда $m_H = 3,15$) запрещенная зона возникает и вблизи частоты с $q = 2, p = 5$. Аналогичная картина имеет место и при значениях параметра $q > 2$. Так, в области частоты, отвечающей $q = 3, p = 5$, запрещенная зона раскрывается при $m_H \approx 4,4$, а для $q = 3, p = 7$ — при $m_H \approx 4,15$. Таким образом, образование запрещенных зон вблизи частот, отвечающих одному и тому же значению q , но разным p , происходит при разных значениях массы тяжелых атомов. Чем ближе расположена эта частота к высокочастотному краю спектра, тем меньшее значение m_H требуется для формирования запрещенной зоны. Возможно,

что такое поведение определяется уменьшением концентрационной ширины резонанса. Последней формируется зона, ближайшая к высокочастотному краю спектра идеальной тяжелой цепочки, но не попадающая в нее. Внутри же области колебаний идеальной цепочки, состоящей из тяжелых атомов, участки с нулевой плотностью состояний не возникают.

Сказанное позволяет сделать вывод, что неравенство (5) не может служить условием возникновения областей с нулевой плотностью состояний. Вместо него следует использовать неравенство (7). Что же касается (4), то, по-видимому, его следует рассматривать не как точное условие, а в значительной степени как некоторую тенденцию.

Укажем еще на несколько интересных особенностей перестройки спектра неидеальной цепочки, связанных с формированием запрещенных областей спектра.

Так, в области, где резонансный провал имеет тенденцию превратиться в запрещенную зону (рис. 5,б и рис. 7,б), при детальном рассмотрении видно, что фактически здесь имеют место два резонанса: один широкий, смещенный в сторону более высоких частот, а другой — весьма узкий, расположенный строго на частоте резонансной моды (3). Как показывают расчеты, оба соответствующие минимума имеют практически одинаковую глубину и сливаются при образовании запрещенной зоны (см. рис. 5,в). Природа второго минимума остается еще не до конца ясной.

Большое количество расчетов показывает, что ширины возникающих запрещенных областей спектра, как и ширины резонансных провалов (см. рис. 4), линейно зависят от концентрации тяжелых атомов в достаточно широкой области изменения этих концентраций. Ширины различных резонансов при одной и той же концентрации ($c = 0, 1$) и разных значениях масс m_H приведены в табл.1. Видно, что указанные ширины уменьшаются с ростом значений индексов p и q , однако растут с увеличением массы тяжелых атомов.

Таблица 1. Ширины резонансов при различных значениях индексов p и q .

q	p	2	3	4	5
1	$m_H = 3$	0,00565	0,00337	0,00205	0,00138
	$m_H = 4$	0,0061	0,00375	0,00235	0,00158
	$m_H = 5$	0,00685	0,00400	0,00245	0,00163
2	$m_H = 4$		0,00047	Совпадает с $q = 1, p = 2$.	0,00167
	$m_H = 5$		0,00242		0,00215
3	$m_H = 5$				0,00139
	$m_H = 6$				

При дальнейшем росте концентрации тяжелых атомов запрещенные зоны становятся все более широкими и начинают занимать все большую часть спектра. В оставшейся же части спектра плотность состояний существенно возрастает и постепенно превращается в иерархическую структуру локальных колебаний (см. рис. 1). Представляет интерес более подробно проследить за подобным перестроением на ограниченном частотном интервале. С этой целью на рис. 8 для $m_H = 3,5$ показано изменение спектра в широкой области концентраций на интервале от $\omega^2 = 0,7$ до $\omega^2 = 0,9$. При малой концентрации тяжелых атомов ($c = 0,05$, рис. 8,а) уже хорошо видны основные запрещенные зоны этого интервала, отвечающие $p = 3, q = 1$ ($\omega_L^2(3,1) = 0,75$) и $p = 4, q = 1$ ($\omega_L^2(4,1) \simeq 0,8536$). Такие частоты описывают наиболее высокочастотные моды колебаний цепочек с закрепленными концами, состоящих соответственно из двух и трех легких атомов. С ростом концентрации запрещенные области становятся все шире и все более отчетливо проявляется тонкая структура спектра (рис. 8,а,б). Наконец, при малой концентрации легких атомов (рис. 8,з) вблизи исходных запрещенных областей, но при несколько больших значениях частот, возникают хорошо определенные локальные уровни. При этом спектральная линия 1 отвечает максимальной частоте колебаний ближайшей пары легких атомов, т.е. естественным образом связана с модой $p = 3, q = 1$, а спектральная линия 2 — максимальной частоте колебаний кластера из трех легких атомов, являющихся ближайшими соседями, т.е. является очевидным продолжением моды $p = 4, q = 1$. Отметим также, что основной локальный уровень, отвечающий колебаниям изолированных легких атомов, формируется на частотах несколько больших, чем исходная мода, отвечающая $p = 2, q = 1$ ($\omega_L^2(2,1) = 0,5$).

5. Заключение

Таким образом, в настоящей работе, основываясь на методе Дина и пренебрегая изменениями силовых взаимодействий (т.е. в рамках изотопической модели), был проведен систематический и детальный численный расчет колебательного спектра длинных неупорядоченных линейных цепочек, состоящих из атомов двух типов, при произвольном соотношении между концентрациями компонентов. Особое внимание уделено случаю преобладания легких атомов. Показано, что спектр в этом случае имеет псевдонепрерывную структуру с большим количеством особенностей на резонансных частотах. Эти резонансы соответствуют колебаниям коротких цепочек с закрепленными концами, состоящих из разного числа легких атомов. Подробно изучена структура спектра вблизи этих особых частот. Установлено, что при от-

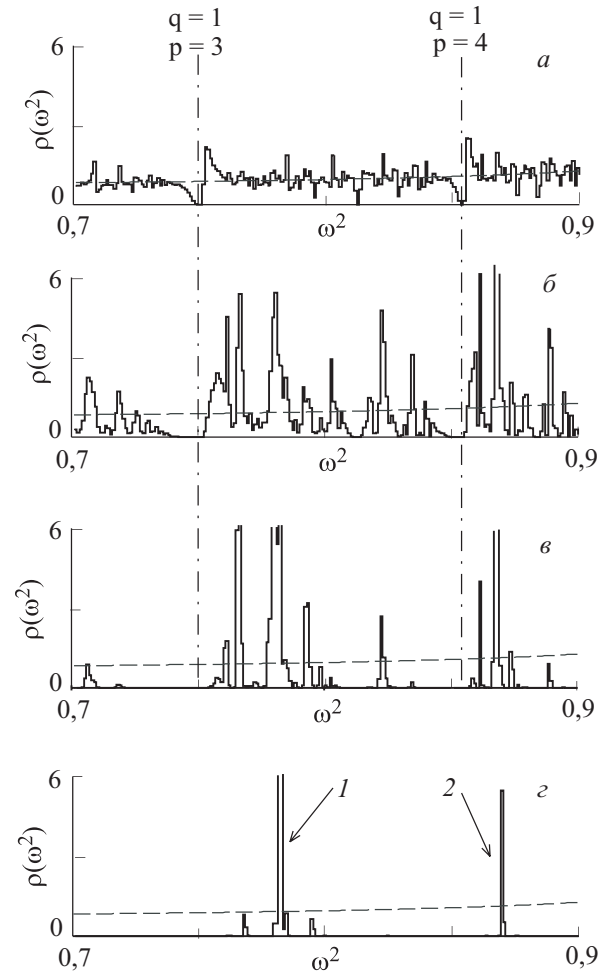


Рис. 8. Изменение структуры спектральной плотности с ростом концентрации тяжелых атомов c в некотором интервале частот: c : 0,05 (а) 0,2 (б) 0,5 (в) 0,9 (з), $m_H = 3,5$. Здесь 1 – высокочастотная локальная мода, отвечающая паре ближайших легких атомов ($\omega_1^2 = 0,79177$); 2 – наиболее высокочастотная мода локальных колебаний, отвечающая трем легким соседним атомам ($\omega_2^2 = 0,89332$).

ношении масс компонентов меньших, чем два, спектр в этих областях состоит из расположенных рядом резонансных провалов и максимумов, причем ширина провала линейно зависит от концентрации тяжелых атомов, а его глубина не зависит от концентрации и растет с ростом отношения масс атомов. По мере роста указанного отношения, начиная с двух, провалы последовательно превращаются в запрещенные зоны, ширины которых линейно зависят от концентрации тяжелых атомов. Найдены и проанализированы новые условия раскрытия таких запрещенных зон. В первую очередь можно отметить тот факт, что такие зоны с нулевой плотностью состояний не могут возникать внутри области спектра, отвечающей колебаниям идеальной цепочки, состоящей только из тяжелых атомов. Однако в такой области все же могут иметь место резонансные особенности на частотах, отвечающих

колебаниям коротких цепочек с закрепленными концами и состоящих из тяжелых атомов. Прослежено, как с ростом концентрации тяжелых атомов происходит переход от квазинепрерывной структуры с серией провалов к иерархической структуре локальных колебаний, которая имеет место при малых концентрациях легких атомов.

Несмотря на достаточно широкий объем информации, полученной в данной работе относительно структуры спектров линейных неупорядоченных цепочек, многие вопросы в этой области остаются еще открытыми. Это касается и вопросов физической интерпретации полученных результатов, в частности условий формирования запрещенных зон. Представляет интерес продолжить исследования в этой области в различных направлениях. Например, провести расчеты колебательных спектров в рамках других моделей неупорядоченных цепочек, рассмотреть электронные спектры цепочек и характер распространения по ним возбуждений. Данный подход позволяет, вообще говоря, рассмотреть и более сложные системы, в частности вызывающие в настоящее время большой интерес двумерные объекты.

В заключение мы хотели бы отметить, что большое внимание изучению самых различных аспектов физики неупорядоченных систем всегда уделял А.М. Косевич. Многочисленные обсуждения с ним таких вопросов всегда были для нас необычайно полезными и имели большое стимулирующее значение.

1. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **12**, 117 (1942).
2. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **17**, 1017 (1947).
3. И.М. Лифшиц, *УФН* **83**, 617 (1964).
4. А.М. Косевич, *Письма в ЖЭТФ* **1**, №5, 42 (1965).
5. I.M. Lifshits and A.M.Kosevich, *Rept. Prog. Phys.* **29**, 217 (1966).
6. А.М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов*, Наукова думка, Киев (1981).
7. А.М. Косевич, М.А. Иванов, Е.С. Сыркин, И.А. Господарев, Ю.В. Скрипник, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **19**, 434 (1993).
8. P. Dean, *Proc. Roy. Soc.* **A254**, 507 (1960).
9. P. Dean, *Proc. Roy. Soc.* **A260**, 263 (1961).
10. P. Dean, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 127 (1972).
11. И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1982).

12. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, В.С. Молодид, *ФНТ* **30**, 217 (2004).
13. М.А. Иванов, В.С. Молодид, Ю.В. Скрипник, *ФНТ* **30**, 1086 (2004).
14. М.А. Иванов, В.С. Молодид, Ю.В. Скрипник, *ФНТ* **32**, **887 (2006)**.
15. H. Matsuda, *Prog. Theor. Phys.* **31**, 161 (1964).
16. J. Hori, *Progr. Theor. Phys.* **31**, 940 (1964).

Vibrational spectrum structure of two-component disordered chain at arbitrary compositions

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

Using the Din method, the vibration spectrum of long disordered linear chains at arbitrary relations between concentrations of two components has been calculated and analyzed in detail within the isotopic approximation. Particular attention has been given to the case of light atoms predominance. It is shown that in the continuous spectrum region there appear large quantity of resonance peculiarities, which are responsible for by vibrational modes of short chains of light atoms with fixed ends. The width of the dips formed depends linearly on heavy atom concentration, while their depth is independent of concentration and defined by atom mass ratio. As this ratio increases, beginning with two, the dips transform into forbidden bands, the width of which depends linearly on heavy atom concentration too. New conditions of the opening of such zones have been found and analyzed. It is shown, that they cannot get inside the spectrum of heavy atom ideal chain. The step-by step transformation from the quasi-continuous spectrum structure with a series of peculiarities to the hierarchy structure of the local modes is traced.

PACS **63.22+m** Phonons or vibrational states in low-dimensional structures and nanoscale materials;
63.50.+x Vibrational states in disordered systems;
 63.20.Pw Localized modes.

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