

# Колебательный спектр в окрестности локальной моды в линейных цепочках с изотопическими примесями

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

*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 15 июля 2003 г., после переработки 8 сентября 2003 г.

Численно рассчитан колебательный спектр одномерной неупорядоченной цепочки с легкими изотопическими примесями замещения в окрестности частоты локального колебания изолированной примеси. Используются цепочки, состоящие из  $10^8$ – $10^9$  атомов, что соответствует макроскопическим образцам размером в несколько сантиметров. Получена сложная иерархическая структура спектра такой системы. Проведено сравнение результатов численных расчетов с простыми аналитическими выражениями. Показано, что сглаженную плотность состояний в узкой окрестности локальной моды с достаточной степенью точности можно получить из соображений, основанных на выделении ближайшего соседа к выбранному примесному атому. Оказалось, что полученное таким образом выражение для плотности состояний дает приемлемый результат не только вне, но и внутри области концентрационного уширения локальной моды.

Чисельно розраховано коливальний спектр одновимірного неупорядкованого ланцюжка з легкими ізотопічними домішками заміщення навколо частоти локального коливання ізольованої домішки. Використовано ланцюжки, які складаються з  $10^8$ – $10^9$  атомів, що відповідає макроскопічним зразкам розміром в декілька сантиметрів. Одержано складну ієрархічну структуру спектра такої системи. Проведено порівняння результатів чисельних розрахунків з простими аналітичними виразами. Показано, що згладжену щільність станів поблизу локальної моди з достатньою ступеню точності можна одержати з міркувань, що базуються на виділенні найближчого сусіда до вибраного домішкового атома. Виявилось, що отриманий таким чином вираз для щільності станів дає прийнятний результат не тільки зовні, але і в середині області концентраційного розширення локальної моди.

PACS: 63.22.+m

## 1. Введение

Определение колебательных спектров неупорядоченных систем является традиционным направлением физики конденсированного состояния. Большой интерес вызывают такие спектры при исследовании свойств кристаллов при низких температурах, где они определяют широкий круг наблюдаемых физических свойств. Задача о колебательном спектре неидеального кристалла сводится к решению системы уравнений, число которых равно произведению размерности на количество атомов системы. Поскольку трансляционная симметрия отсутствует и часто нет иных способов упрощения задачи, разрабатывались различные приближенные аналитиче-

ские и численные методы решения для наиболее физически важных моделей беспорядка.

Начиная с пионерских работ И.М. Лифшица [1,2], многие авторы предлагали различные аналитические методы определения структуры колебательного спектра неупорядоченных систем, зачастую основываясь на сравнительно простых модельных системах. Одной из таких широко используемых моделей является линейная цепочка с взаимодействием между ближайшими соседями и беспорядком замещения. Несмотря на свою простоту, она позволяет описывать многие свойства реальных физических объектов, таких как цепочечные кристаллы и даже некоторые оптически неоднородные среды [3,4]. Особенный интерес к неупорядо-

ченным системам с пониженной размерностью возник после открытия высокотемпературной сверхпроводимости.

Однако точное уравнение [5], из которого можно определить спектр такой цепочки, в общем случае не удобно для применения. Другие известные подходы к решению данной задачи зачастую предполагают, что присутствует какой-либо малый параметр, или же могут быть использованы только на определенных спектральных интервалах. В частности, широкий круг исследований был проведен в предположении, что имеется изолированный примесный центр или изолированный дефект типа пара примесей (см., например, [6,7]).

Весьма важным и полезным при анализе спектров неупорядоченных систем является численное моделирование. В частности, таким образом удается наряду с постановкой экспериментальных исследований проводить тестирование результатов, полученных аналитически. Еще в 60-е годы прошлого столетия Дином [8] были выполнены расчеты спектров неупорядоченных цепочек при достаточно высоких (0,1–0,5) концентрациях примесей. Несмотря на то что плотность колебательных состояний не удалось проанализировать детально, в его работах было показано, что высокочастотная часть спектра при наличии легкой изотопической примеси является сильно изрезанной. Было также установлено соответствие некоторых спектральных линий, расположенных вблизи локальной моды, простейшим кластерам примесных атомов. Кроме того, из-за невозможности рассчитывать цепочки достаточной длины не были рассмотрены случаи низкой концентрации примеси. Однако именно такой случай представляет особый интерес, поскольку, с одной стороны, даже весьма малые концентрации примесей в ряде случаев могут существенно повлиять на свойства кристаллов, а с другой стороны, как раз при низкой концентрации примесей, когда можно не учитывать косвенное взаимодействие между ними, и были получены некоторые аналитические результаты.

В настоящее время вычислительные средства позволяют рассматривать цепочки с числом атомов, соответствующим размеру образца порядка нескольких сантиметров и более. В результате удается исследовать структуру колебательного спектра значительно подробнее, уделяя более пристальное внимание различным спектральным интервалам, в том числе и при низкой концентрации примеси. Это, в свою очередь, может способствовать построению адекватного аналитического метода определения спектра.

Данная работа посвящена анализу колебательного спектра неупорядоченной цепочки вблизи ло-

кальной моды, вызванной наличием легких примесей замещения, и сравнению результатов численного эксперимента с некоторыми имеющимися для такой модельной системы аналитическими результатами.

## 2. Качественное описание спектра вблизи частоты локальной моды

Рассмотрим неупорядоченную цепочку, состоящую из двух типов атомов, взаимодействующих только с ближайшими соседями. Будем полагать, что наличие дефекта на одном из узлов данной цепочки приводит только к изменению массы данного атома, в то время как все остальные параметры системы остаются неизменными. Примеси будем считать распределенными случайно с некоторой концентрацией  $c$ , так что данная модель полностью соответствует приближению изотопической примеси замещения.

Уравнения движения такой цепочки с числом атомов  $N$  и закрепленными концами имеют вид

$$\beta_n u_{n-1} + (\alpha_n - \omega^2) u_n + \beta_{n+1} u_{n+1} = 0, \quad (1)$$

$$n = 1, 2, \dots, N, \quad u_1 = u_{N+1} = 0,$$

где  $\omega$  — частота колебания атомов,  $m_n$  — масса  $n$ -го атома,  $u_n = p_n \sqrt{m_n}$ ,  $p_n$  — смещение  $n$ -го атома относительно положения покоя,

$$\alpha_n = \frac{2\gamma}{m_n}, \quad \beta_n = -\frac{\gamma}{\sqrt{m_{n-1}m_n}}, \quad (2)$$

$\gamma$  — жесткость связи.

Хорошо известно, что в случае легкой примеси в одномерной системе существует локальная мода, лежащая выше максимальной частоты акустической зоны. Частота локальной моды определяется выражением

$$1 = \nu g_{00}, \quad (3)$$

где  $g_{00}$  — диагональный элемент функции Грина в узельном представлении,  $\nu$  — возмущение. В случае изотопического дефекта

$$\nu = \varepsilon \omega^2, \quad \varepsilon = \frac{m_0 - m_d}{m_0}, \quad (4)$$

где  $m_0$  и  $m_d$  — массы основного и примесного атомов соответственно,  $\varepsilon$  — дефект масс (для возникновения локальных колебаний необходимо, чтобы выполнялось условие  $m_d < m_0$ , так что в этом случае  $0 < \varepsilon < 1$ ). Решение уравнения (3) для одномерного случая имеет известный и простой вид  $\omega_L^2 = 1/(1 - \varepsilon^2)$ .

Взаимодействие между примесями приводит к расщеплению моды и возникновению тонкой струк-

туры спектра. Так, например, взаимодействие двух примесей приводит к расщеплению локальной моды на две, расстояние между частотами которых тем меньше, чем больше расстояние между дефектами. Частоты этих мод (соответственно симметричная и антисимметричная моды) в неявном виде определяются следующими уравнениями:

$$1 = \tau^2 g_{0R}^2, \quad \tau = \frac{v}{1 - v g_{00}}, \quad (5)$$

где  $R$  — расстояние между примесями в паре (в единицах межатомного расстояния). В рассматриваемом случае функция Грина  $g_{0R}$  имеет вид [9]

$$g_{0R} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{-ikR}}{\omega^2 - \omega_k^2} = \frac{(-1)^R \left( \sqrt{\omega^2} - \sqrt{\omega^2 - 1} \right)^{2R}}{\sqrt{\omega^2} \sqrt{\omega^2 - 1}}, \quad (6)$$

причем максимальная частота колебаний идеальной цепочки, состоящей только из атомов массой  $m_0$ , считается равной единице. Таким образом, частоты  $\omega_R$  парных мод для примесных атомов, расположенных на расстоянии  $R$ , можно определить из уравнения

$$\left( \frac{1}{\varepsilon} \sqrt{\frac{\omega_R^2 - 1}{\omega_R^2}} - 1 \right) \pm \left( \sqrt{\omega_R^2} - \sqrt{\omega_R^2 - 1} \right)^{2R} = 0. \quad (7)$$

В дальнейшем при получении аналитических выражений для плотности состояний в окрестности частоты локальной моды  $\omega_L$  нам потребуется приближенное решение уравнения (7) в этой области. При этом примеси в паре будут расположены достаточно далеко друг от друга, так что смещение парных мод по отношению к исходной частоте существенно меньше, чем расстояние от нее до края зоны. Раскладывая левую часть (7) вблизи частоты локальной моды, получаем, что частоты  $\omega_R$  таких парных мод расположены практически симметрично относительно  $\omega_L$  и находятся от нее на расстоянии [9]

$$\Delta(R) = \omega_R^2 - \omega_L^2 \approx \pm \left( \frac{1 - \varepsilon}{1 + \varepsilon} \right)^R \frac{2\varepsilon^2}{(1 - \varepsilon^2)^2}. \quad (8)$$

Иначе говоря, моды, отстоящие от локальной моды на величину  $\Delta$  ( $\Delta = \omega^2 - \omega_L^2$ ), соответствуют парам примесей, находящимся на расстоянии

$$R \equiv R(\Delta) = \ln \left( \Delta \frac{(1 - \varepsilon^2)^2}{2\varepsilon^2} \right) \left( \ln \frac{1 - \varepsilon}{1 + \varepsilon} \right)^{-1}. \quad (9)$$

Исходя из простых качественных соображений нетрудно определить число примесных мод, которые при малой концентрации дефектов попадают в некоторую окрестность квадрата частоты локально-

го колебания [10]. Моды, соответствующие паре примесей, расположенных на расстоянии большем, чем выбранное значение  $R$ , будут расщеплены на величину, не превышающую  $\Delta(R)$ . Вероятность того, что ближайшая примесь находится от некоторой выделенной примеси на расстоянии большем или равном  $R$ , составляет

$$P(R) = (1 - c)^{2(R-1)}. \quad (10)$$

В результате, подставляя (9) в (10) и пренебрегая дискретностью, получим, что искомое число мод  $N_\Delta$ , которые попадут в окрестность квадрата частоты локального колебания с полушириной  $\Delta$ , равно

$$N_\Delta = NcP(R(\Delta)) = Nc \left( \frac{\Delta(1 - \varepsilon^2)^2}{2\varepsilon^2} \right)^q, \quad (11)$$

где

$$q = \frac{2 \ln(1 - c)}{\ln \frac{1 - \varepsilon}{1 + \varepsilon}}.$$

Выражение для усредненной по некоторому интервалу частот (сглаженной) плотности состояний  $\rho(\Delta)$  может быть получено путем дифференцирования выражения (11) по квадрату частоты:

$$\rho(\Delta) = c^2 \left( \frac{\Delta(1 - \varepsilon^2)^2}{2\varepsilon^2} \right)^q \left( \left| \Delta \right| \left| \ln \frac{1 - \varepsilon}{1 + \varepsilon} \right| \right)^{-1}. \quad (12)$$

Формула, подобная (12), но для электронной задачи, была получена Лифшицем [11].

Следует отметить, что выражения (11) и (12), по сути, получены из анализа структуры парных мод спектра. Поскольку при малой концентрации примесей спектр частот над исходной акустической зоной, за исключением весьма узкой окрестности локальной моды, формируется, в основном, именно из парных примесных мод, то его приближенное описание монотонной функцией (12) корректно только при условии, что в область усреднения попадает хотя бы несколько из них. Иначе говоря, выражение (12) оказывается справедливым в случае, когда относительное изменение плотности состояний на интервале дискретности, связанном с парными модами, является малым, т.е. выполняется условие

$$\frac{1}{\rho(\Delta)} \frac{\partial \rho(\Delta)}{\partial R} \ll 1. \quad (13)$$

Учитывая зависимость  $\rho(\Delta)$ , которая описывается выражением (12), а также связь величины  $\Delta$  с  $R$ , т.е. с дискретностью парных мод согласно (8), получим, что при малых концентрациях примесей критерий (13) принимает следующий вид:

$$-\ln \frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon} \ll 1. \quad (14)$$

Таким образом, выражение для сглаженной плотности состояний (12) (и подобные ему) могут быть в той или иной степени использованы для описания плотности состояний лишь в случае локальных мод, расположенных вблизи края основной зоны.

Отметим также, что ранее в ряде работ [14–18] из анализа сходимости рядов, описывающих разложение по комплексам взаимодействующих примесных центров, вблизи локального колебания выделялась область концентрационного уширения  $\Delta_c$ , т.е. частотный интервал  $(\omega_L^2 \mp \Delta_c)$ , внутри которого спектр не удастся описывать при помощи указанных кластерных разложений. Величина  $\Delta_c$  определяется взаимодействием примесей на средних расстояниях, т.е.

$$\Delta_c = \Delta(\chi R_c), \quad (15)$$

где  $R_c = 1/c$  — среднее расстояние между примесями,  $\chi$  — численный коэффициент, который при оценках будем считать равным 0,5. Ниже при проведении сравнения аналитических и численных расчетов будем использовать величину  $\Delta_c$  для анализа областей применимости различных подходов.

### 3. Численные результаты

Точный численный расчет спектра неупорядоченного кристалла макроскопических размеров (даже для одномерного случая) связан со значительным объемом вычислений. Число операций, необходимое для определения всех собственных частот колебаний линейной цепочки, пропорционально  $N^2/2$ . Оптимизировать вычисление спектра позволяет теорема об отрицательных собственных значениях, доказанная Дином [8,12,13].

Согласно этой теореме, количество собственных частот, лежащих в интервале  $(0, \omega)$ , для выбранной выше модельной системы с взаимодействием только между ближайшими соседями равно количеству отрицательных членов в последовательности величин  $g_i(\omega^2)$ , определяемых рекуррентной формулой

$$g_i(\omega^2) = (\alpha_i - \omega^2) - \beta_i^2 \frac{1}{g_{i-1}(\omega^2)}, \quad (16)$$

где величины  $\alpha_i$  и  $\beta_i$  являются скалярами и определены в выражении (2), а индекс  $i$  пробегает по всем атомам цепочки. Таким образом, количество операций, необходимое для определения числа мод, лежащих в интервале  $(0, \omega)$ , пропорционально  $N$ .

На рис. 1 приведена структура спектра вблизи локальной моды для изотопической примеси с

$m = 1/2$  на различных спектральных интервалах. На рис. 1,а показано расположение локальной моды относительно края зоны ( $\omega^2 = 1$ ), а на рис. 1,б и в за нуль принята частота колебаний изолированной примеси. Положение основных уровней, которые представлены на этом рисунке, с большой точностью совпадают с решениями, полученными с помощью выражения (7) для изолированных пар примесей, в том числе для уровней, наиболее удаленных от невозмущенной локальной моды.

Следует отметить, что переход к более подробному масштабу вблизи локальной частоты не меняет общего вида спектра. Такая ситуация аналогична наблюдаемой для фрактальных структур. Следует также отметить, что в данном случае, в отличие от трехмерного, интенсивность центрального пика всегда, даже в очень близкой окрестности локальной моды изолированного изотопа, намного превышает интенсивность боковых пиков, несмотря на уменьшение шага гистограммы. При этом плотность состояний монотонно увеличивается при приближении к частоте локальной моды.

Оценим длину цепочки, достаточную для адекватного описания спектра выше исходной акустической зоны. При увеличении длины цепочки всегда будут появляться новые моды, привнося с собой новые нюансы в тонкую структуру спектра. Строго говоря, любой спектр цепочки конечной длины уни-

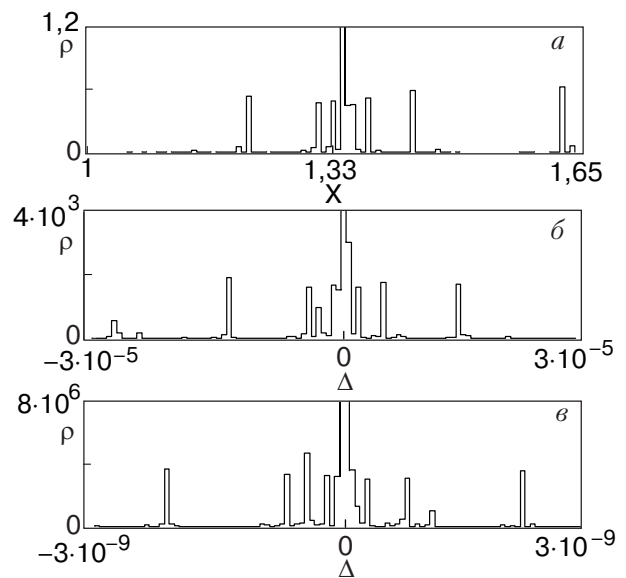


Рис. 1. Структура колебательного спектра вблизи локального уровня при разных масштабах шкалы частот. Концентрация  $c = 1/20$ ;  $\varepsilon = 0,5$ ; длина цепочки  $N = 10^8$ . По оси ординат отложена плотность состояний, нормированная на единицу, по оси абсцисс — квадраты частот. На рис. 1,а на оси  $X$  показаны истинные значения квадратов частот (1 — край частоты невозмущенного спектра); на рис. 1,б и в — значения отложены от частоты локального уровня.

кален и в точности не соответствует спектру бесконечной системы. Выше отмечалось, что при низкой концентрации примесей спектр над акустической зоной цепочки, состоящей из тяжелых атомов, в основном составляют парные примесные моды. Вероятность образования пары для близко расположенных примесей пропорциональна квадрату концентрации, следовательно, длина цепочки должна быть такой, чтобы неравенство

$$c^2 N \gg 1 \quad (17)$$

выполнялось с весьма значительным превышением. В дальнейшем будет показано, что требования к длине цепочки становятся более сильными для ближайшей окрестности локального колебания, где необходимо учитывать широко разнесенные пары дефектов.

На рис. 2 показано, как зависит спектр от длины цепочки при массе примеси  $m_d = 0,9$  и концентрации  $c = 0,01$ . Как видно на рис. 2,а, цепочки длиной  $10^4$  атомов недостаточно даже для выявления всех парных мод. При числе атомов порядка  $10^6$  (рис. 2,б) присутствуют все парные моды, но их спектральные веса меняются для различных реализаций цепочки и содержат существенную шумовую составляющую. Только для цепочек порядка  $10^7$  и более атомов (рис. 2,в) общий вид спектра перестает зависеть от длины цепочки и становится подобным спектру бесконечно длинной цепочки.

В данной работе численные расчеты проводили для цепочек, состоящих из  $10^8 - 10^9$  атомов, что соот-

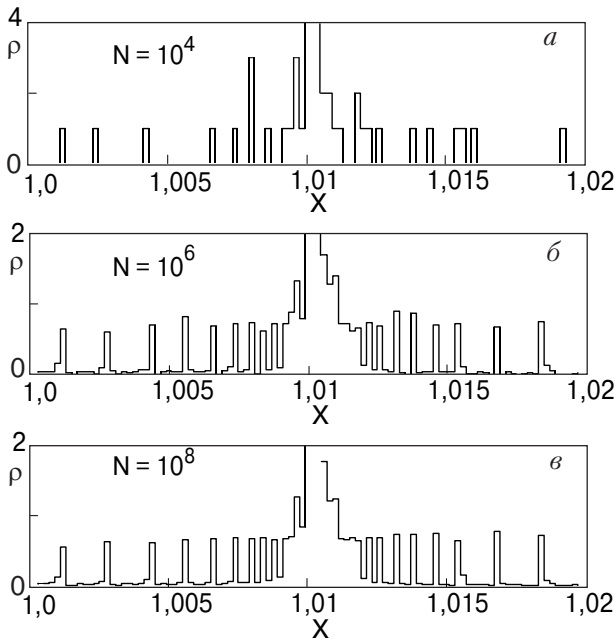


Рис. 2. Структура колебательного спектра вблизи локального уровня при различных значениях числа атомов в цепочке  $N$ ;  $c = 1/100$ ;  $\varepsilon = 0,5$ . По оси  $X$  отложены истинные значения квадратов частот.

ветствует объектам длиной в несколько сантиметров. Это позволяет получать статистически достоверные и повторяющиеся результаты, передающие основные особенности спектра над исходной акустической зоной, при концентрациях примеси выше  $10^{-3}$ .

На рис. 3 при двух значениях массы примеси представлены полученные численно зависимости числа мод (нормированные на  $cN$ ), которые попали в  $\Delta$ -окрестность локального колебания, от концентрации примесей при различных значениях  $\Delta$  (сплошные линии). Неравномерный ход кривых при концентрации  $10^{-4}$  и ниже обусловлен ограниченным размером генерируемой цепочки. Пунктирной линией показаны кривые, следующие из выражения (11). Крестиками на кривых отмечены значения концентраций, при которых величина  $\Delta_c$  совпадает с заданным значением интервала  $\Delta$  (слева расположена область концентраций, где  $\Delta_c < \Delta$ ).

Наилучшее согласие аналитических и численных результатов наблюдается при относительно низкой концентрации примеси, когда  $\Delta_c$  меньше или порядка  $\Delta$ . Однако, как видно на рис. 3, хорошее согласие

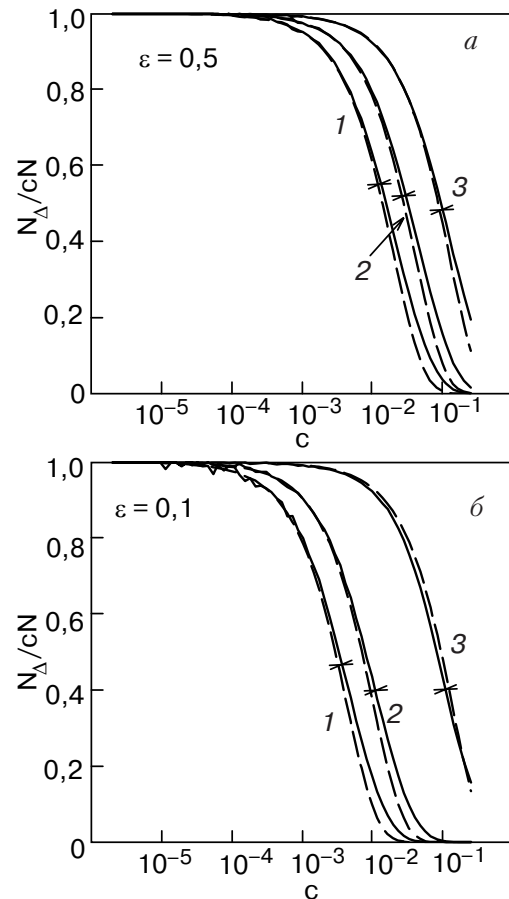


Рис. 3. Зависимость от концентрации примеси числа уровней, попавших в  $\Delta$ -окрестность локального уровня ( $x_L - \Delta, x_L + \Delta$ ), при  $\Delta = 10^{-12}$  (1);  $10^{-6}$  (2);  $10^{-2}$  (3). Пунктир — расчет по (11).  $N = 10^8$ .

отмечается и в области, где  $\Delta_c > \Delta$ , причем с увеличением значений  $\Delta$  соответствие двух результатов распространяется на более высокие концентрации. Таким образом, для одномерной цепочки результаты, полученные при помощи выделения ближайшей пары, оказываются справедливыми в более узкой окрестности локального колебания, чем его концентрационное уширение.

На рис. 4 видно хорошее совпадение сглаженной плотности состояний (12) с рассчитанной при дефекте масс, удовлетворяющем (13). На рис. 4, а, б и в соответственно приведены спектры внутри, вблизи границы и вне области концентрационного уширения. При этом были выбраны малые значения дефекта масс ( $\varepsilon \approx 0,01$ ), поскольку они дают возможность более подробно проанализировать тонкую структуру спектра вблизи локальной моды и благодаря этому провести более детальное сопоставление численных и аналитических результатов.

Полученные численные результаты показывают, что плотность состояний всегда увеличивается по мере приближения к частоте локального колебания. Однако, согласно (12), такой рост должен иметь место только при выполнении условия

$$q < 1. \quad (18)$$

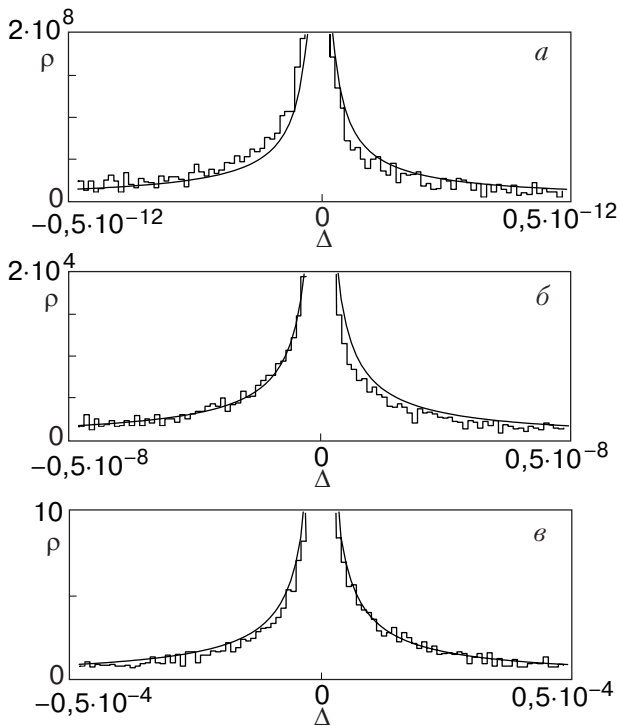


Рис. 4. Сравнение сглаженного спектра, описываемого выражением (12), с численно рассчитанным спектром (при  $N = 5 \cdot 10^8$  и  $\varepsilon = 0,01$ ;  $c = 10^{-3}$ ) внутри (а), вблизи (б) и вне (в) концентрационного уширения.

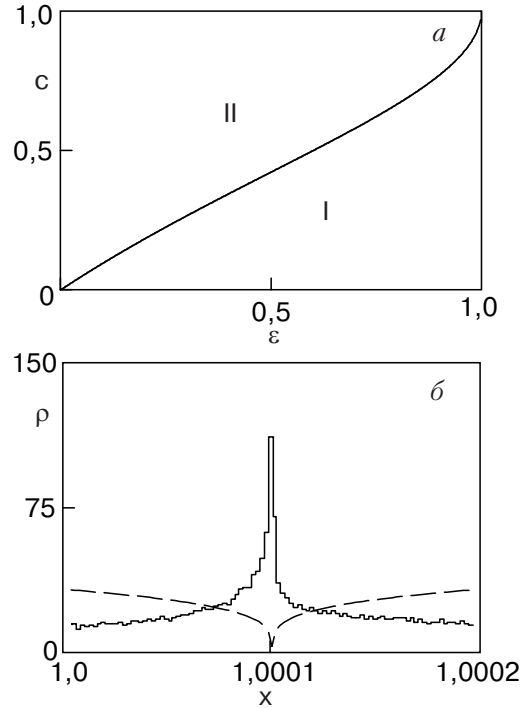


Рис. 5. а — Диаграмма, определяющая области роста (I) и падения (II) плотности состояний (согласно выражению (12)). б — Поведение плотности состояний вблизи локального уровня при  $c > \varepsilon$  ( $c = 1/80$ ,  $\varepsilon = 0,01$ ). Пунктирная кривая — аналитический расчет (12), сплошная линия — результаты численного расчета при  $N = 10^8$ .

На рис. 5, а показана область, в которой выполняется условие (18). Линия, ограничивающая ее, может быть приблизительно описана зависимостью  $c \approx \varepsilon$ . Расчет для случая  $c > \varepsilon$ , приведенный на рис. 5, б, показывает, что плотность состояний все равно возрастает с приближением к частоте локальной моды. Этот факт объясняется перестройкой спектра, начинающейся при  $c \approx \varepsilon$ , так что выражение (12) перестает быть справедливым.

#### 4. Модифицированное разложение по концентрациям

Прямое разложение термодинамических величин в неупорядоченных системах по концентрации примеси было предложено Лифшицем [11,14]. С учетом слагаемых, отвечающих только парам, и пренебрегая вкладом кластеров, содержащих три и более примесей, это разложение можно записать для плотности колебательных состояний:

$$\rho(\omega^2) = c\delta(\omega^2 - \omega_L^2) + c^2 \sum_R \left[ \delta(\omega^2 - (\omega_R^l)^2) + \delta(\omega^2 - (\omega_R^r)^2) - 2\delta(\omega^2 - \omega_L^2) \right] + \dots, \quad (19)$$

где  $\omega_L^l$  и  $\omega_R^r$  — частоты парных мод, находящихся слева и справа от частоты локальной моды. Это разложение эквивалентно так называемому неперенормированному кластерному разложению [15] и справедливо вне области концентрационного уширения.

Если ограничиться только приведенными слагаемыми, то плотность колебательных состояний будет иметь вид некоторой «универсальной» функции частоты, определяемой положением парных мод, которая изменяется пропорционально  $c^2$  при изменении концентрации примесей. В случае, когда локальное колебание расположено близко к краю зоны, можно, как и выше, ввести сглаженную плотность состояний, если в формуле (19) заменить суммирование на интегрирование:

$$\rho_c(\omega^2) = \frac{c^2}{\left| \omega_L^2 - \omega^2 \right| \left| \ln \frac{1 - \varepsilon}{1 + \varepsilon} \right|}. \quad (20)$$

На рис. 6 приведено сравнение величин  $\rho(\omega^2)/c^2$ , полученных спомощью выражений (20) и (12). Видно, что они существенно отличаются друг от друга внутри области концентрационного уширения на том частотном интервале, где выражение (12) еще достаточно хорошо согласуется с результатами

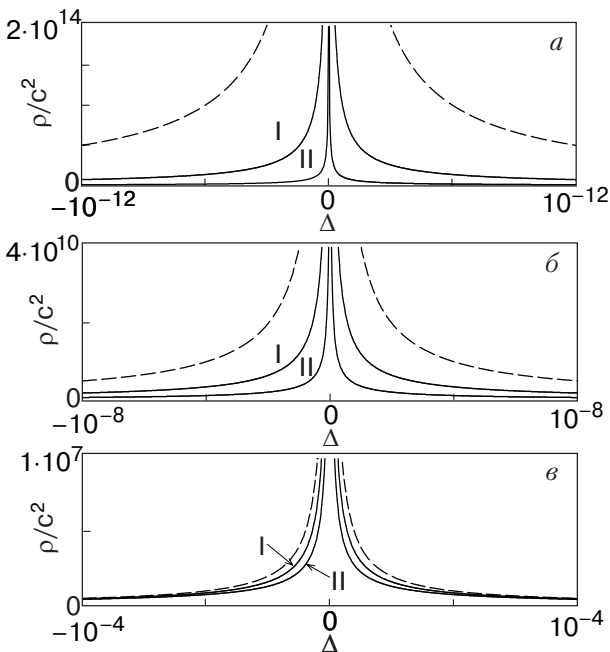


Рис. 6. Сравнение аналитических выражений для плотности состояний в окрестности локального уровня, нормированных на  $c^2$ . Пунктирная линия — не зависящее от концентрации выражение, следующее из (20); сплошные линии — согласно (12): для  $c = 1/1000$  (I) и  $c = 1/500$  (II) ( $a$ – $c$  соответствуют разным значениям масштаба области вблизи локального уровня),  $\varepsilon = 0,01$ .

численного эксперимента. Представляло бы интерес внести такие изменения в выражение (19), чтобы результаты, полученные на его основе, соответствовали численному эксперименту на более широком интервале частот.

Для получения лучшего согласия численных и аналитических результатов, а также для нахождения некоторого интерполяционного выражения для усредненной плотности состояний, будем выбирать весовой множитель при парной моде не в виде  $c^2$ , как это сделано в (19), а в следующем более точном приближении, учитывающем комбинаторику заполнения узлов примесями, приводящими к появлению той или иной парной моды:

$$p(R) = c^2(1 - c)^{\gamma R}, \quad (21)$$

где  $\gamma$  — некоторый численный коэффициент. В дальнейшем будем считать этот коэффициент функцией от  $R$  и, кроме того, различным для парных мод спектра, имеющих большую или меньшую частоту по сравнению с изолированной локальной модой. Таким образом, вместо разложения (19) получим

$$\rho(\omega^2) = c\delta(\omega^2 - \omega_L^2) + c^2 \sum_R \left[ (1 - c)^{\gamma^l(R)R} \times \delta\left(\omega^2 - (\omega_R^l)^2\right) + (1 - c)^{\gamma^r(R)R} \delta\left(\omega^2 - (\omega_R^r)^2\right) + \dots \right] \quad (22)$$

где  $\gamma^l(R)$  и  $\gamma^r(R)$  — указанные численные коэффициенты для парных мод, находящихся слева и справа от частоты локальной моды.

Следует ожидать, что в области спектра, достаточно далекой от локального колебания, вследствие экспоненциально быстрого спада взаимодействия между примесями, коэффициент  $\gamma^{l,r}(R)$  должен быть равным трем, что отвечает простейшему требованию, чтобы ближайший к рассматриваемой паре примесный атом находился на расстоянии большем, чем между примесными атомами в этой паре. Таким образом, условие  $\gamma^{l,r}(R) = 3$ , скорее всего, должно выполняться для примесных мод, отвечающих относительно малым (но все-таки достаточно далеким по сравнению с межатомным) расстояниям между примесями. С другой стороны, интересно отметить, что при  $\gamma^{l,r}(R) = 2$  усреднение выражения (22) по интервалу частот, отвечающему нескольким парным уровням, приводит для сглаженной плотности состояний к выражению, которое в точности совпадает с (12). Поскольку последнее выражение получено исходя из анализа плотности состояний вблизи центрального пика, хотя соответствующие эвристические рассуждения также соответствуют выделе-

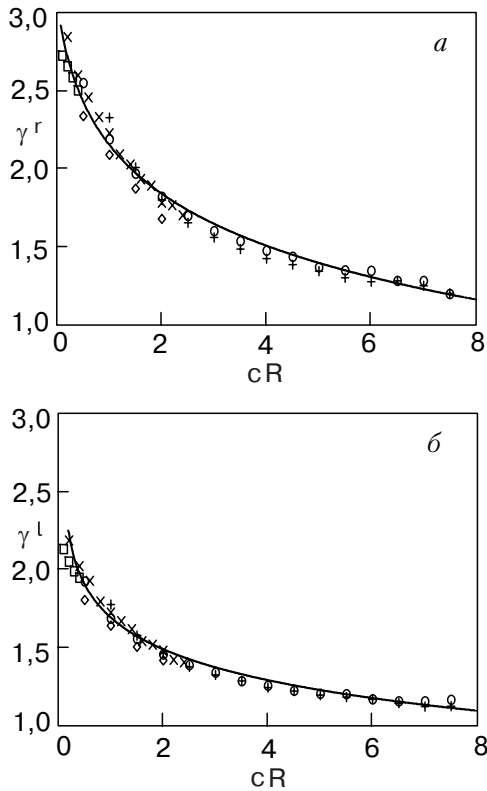


Рис. 7. Зависимость показателя степени  $\gamma^{l,r}(R)$  от расстояния между примесями в паре (на оси отложена величина  $cR = R/R_c$ ) при разных значениях дефекта масс и концентрации:  $\varepsilon = 0,6, c = 1/20$  ( $\diamond$ );  $\varepsilon = 0,6, c = 1/100$  ( $\square$ );  $\varepsilon = 0,9, c = 1/20$  ( $\circ$ );  $\varepsilon = 0,95, c = 1/100$  ( $\times$ );  $\varepsilon = 0,95, c = 1/20$  ( $+$ ).

нию пар примесных атомов, можно ожидать, что значение  $\gamma^{l,r}(R) = 2$  будет отвечать примесям, расположенным на значительно больших расстояниях друг от друга (и, следовательно, области спектра более близкой к центральному пику).

Для определения зависимостей  $\gamma^{l,r}(R)$  проведено усреднение численных результатов, как и выражения (22), по интервалу большему, чем расстояние между последовательными парными модами. Полученные  $\gamma^{l,r}(R)$  для различных значений концентрации и дефекта массы показаны на рис. 7. Как видно, параметр  $\gamma^{l,r}(R)$  не зависит от дефекта масс и концентрации примесей, если за единицу расстояния выбрать среднее расстояние между примесными центрами  $R_c = 1/c$ , и монотонно убывает с возрастанием  $R$ . Зависимости, полученные для парных мод, которые расположены слева и справа от частоты локального колебания, т.е.  $\gamma^l(R)$  и  $\gamma^r(R)$ , несколько отличаются друг от друга. Как и ожидалось, значение коэффициента  $\gamma^r(R)$  приближается к трем при малых значениях  $R$  и приблизительно равно двум при  $R = R_c = 1/c$ . Анализ рассчитанного спектра слева от локальной моды (между краем зоны и ее час-

тотой) показывает, что значения  $\gamma^l(R)$  оказываются несколько меньшими (приблизительно от 1,2 до 2,3), однако общий характер зависимости от  $R$  не меняется.

Таким образом, если учесть зависимость  $\gamma^{l,r}(R)$ , можно, в частности, получить более точное интерполяционное выражение для плотности состояний, чем выражение (19). Внутри зоны концентрационного уширения, когда  $R \gg R_c$ , коэффициент  $\gamma^{l,r}(R)$  оказывается меньше двух. В этой области ни разложение (19), ни интерполяционное выражение (22), вообще говоря, неприменимы. Однако такие значения  $\gamma^{l,r}(R)$  формально обеспечивают согласие между (22) и рассчитанным спектром.

### 5. Заключение

В настоящей работе проведен расчет колебательных спектров неупорядоченных линейных цепочек с числом атомов, которое соответствует образцам макроскопического размера. Основное внимание уделено детальному рассмотрению структуры спектра вблизи частоты локального колебания изолированной примеси и сравнению полученных численных результатов с некоторыми простыми аналитическими выражениями.

Сравнение показало, что сглаженную плотность состояний в узкой окрестности локальной моды с достаточной степенью точности можно получить из соображений, основанных на выделении ближайшего соседа к выбранному примесному центру. Оказалось, что полученное таким образом выражение для плотности состояний дает приемлемый результат в том числе и внутри области концентрационного уширения локальной моды.

При концентрации примесей намного меньшей, чем дефект масс  $\varepsilon$ , основной вклад в спектральную плотность дают парные примесные моды. При этом для того, чтобы описать плотность состояний на границе области концентрационного размытия и в несколько более близкой окрестности локальной моды, необходимо приписывать вкладам от пар дефектов дополнительные, по отношению к прямому разложению по концентрациям, весовые множители, зависящие от концентрации.

В дальнейшем представляется интересным продолжить численные исследования колебательных спектров длинных неупорядоченных линейных цепочек. В частности, изучить фрактальную иерархическую структуру локального уровня, а также спектр внутри непрерывной зоны как для легких, так и тяжелых примесей замещения. С помощью этого метода можно рассмотреть аналогичную задачу при наличии двухпараметрического примесного центра, а также ввести изменяющуюся для различ-



ных атомов связь с неподвижной подложкой, что может быть применено для описания колебаний атомов на поверхности кристалла. При дальнейшем увеличении вычислительных мощностей данный численный метод может быть использован для анализа двух- и трехмерных систем.

1. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **12**, 117 (1942).
2. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **17**, 1017 (1947).
3. J.M. Bendickson, J.P. Dowling, and M. Scalora, *Phys. Rev.* **E53**, 4107 (1996).
4. Q. Li, C.T. Chan, K.M. Ho, and C.M. Soukoulis, *Phys. Rev.* **B53**, 15577 (1996).
5. F.J. Dyson, *Phys. Rev.* **92**, 133 (1953).
6. М.А. Мамалуй, Е.С. Сыркин, С.Б. Федосьев, *ФТТ* **38**, 3683 (1996).
7. М.А. Мамалуй, Е.С. Сыркин, С.Б. Федосьев, *ФНТ* **25**, 976 (1999).
8. P. Dean, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 127 (1972).
9. A.A. Maradudin, E.W. Montroll, and G.H. Weiss, *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, Academic Press, New York—London (1963).
10. E.W. Montroll, A.A. Maradudin, and G.H. Weiss, *Proceedings of the Stevens Institute Many Body Conference*, Interscience (1964).
11. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **44**, 1723 (1963).
12. P. Dean, *Proc. Roy. Soc.* **A254**, 507 (1960).
13. P. Dean, *Proc. Roy. Soc.* **A260**, 263 (1961).
14. И.М. Лифшиц, *УФН* **83**, 617 (1964).
15. М.Н. Ботвинко, М.А. Иванов, Ю.Г. Погорелов, *ЖЭТФ* **70**, 610 (1976).

16. И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1982).
17. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, *ФТТ* **32**, 2965 (1990).
18. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, *ФТТ* **34**, 351 (1992).

#### The vibrational spectrum in the vicinity of a local mode in linear chains with isotope impurities

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

The vibrational spectrum of a one-dimensional disordered chain with light substitutional isotope impurities was calculated numerically in the vicinity of the local mode of an isolated impurity. In the calculations the chains of  $10^8$ – $10^9$  atoms were used, which corresponded to macroscopic samples of several centimeters. A complex hierarchical structure of the spectrum for the system under consideration was obtained. The numerical data are compared with simple analytical expressions. It is shown that the smoothed density of states in a narrow region of the local mode may be derived rather accurately from the considerations which are based on the separation of the nearest-to-chosen impurity atom neighbour. It turned out that the expression for the density of states thus obtained gave a result which was quite reasonable not only outside but also inside the region of concentration broadening of the local mode.