

# Влияние локальных дефектов на колебательные характеристики полубесконечных и бесконечных одномерных структур в периодическом внешнем поле

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: mamalui@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 14 августа 1998 г.

Методом якобиевых матриц получены точные аналитические выражения для функций Грина цепочечных структур с дефектами, находящихся во внешнем периодическом поле. Рассмотрены двухатомная примесная молекула в одноатомной цепочке и адсорбированные цепочки с одно- и двухатомной элементарной ячейкой. Исследованы условия возникновения и характеристики локальных и щелевых колебаний. Изучена эволюция пороговых значений дефекта массы для образования локализованных колебаний двумя изотопическими примесями с изменением расстояния между ними.

Методом якобиевих матриць одержано точні аналітичні вирази для функцій Гріна ланцюжкових структур з дефектами, що знаходяться в зовнішньому періодичному полі. Розглянуто двохатомну домішкову молекулу в одноатомному ланцюжку та адсорбовані ланцюжки з одно- та двохатомною елементарною коміркою. Досліджено умови виникнення та характеристики локальних та щілинних коливань. Вивчено еволюцію порогових значень дефекту маси для утворення локалізованих коливань двома ізотопічними домішками при зміні відстані між ними.

PACS: 61.72.-y, 63.20.-e

Интерес к исследованию динамических характеристик низкоразмерных и квазинизкоразмерных структур с дефектами вызван, с одной стороны, достигнутыми в последнее время существенными успехами в синтезе таких соединений и их применении в современных высоких технологиях, а с другой стороны, любопытными физическими особенностями данных соединений. Хорошо известно, что условия образования и свойства связанных состояний в системах с дефектами качественно зависят как от размерности системы, так и от размерности дефекта. В работе [1] нами сформулирован общий критерий получения точных решений (на основе метода якобиевых матриц [2–4]) для колебательных характеристик линейных одномерных систем с дефектами. Настоящее сообщение посвящено изучению изменений, происходящих в фоновом спектре таких систем при наличии различных дефектов, а также в периодическом внешнем поле. Внешнее (для цепочки) периодическое поле

устраняет характерную для одномерных решеток расходимость среднеквадратичных смещений, и рассматриваемая точно решаемая задача может быть непосредственно применена к реальным объектам. Исследованы модели одно- и двухатомных цепочек, содержащих как примеси, отличающиеся от атомов матрицы массой и силовыми постоянными взаимодействия с ближайшими соседями, так и примесные кластеры, обладающие внутренней структурой, например двухатомная примесная молекула в одноатомной цепочке. Рассмотрение проведено для бесконечной и полубесконечной цепочек.

## 1. Двухатомная примесная молекула в одноатомной линейной цепочке, находящейся в периодическом внешнем поле

Рассмотрим находящуюся в периодическом внешнем поле одномерную одноатомную решетку с дефектом, представляющим собой два примес-

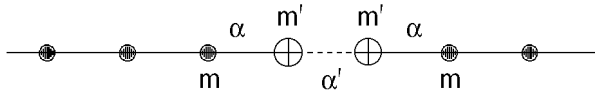


Рис. 1. Схематическое изображение модели двухатомной примесной молекулы в одноатомной цепочке.

ных атома с массами  $m'$ , постоянная связи  $\alpha'$  между которыми отличается от постоянной связи  $\alpha$  между атомами матрицы, массы которых обозначим через  $m$  (рис. 1).

Из симметрии задачи очевидно, что в данном случае существует два типа независимых колебаний атомов цепочки, к первому из которых принадлежат колебания изотопов в противофазе, а ко второму — их синфазные колебания. Спектральные характеристики этих двух типов колебаний в дальнейшем будут иметь индекс (-) либо (+) соответственно. В терминах метода  $\mathcal{J}$ -матриц это означает, что все пространство смещений атомов решетки  $H$  представляется прямой суммой подпространств  $H = H^{(-)} + H^{(+)}$ , каждое из которых порождается (+)- или (-)-смещением атомов дефекта.

Следует отметить, что при таком разделении (-)-колебания «чувствуют» искажение как связи, так и массы, в то время как (+) — только дефект массы.

Для идеальной цепочки, находящейся во внешнем поле, динамический оператор системы  $\hat{L}$ , определяемый как

$$\hat{\Lambda}(n, n') = \frac{\eta(\lambda_m - \lambda_0) - 2\varepsilon(\lambda_m + \lambda_0)}{4(\varepsilon + 1)} (\delta_{n,1} \delta_{n',1} + \delta_{n,-1} \delta_{n',-1}) - \frac{\lambda_m - \lambda_0}{4} \left( \frac{\eta - \varepsilon}{\varepsilon + 1} \right) (\delta_{n,1} \delta_{n',-1} + \delta_{n,-1} \delta_{n',1}) - \frac{\lambda_m - \lambda_0}{4} \left( \frac{1}{\sqrt{\varepsilon + 1}} - 1 \right) (\delta_{n,1} \delta_{n',2} + \delta_{n,2} \delta_{n',1} + \delta_{n,-1} \delta_{n',-2} + \delta_{n,-2} \delta_{n',-1}), \quad (2)$$

где  $\eta \equiv (\alpha' - \alpha)/\alpha$ ;  $\varepsilon \equiv (m' - m)/m$  — безразмерные параметры, описывающие локальное изменение связи и массы. Тогда в подпространствах  $H^{(+)}$  и  $H^{(-)}$  оператор  $\hat{L}$  представляется в виде  $\mathcal{J}$ -матриц с элементами

$$a_0^{(-)}(\eta, \varepsilon) = \frac{(\lambda_m - \lambda_0)(2\eta + 3) + 4\lambda_0}{4(\varepsilon + 1)}; \quad b_0^{(-)}(\eta, \varepsilon) = \frac{\lambda_m - \lambda_0}{4\sqrt{\varepsilon + 1}};$$

$$a_0^{(+)}(\varepsilon) = \frac{\lambda_m + 3\lambda_0}{4(\varepsilon + 1)}; \quad b_0^{(+)}(\varepsilon) = \frac{\lambda_m - \lambda_0}{4\sqrt{\varepsilon + 1}}; \quad (3)$$

$$a_{n>0}^{(-)} = a_{n>0}^{(+)} = \frac{\lambda_m + \lambda_0}{2}; \quad b_{n>0}^{(-)} = b_{n>0}^{(+)} = \frac{\lambda_m - \lambda_0}{4};$$

$$\hat{L}(n, n') = \frac{\alpha(n, n')}{\sqrt{m_n m_{n'}}},$$

где  $\alpha(n, n')$  — силовая константа, которая описывает взаимодействие между атомами, находящимися в узлах  $n$  и  $n'$ , а  $m_n$  и  $m_{n'}$  — массы этих атомов, может быть записан в виде

$$\hat{L}(n, n') = \begin{cases} \frac{\lambda_m + \lambda_0}{2}, & |n - n'| = 0, \\ -\frac{\lambda_m - \lambda_0}{4}, & |n - n'| = 1, \\ 0, & |n - n'| > 1, \end{cases} \quad (1)$$

где  $(\lambda_m - \lambda_0)/4 = \alpha/m$ ;  $n, n' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  Здесь  $\lambda_0$  — квадрат «активационной частоты», обусловленной внешним периодическим полем;  $\lambda_m$  — квадрат максимальной частоты колебаний цепочки. Таким образом, собственные значения  $\hat{L}$  оператора принадлежат интервалу  $[\lambda_0, \lambda_m]$ , благодаря чему и снимается расходямость среднеквадратичных смещений. Параметр  $\lambda_0$  может возникать естественным образом. Так, при рассмотрении скалярной модели простой кубической решетки с учетом взаимодействия ближайших соседей  $\lambda_0 = (2\alpha/m)(2 - \cos k_x - \cos k_y)$ , где  $k_x, k_y$  — компоненты двумерного волнового вектора в плоскости  $(x, y)$ .

Данный дефект приводит к тому, что колебания решетки описываются оператором  $\hat{L} + \Lambda$ , где оператор возмущения  $\Lambda$  равен

где  $a_n^{(\pm)}$  — диагональные,  $b_n^{(\pm)}$  — недиагональные элементы  $\mathcal{J}$ -матрицы операторов  $\hat{\mathcal{L}}^{(\pm)}$ ;  $n = 1, 2, \dots$ . Функция Грина (т.е. первый диагональный элемент оператора  $\hat{\mathcal{G}} = (\lambda \hat{I} - \hat{\mathcal{L}})^{-1}$ , где  $\lambda$  — квадрат частоты) может быть представлена в виде [3,4]

$$\mathcal{G}_{00}(\lambda) = \frac{Q_{n+1}(\lambda) - b_n Q_n(\lambda) K_\infty(\lambda)}{P_{n+1}(\lambda) - b_n P_n(\lambda) K_\infty(\lambda)}, \quad (4)$$

где  $K_\infty(\lambda)$  — непрерывная (цепная) дробь, все элементы которой равны своим предельным значениям  $a \equiv a_n = (\lambda_m + \lambda_0)/2$ ;  $b \equiv b_n = (\lambda_m - \lambda_0)/4$  (см. (3) при  $n \geq 1$ ). Функция  $K_\infty(\lambda)$  может быть представлена в виде

$$K_\infty(\lambda) = \frac{8}{(\lambda_m - \lambda_0)^2} \times \left[ \lambda - \frac{\lambda_m + \lambda_0}{2} + \sqrt{[(\lambda - \lambda_0)(\lambda - \lambda_m)]} \right]. \quad (5)$$

$P_n(\lambda, \eta, \varepsilon)$  — полиномы  $n$ -й степени по  $\lambda$ , вычисленные по элементам  $\mathcal{J}$ -матрицы оператора  $\hat{\mathcal{L}}$  (величинам  $a_n(\eta, \varepsilon)$  и  $b_n(\eta, \varepsilon)$ ) с помощью рекуррентной формулы

$$b_n(\eta, \varepsilon) P_{n+1}(\lambda, \eta, \varepsilon) = [\lambda - a_n(\eta, \varepsilon)] P_n(\lambda, \eta, \varepsilon) - b_{n-1}(\eta, \varepsilon) P_{n-1}(\lambda, \eta, \varepsilon) \quad (6)$$

с начальными условиями  $P_{-1} = 0$ ,  $P_0 = 1$ . Полиномы  $Q_n(\lambda)$  определяются тем же соотношением (6) при начальных условиях  $Q_0 = 0$ ,  $Q_1 = 1/b_0$ .

Поэтому для циклических подпространств  $H^{(-)}$  и  $H^{(+)}$  соответственно получим

$$\mathcal{G}_{00}^{(-)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon, \eta) = \frac{2(\varepsilon + 1)}{R^{(-)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon, \eta)} [\lambda(2\varepsilon + 1) - (\lambda_m(1 + \eta) - \lambda_0 \eta) + \mathcal{Z}_1(\lambda) \sqrt{[(\lambda - \lambda_m)(\lambda - \lambda_0)]}] ; \quad (7)$$

$$\mathcal{G}_{00}^{(+)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon) = \frac{2(\varepsilon + 1)}{R^{(+)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon)} \times [\lambda(2\varepsilon + 1) - \lambda_0 + \mathcal{Z}_1(\lambda) \sqrt{[(\lambda - \lambda_m)(\lambda - \lambda_0)]}] , \quad (8)$$

где

$$R^{(-)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon, \eta) = 4\varepsilon(\varepsilon + 1)\lambda^2 -$$

$$- \lambda\{(\lambda_m - \lambda_0)(2\eta + 1) + 4\varepsilon[\lambda_m(1 + \eta) - \lambda_0 \eta]\} + (\lambda_m - \lambda_0)[\lambda_m(1 + \eta)^2 - \eta^2 \lambda_0] ; \quad (9)$$

$$R^{(+)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon) = 4\varepsilon(\varepsilon + 1)\lambda^2 + \lambda [(\lambda_m - \lambda_0) - 4\varepsilon \lambda_0] - \lambda_0(\lambda_m - \lambda_0) ; \quad (10)$$

$$\mathcal{Z}_1(\lambda) = \Theta(\lambda)(\lambda_0 - \lambda) + i\Theta(\lambda - \lambda_0) \Theta(\lambda_m - \lambda) - \Theta(\lambda - \lambda_m) \quad (11)$$

( $\Theta(x)$  — ступенчатая функция Хевисайда). Следовательно, спектральные плотности  $(-)$ - и  $(+)$ -колебаний, определенные в полосе  $[\lambda_0, \lambda_m]$  как  $\rho^{(\pm)}(\lambda, \lambda_0, \eta, \varepsilon) = \frac{1}{\pi} \text{Im } \mathcal{G}_{00}^{(\pm)}(\lambda, \lambda_0, \eta, \varepsilon)$ , равны

$$\rho^{(-)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon, \eta) = \frac{2(\varepsilon + 1) \sqrt{[(\lambda - \lambda_m)(\lambda - \lambda_0)]}}{\pi R^{(-)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon, \eta)}, \quad (12)$$

$$\rho^{(+)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon) = \frac{2(\varepsilon + 1) \sqrt{[(\lambda - \lambda_m)(\lambda - \lambda_0)]}}{\pi R^{(+)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon)} .$$

Необходимо отметить, что внешнее поле не изменяет качественно вид спектральных плотностей в полосе сплошного спектра: как и в случае, когда внешнее поле отсутствует (т.е.  $\lambda_0 = 0$ ),  $\rho^{(-)}(\lambda, \lambda_0, 0, 0)$  обращается в нуль на левом ( $\lambda = \lambda_0$ ) и в бесконечность на правом ( $\lambda = \lambda_m$ ) краях спектра, а  $\rho^{(+)}(\lambda, \lambda_0, 0)$  равна нулю на максимальной частоте сплошного спектра  $\lambda = \lambda_m$  и обращается в бесконечность при  $\lambda = \lambda_0$ .

Таким образом, в область  $[0, \lambda_0]$  дискретные частоты  $(+)$ -колебаний должны отщепляться без порога, в то время как для локализации в этой области  $(-)$ -колебаний должен существовать порог. Отщепление дискретных частот от верхней границы сплошного спектра  $\lambda_m$  должно происходить пороговым образом для  $(+)$ -колебаний и без порога для  $(-)$ -колебаний в том частном случае, когда имеется либо чисто изотопический дефект, либо только искажение силовой постоянной связи между двумя атомами.

Полюса функций Грина  $\mathcal{G}_{00}^{(-)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon, \eta)$  и  $\mathcal{G}_{00}^{(+)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon)$ , определяющие квадраты дискретных частот  $(+)$ - и  $(-)$ -колебаний цепочки как функции параметров дефекта, имеют вид

$$\lambda_{g,l}^{(-)} = \frac{1}{8\varepsilon(\varepsilon + 1)} \left\{ (\lambda_m - \lambda_0)(2\eta + 1) + 4\varepsilon [\lambda_m(1 + \eta) - \lambda_0 \eta] \pm \sqrt{(\lambda_m - \lambda_0)^2(2\eta + 1)^2 - 8\varepsilon(\lambda_m - \lambda_0)[\lambda_m(1 + \eta) + \lambda_0 \eta] + 16\varepsilon^2 \lambda_m \lambda_0} \right\}; \quad (13)$$

$$\lambda_{g,l}^{(+)} = \frac{1}{8\varepsilon(\varepsilon + 1)} \left\{ 4\varepsilon \lambda_0 - (\lambda_m - \lambda_0) \pm \sqrt{(\lambda_m - \lambda_0)^2 + 8\varepsilon \lambda_0 [\lambda_m(2\varepsilon + 1) - \lambda_0]} \right\}. \quad (14)$$

Рассмотрим сначала условия существования дискретных состояний для (-)-колебаний. Интенсивность дискретного состояния есть вычет функции  $G_{00}(\lambda)$  в соответствующем полюсе [3,5]. Таким образом, для (-)-колебаний получаем

$$\mu_g^{(-)} = \frac{4(\varepsilon + 1)\{\lambda_g(2\varepsilon + 1) - [\lambda_m(1 + \eta) - \lambda_0 \eta]\} \Theta(\varepsilon - (\lambda_m - \lambda_0)(1 + \eta)/2\lambda_0)}{\sqrt{(\lambda_m - \lambda_0)^2(2\eta + 1)^2 - 8\varepsilon(\lambda_m - \lambda_0)[\lambda_m(1 + \eta) + \lambda_0 \eta] + 16\varepsilon^2 \lambda_m \lambda_0}}; \quad (15)$$

$$\mu_l^{(-)} = \frac{-4(\varepsilon + 1)[\lambda_l(2\varepsilon + 1) - (\lambda_m(1 + \eta) - \lambda_0 \eta)] \Theta((\lambda_m - \lambda_0)\eta/(2\lambda_m) - \varepsilon)}{\sqrt{(\lambda_m - \lambda_0)^2(2\eta + 1)^2 - 8\varepsilon(\lambda_m - \lambda_0)[\lambda_m(1 + \eta) + \lambda_0 \eta] + 16\varepsilon^2 \lambda_m \lambda_0}}.$$

Из выражений для  $\lambda_{g,l}^{(-)}$  и  $\mu_{g,l}^{(-)}$  нетрудно видеть, что колебания атомов дефекта в противофазе дают образование дискретных колебаний как в области «щели»  $(0, \lambda_0)$  (с квадратом «щелевой» частоты  $\lambda_g^{(-)}$  (знак «+» перед радикалом) и интенсивностью  $\mu_g^{(-)}$ ), так и в области  $(\lambda_m, \infty)$  (с квадратом локальной частоты  $\lambda_l^{(-)}$  (знак «-» перед радикалом) и интенсивностью  $\mu_l^{(-)}$ ). Для отщепления щелевого колебания масса изотопов должна превысить пороговое значение, определяемое соотношением

$$\varepsilon \geq \varepsilon_g \equiv \frac{\lambda_m - \lambda_0}{2\lambda_0} (1 + \eta). \quad (16)$$

Равенство в (16) соответствует «граничному» случаю  $\lambda = \lambda_0$ , что означает появление корневой особенности у спектральной плотности  $\rho^{(-)}(\lambda \rightarrow \lambda_0) \sim 1/\sqrt{|\lambda - \lambda_0|} \rightarrow \infty$ . Отметим, что этот порог положителен для всех значений  $\eta$  за исключением  $\eta = -1$  (разрыв связи между двумя изотопами). С ростом  $\varepsilon$  интенсивность щелевого колебания увеличивается от нуля при  $\varepsilon = \varepsilon_g$  ( $\lambda_g^{(-)}(\varepsilon_g) = \lambda_0$ ) до единицы в пределе  $\varepsilon \rightarrow +\infty$ :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \lambda_g^{(-)} = 0, \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} \mu_g^{(-)} = 1.$$

Отщепление локального колебания происходит в том случае, когда для массы изотопов и связи между ними выполняется условие

$$\varepsilon \leq \varepsilon_l \equiv \frac{\lambda_m - \lambda_0}{2\lambda_m} \eta. \quad (17)$$

Видно, что в присутствии только одного типа дефекта (т.е. при  $\varepsilon = 0$  либо  $\eta = 0$ ) образование локального колебания происходит без порога. Как и щелевое, локальное колебание возникает с нулевой интенсивностью:

$$\mu_l^{(-)}(\varepsilon_l) = 0; \quad \lambda_l^{(-)}(\varepsilon_l) = \lambda_m,$$

что соответствует появлению особенности спектральной плотности  $\rho^{(-)}(\lambda \rightarrow \lambda_m) \sim 1/\sqrt{|\lambda - \lambda_m|} \rightarrow \infty$ . Для предельно легких изотопов ( $\varepsilon \rightarrow -1$ ) имеем

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow -1} \lambda_l^{(-)} = \infty, \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow -1} \mu_l^{(-)} = 1.$$

Эволюция спектральных плотностей  $\rho^{(-)}(\lambda, \lambda_0, \eta, \varepsilon)$  представлена на рис. 2 (кривые 6-10). Дискретные (+)-колебания цепочки, как было отмечено выше, отщепляются без порога от нижней границы полосы непрерывного спектра, в то время как для их отщепления от верхней границы спектра существует порог. Квадраты частот дискретных (+)-колебаний определяются выражением (14), где «щелевому» колебанию соответствует индекс  $g$  и знак «+» перед корнем, локальному колебанию — индекс  $l$  и знак «-».

Частота щелевого колебания  $\lambda_g^{(+)}$  совпадает с нижней границей полосы сплошного спектра при  $m' \rightarrow m$  ( $\varepsilon \rightarrow +0$ ) и стремится к нулю при увеличении массы изотопов ( $\varepsilon \rightarrow +\infty$ ). Интенсивность этого дискретного колебания  $\mu_g^{(+)}$  растет от нуля при  $\varepsilon \rightarrow +0$  до единицы при  $\varepsilon \rightarrow +\infty$  и описывается выражением

$$\mu_g^{(+)} = \frac{4(\varepsilon + 1)[\lambda_g(2\varepsilon + 1) - \lambda_0]}{\sqrt{(\lambda_m - \lambda_0)^2 + 8\varepsilon\lambda_0 [\lambda_m(2\varepsilon + 1) - \lambda_0]}} \Theta(\varepsilon). \quad (18)$$

Частота локального колебания совпадает с верхней границей полосы сплошного спектра при пороговом значении массы изотопов, что соответствует  $\varepsilon_l = -(\lambda_m - \lambda_0)/2\lambda_m$ , и стремится к бесконечности в случае, когда масса изотопов предельно мала, т.е. при  $\varepsilon \rightarrow -1$ . Интенсивность локального колебания имеет вид

$$\mu_l^{(+)} = - \frac{4(\varepsilon + 1)[\lambda_l(2\varepsilon + 1) - \lambda_0]}{\sqrt{(\lambda_m - \lambda_0)^2 + 8\varepsilon\lambda_0 [\lambda_m(2\varepsilon + 1) - \lambda_0]}} \times \Theta \left( \frac{\lambda_m - \lambda_0}{2\lambda_m} + \varepsilon \right) \quad (19)$$

и растет от нуля при пороговом значении массы изотопов ( $\mu_l^{(+)}(\varepsilon_l) = 0$ ) до единицы в случае, когда их масса стремится к нулю

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow -1} \mu_l^{(+)} = 1.$$

Эволюция спектральных плотностей  $\rho^{(+)}(\lambda, \lambda_0, \varepsilon)$  представлена на рис. 2 (кривые 1–5).

Отметим, что представленные результаты в случае  $\varepsilon = 0, \lambda_0 = 0$ , что соответствует модели одноатомной цепочки с измененной постоянной связи между одной произвольной парой атомов без учета влияния внешнего поля, переходят в результаты, приведенные в работе [5].

Случай  $\eta = -1$  при  $\lambda_0 > 0$  представляет собой модель полубесконечной одноатомной цепочки, находящейся во внешнем поле, с изотопической примесью на конце. Очевидно, что в этом случае подпространства  $H^{(+)}$  и  $H^{(-)}$  совпадают как друг с другом, так и со всем пространством смещений атомов цепочки. Поскольку спектральные характеристики в подпространстве  $H^{(+)}$  не зависят от параметра связи  $\eta$ , колебания данной полубесконечной цепочки с изотопической примесью будут описываться выражениями, полученными для (+)-колебаний бесконечной цепочки с уже рассмотренным дефектом.

В заключение раздела изложим результаты более общего характера, полученные для систем, находящихся в периодическом внешнем поле и содержащих чисто изотопические дефекты. Пусть в бесконечной симметричной цепочке атомов массой  $m$  имеется две примеси замещения одинаковой массы  $m'$ , разделенные некоторой «прослойкой»

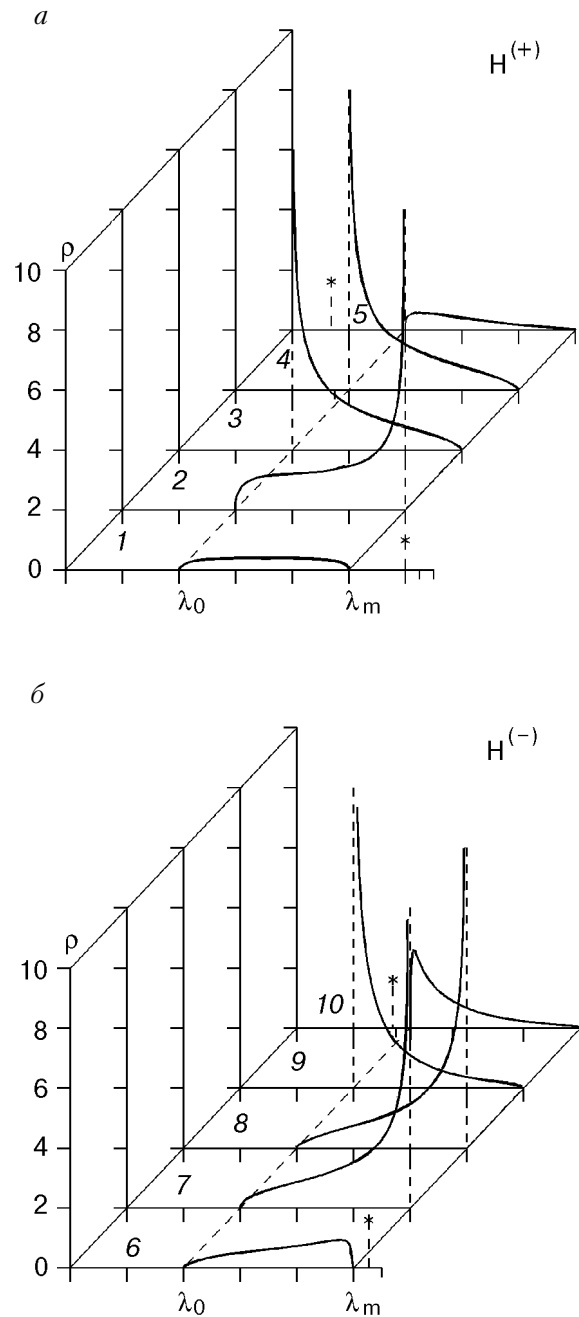


Рис. 2. Спектральные плотности в подпространствах  $H^{(+)}$  (1–5) и  $H^{(-)}$  (6–10), порожденных соответственно синфазными и противофазными смещениями двухатомной примесной молекулы в находящейся во внешнем периодическом поле одноатомной линейной цепочки: 1, 6 – наличие в системе локального колебания  $\int_{\lambda_0}^{\lambda_m} \rho^{(\pm)}(\lambda) d\lambda = 1 - \mu_l^{(\pm)}$ ; 2, 7 – пороговые значения для образования локальных колебаний (корневая особенность при  $\lambda = \lambda_m$ ); 3, 8 – спектральные плотности  $\rho^{(\pm)}(\lambda)$  идеальной линейной цепочки (корневая особенность при  $\lambda = \lambda_0$  у  $\rho^{(+)}(\lambda)$  и при  $\lambda = \lambda_m$  у  $\rho^{(-)}(\lambda)$ ); 4, 9 – пороговые значения для образования щелевых колебаний (корневая особенность при  $\lambda = \lambda_0$ ); 5, 10 – наличие в системе щелевого колебания  $\int_{\lambda_0}^{\lambda_m} \rho^{(\pm)}(\lambda) d\lambda = 1 - \mu_g^{(\pm)}$ .

из  $k$  атомов матрицы. В зависимости от числа атомов в этой «прослойке» должно изменяться пороговое значение массы изотопов, необходимое для возникновения дискретных состояний на частотах как выше, так и ниже полосы непрерывного спектра. Ясно, что случай  $k = 0$  должен соответствовать результатам предыдущей задачи о спектральных характеристиках двухатомной примесной молекулы в одноатомной цепочке при  $\eta \equiv 0$ , когда постоянная связи между примесями равна постоянной связи между атомами матрицы.

Из (4)–(6) следует, что пороговые значения  $\varepsilon$ , приводящие к отщеплению дискретных колебаний от границ сплошного спектра, есть решения уравнения

$$R(\lambda, \varepsilon) \equiv P_{n+1}(\lambda_b, \varepsilon) - b_n P_n(\lambda_b, \varepsilon) K_\infty(\lambda_b) = 0, \quad (20)$$

где через  $\lambda_b$  обозначена одна из границ:  $[\lambda_0, \lambda_m]$ .

В идеальной бесконечной цепочке атомов центр симметрии системы может быть помещен либо в точку положения равновесия какого-либо атома, либо в точку, находящуюся посередине межатомного расстояния. В обоих случаях пространство смещений атомов решетки  $H$  может быть разбито на два взаимно ортогональных подпространства, прямая сумма которых дает все пространство смещений. Первому варианту выбора соответствует прямая сумма подпространств  $H^{(0)}$ , порожденного смещением атома, находящегося в центре симметрии, и далее синфазными смещениями его ближайших соседей, и  $H^{(\pm)}$ , порожденного противофазными смещениями ближайших соседей атома — центра симметрии. Уже рассмотренному в данной работе второму варианту выбора положения центра симметрии соответствует прямая сумма подпространств  $H^{(+)}$  и  $H^{(-)}$ . Можно показать, что во всех перечисленных подпространствах полиномы  $P_n(\lambda)$  на краях полосы непрерывного спектра  $\lambda_b$  имеют простую зависимость от номера  $n$ :

$$\begin{aligned} P_n^{(0)}(\lambda_0) &= (-1)^n \sqrt{2}, & P_n^{(0)}(\lambda_m) &= \sqrt{2}; \\ P_n^{(\pm 1)}(\lambda_0) &= (-1)^n (n+1), & P_n^{(\pm 1)}(\lambda_m) &= (n+1); \\ P_n^{(+)}(\lambda_0) &= (-1)^n, & P_n^{(+)}(\lambda_m) &= 2n+1; \\ P_n^{(-)}(\lambda_0) &= (-1)^n (2n+1), & P_n^{(-)}(\lambda_m) &= 1. \end{aligned} \quad (21)$$

Наличие примесей изменяет значения соответствующих матричных элементов  $a_n, b_n$  ( $n \geq 1$ ) динамического оператора:

$$a_n = \frac{a}{\varepsilon + 1}, \quad b_{n-1} = b_n = \frac{b}{\sqrt{\varepsilon + 1}}, \quad (22)$$

где  $n = (k-1)/2$ , если число атомов  $k$  между изотопами нечетное,  $n = k/2$ , если  $k$  — четное. Исходя из рекуррентных соотношений (6) для полиномов  $P_n(\lambda)$  и вида матрицы оператора  $L$  для рассматриваемой системы, содержащей две изотопические примеси на расстоянии  $k$  атомов друг от друга, получаем зависимость функций  $P_n(\lambda, \varepsilon)$  от параметра массы примеси:

$$\begin{aligned} P_{n-1}(\lambda, \varepsilon) &= P_{n-1}(\lambda), \\ P_n(\lambda, \varepsilon) &= \sqrt{\varepsilon + 1} P_n(\lambda), \\ P_{n+1}(\lambda, \varepsilon) &= \frac{\lambda \varepsilon}{b} P_n(\lambda) + P_{n+1}(\lambda). \end{aligned} \quad (23)$$

Следовательно, присутствие данного дефекта приводит к появлению в знаменателе функции Грина (4) дополнительного слагаемого

$$R(\lambda, \varepsilon) = \frac{\lambda \varepsilon}{b} P_n(\lambda) + R(\lambda), \quad (24)$$

где  $R(\lambda) \equiv R(\lambda, 0)$ . На границах полосы непрерывного спектра  $R(\lambda)$  преобразуется к виду

$$R(\lambda) = \frac{1}{2} [P_{n-1}(\lambda_b) - P_{n+1}(\lambda_b)], \quad (25)$$

что позволяет получить пороговое значение параметра массы дефекта как решение уравнения (20):

$$\varepsilon_b = \frac{b}{\lambda_b} \frac{[P_{n-1}(\lambda_b) - P_{n+1}(\lambda_b)]}{2P_n(\lambda_b)}. \quad (26)$$

Окончательный результат дает подстановка в (26) полиномов  $P_n(\lambda_b)$  (21), отвечающих определенному ((+) или (-)) типу независимых колебаний цепочки, т.е. определенному подпространству, где (+)-колебания описываются  $H^{(0)}$  для нечетных  $k$ ,  $H^{(+)}$  — для четных, а (-)-колебаниям соответствуют  $H^{(\pm 1)}$  при нечетных  $k$  и  $H^{(-)}$  — при четных.

Таким образом, в модели цепочки, содержащей две изотопические примеси одинаковой массы на расстоянии  $k$  атомов друг от друга, критический дефект массы для образования локального дискретного состояния, порожденного синфазными смещениями изотопов (дискретные (+)-колебания), равен

$$\varepsilon_l^{(+)} = -\frac{1}{2(k+1)} \frac{\lambda_m - \lambda_0}{\lambda_m} < 0. \quad (27)$$

При этом квадрат частоты, соответствующий «щелевому» (+)-колебанию, отщепляется в область  $[0, \lambda_0]$  без порога.

Для (-)-колебаний «щелевое» дискретное состояние образуется пороговым образом, в то время как отщепление локального происходит при  $\epsilon < 0$ , т.е. без порога. Отвечающее «щелевому» колебанию пороговое значение параметра массы дефекта равно

$$\epsilon_g^{(-)} = \frac{1}{2(k+1)} \frac{\lambda_m - \lambda_0}{\lambda_0} > 0. \quad (28)$$

Естественно, что при  $k \rightarrow \infty$  пороговые значения  $\epsilon_l^{(+)} \rightarrow \epsilon_l^{(-)} \equiv -0$  и  $\epsilon_g^{(-)} \rightarrow \epsilon_g^{(+)} \equiv +0$ , а квадраты дискретных частот  $\lambda_d^{(+)} \rightarrow \lambda_d^{(-)}$ .

## 2. Адсорбированная одноатомная цепочка в периодическом внешнем поле

Рассмотрим модель адсорбированной одноатомной цепочки атомов с учетом влияния периодического внешнего поля. Крайний атом цепочки связан с некоторой «стенкой» (массу которой считаем бесконечной). Силовую постоянную, характеризующую эту связь, обозначим через  $\alpha'$  (рис. 3). Как и в предыдущем разделе, обозначим  $\eta \equiv (\alpha' - \alpha)/\alpha$ . Оператор возмущения  $\hat{\Lambda}^{af}(n, n')$  для рассматриваемой системы равен

$$\hat{\Lambda}^{af}(n, n') = \frac{\eta(\lambda_m - \lambda_0)}{4} \delta_{n,0} \delta_{n',0} - \hat{L}(n, n') \Theta(-n) \Theta(-n'), \quad (29)$$

где  $\hat{L}(n, n')$  определяется (1).

Матричные элементы  $a_n, b_n$  динамического оператора  $\hat{L} + \hat{\Lambda}^{af}$  совпадают с аналогичными элементами из (3) при  $n \geq 1$ , что естественно, поскольку данные элементы описывают взаимодействие между атомами цепочки, удаленными от дефекта на расстояния, превышающие межатомное. Элементы  $a_0, b_0$ , определяющие изменения, возникающие в спектре цепочки из-за разрыва и создания дополнительной связи, равны

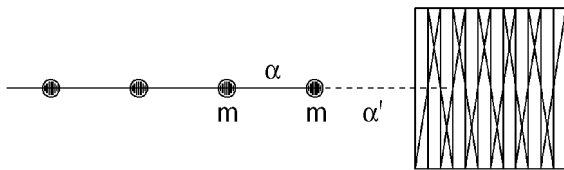


Рис. 3. Схематическое изображение модели одноатомной цепочки, адсорбированной на поверхности неподвижного твердого тела.

$$a_0^{af} = \frac{\lambda_m - \lambda_0}{4} (\eta + 2) + \lambda_0, \quad b_0^{af} = \frac{\lambda_m - \lambda_0}{4}. \quad (30)$$

Функция Грина данной модели имеет вид

$$\mathcal{G}_{00}^{af}(\lambda, \lambda_0, \eta) = \frac{2}{\eta(\lambda_m - \lambda_0)(\lambda_l^{af} - \lambda)} \times \left[ \lambda - \frac{\lambda_m(\eta+1) - \lambda_0(\eta-1)}{2} + Z_1(\lambda) \sqrt{(\lambda - \lambda_m)(\lambda - \lambda_0)} \right], \quad (31)$$

где

$$\lambda_l^{af} = \frac{\lambda_m(\eta+1)^2 - \lambda_0(\eta-1)^2}{4\eta}. \quad (32)$$

Соответствующая спектральная плотность определена в полосе сплошного спектра  $[\lambda_0, \lambda_m]$  как  $\rho^{af}(\lambda, \lambda_0, \eta) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \mathcal{G}_{00}^{af}(\lambda, \lambda_0, \eta)$  и равна

$$\rho^{af}(\lambda, \lambda_0, \eta) = \frac{2 \sqrt{(\lambda_m - \lambda)(\lambda - \lambda_0)}}{\pi \eta (\lambda_m - \lambda_0) (\lambda_l^{af} - \lambda)}. \quad (33)$$

Эволюция этих спектральных плотностей с ростом параметра  $\eta$  представлена на рис. 4. Нетрудно видеть, что (33) обращается в нуль на обеих границах непрерывного спектра. Такое поведение спектральной плотности характерно для одномерных систем, в которых имеется дефект «поверхность плюс дополнительная связь» и которые

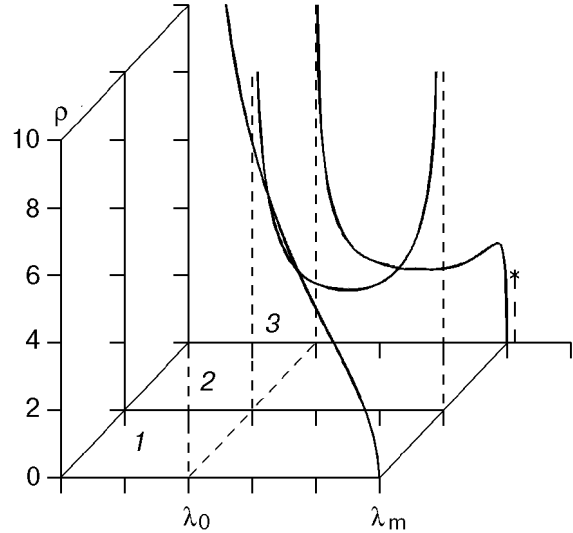


Рис. 4. Спектральные плотности конечного атома адсорбированной полуограниченной линейной цепочки: 1 — свободный конец (корневая особенность при  $\lambda = \lambda_0$ ); 2 — пороговое значение параметра связи для образования локального колебания (корневые особенности на обеих границах полосы непрерывного спектра); 3 — наличие в системе локального колебания.

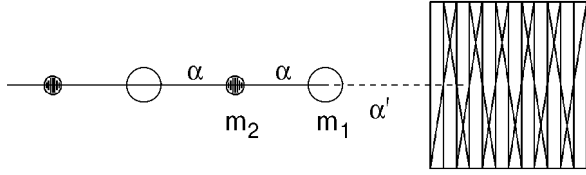


Рис. 5. Схематическое изображение модели двухатомной цепочки, адсорбированной на поверхности неподвижного твердого тела.

можно условно назвать адсорбированными цепочками. Полюс Грина (31)  $\lambda_i^{af}$  есть квадрат локальной частоты, которая отщепляется в область  $(\lambda_m, +\infty)$  при  $\eta \geq 1$  с интенсивностью

$$\mu_i^{af} = \frac{\eta^2 - 1}{\eta^2} \Theta(\eta - 1). \quad (34)$$

Отметим, что значения локальной частоты  $\lambda_i^{af}$  (32) могут попадать и в интервал  $[0, \lambda_0]$ , но при этом интенсивность тождественно обращается в нуль. Таким образом, как бы ни была мала постоянная связи  $\alpha'$  цепочки с некоторой адсорбирующей поверхностью, это не приведет к отщеплению дискретного колебания от нижней границы полосы сплошного спектра. В то же время с ослаблением связи  $\alpha'$  происходит «перекачка» фононов в область квадратов частот вблизи дна акустической зоны, причем в предельном случае невозмущенной полубесконечной цепочки спектральная плотность колебаний модели приобретает корневую особенность [6].

### 3. Адсорбированная цепочка с двухатомной элементарной ячейкой

Рассмотрим полубесконечную цепочку с двухатомной элементарной ячейкой, адсорбированную на поверхности твердого тела посредством своего крайнего атома. Массы атомов равны  $m_1$  и  $m_2$ . Крайний атом цепочки (пусть для определенности его масса равна  $m_1$ ), как и в предыдущем разделе, связан с некоторой «стенкой», и характеризующая эту связь силовая константа —  $\alpha' \equiv \alpha(1 + \eta)$  (рис. 5).

Оператор возмущения (определенный аналогично оператору (29) предыдущей задачи) в рассматриваемой системе имеет вид

$$\hat{\Lambda}(n, n') = -\hat{\mathcal{L}}(n, n') \Theta(-n) \Theta(-n') -$$

$$-\frac{\lambda_1 - \lambda_*}{2} \delta_{n,0} \delta_{n',0}, \quad (35)$$

где  $\hat{\mathcal{L}}(n, n')$  — динамический оператор, описывающий колебания идеальной бесконечной двухатомной цепочки [1];  $\lambda_* = 2\alpha'/m_1$ ;  $\lambda_i = 2\alpha/m_i$ ,  $i = 1, 2$ . Матричные элементы  $\mathcal{J}$ -матрицы оператора  $\hat{\mathcal{L}} + \hat{\Lambda}$  данной системы равны

$$a_0 = \frac{\lambda_1 + \lambda_*}{2}; \quad a_{2(n+1)} = \lambda_1; \quad a_{2n+1} = \lambda_2; \quad (36)$$

$$b_n = \frac{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2}}{2}; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

и функция Грина имеет вид

$$\mathcal{G}_{00}(\lambda, \lambda_*) = \frac{2}{R(\lambda, \lambda_*)} \left[ (\lambda - \lambda_*)(\lambda - \lambda_2) + \right. \\ \left. + \mathcal{Z}_2(\lambda) \sqrt{|\lambda(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)(\lambda - \lambda_1 - \lambda_2)|} \right], \quad (37)$$

где

$$\mathcal{Z}_2(\lambda) = i [\Theta(\lambda) \Theta(\lambda_1 - \lambda) + \Theta(\lambda - \lambda_2) \Theta(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda)] + \\ + \Theta(\lambda - \lambda_1) \Theta(\lambda_2 - \lambda) - \Theta(\lambda - \lambda_1 - \lambda_2);$$

$$R(\lambda, \lambda_*) = 2\lambda^2(\lambda_1 - \lambda_*) -$$

$$- \lambda[(\lambda_1 + \lambda_*)(\lambda_1 - \lambda_*) - \lambda_2(2\lambda_* - \lambda_1)] - \lambda_2 \lambda_*^2.$$

Из (37) следует, что непрерывный спектр колебаний системы состоит из двух полос равной ширины:  $[0, \{\lambda_1, \lambda_2\}_{\min}]$  и  $[\{\lambda_1, \lambda_2\}_{\max}, \lambda_m = \lambda_1 + \lambda_2]$ , разделенных щелью  $\Delta = |\lambda_1 - \lambda_2|$ .

Таким образом, видно, что спектральная плотность колебаний двухатомной адсорбированной цепочки обращается в нуль на каждой из границ непрерывного спектра. При этом спектральная плотность в предельном случае свободной (несвязанной, невозмущенной) полубесконечной цепочки ( $\lambda_* \equiv 0$ ) стремится к бесконечности при  $\lambda = 0$  пропорционально  $1/\sqrt{\lambda}$  (что обуславливает расходимость среднеквадратичных смещений в такой системе). Рассматриваемое возмущение при  $\lambda_* > 0$  ликвидирует эту особенность.

Функция  $R(\lambda, \lambda_*)$  имеет следующие корни  $\lambda_{g,l}$ :

$$\lambda_{g,l} = \frac{1}{4(\lambda_1 - \lambda_*)} \left[ (\lambda_1 + \lambda_*)(\lambda_1 - \lambda_*) - \lambda_2(2\lambda_* - \lambda_1) \pm \right. \\ \left. \pm \sqrt{[(\lambda_1 + \lambda_*)(\lambda_1 - \lambda_*) + \lambda_2(2\lambda_* - \lambda_1)]^2 + 2\lambda_1 \lambda_2 (\lambda_1 - \lambda_*)^2} \right], \quad (38)$$



которые определяют полюса функции Грина (37) — значения квадратов частот щелевого и локального колебаний (соответственно знаки «+» и «-» перед радикалом). Процесс отщепления дискретных частот колебаний в случае  $\lambda_* > 0$  не отличается принципиально от тех систем, где спектральная плотность на одной из границ сплошного спектра обращается в бесконечность, и происходит так же, как и отщепление дискретной частоты от того края спектра, на котором плотность колебаний равна нулю. Нетрудно показать, что при  $\lambda_* \rightarrow \lambda_1$  полюс (37)  $\lambda_g$  стремится к одной из границ щели  $\lambda_1$ :

$$\lim_{\lambda_* \rightarrow \lambda_1 \pm 0} \lambda_g = \lambda_1.$$

Аналогично, при  $\lambda_* = \lambda_{\max}$  другой корень знаменателя функции Грина  $\lambda_l$  совпадает с квадратом максимальной частоты спектра. Видно, что при

определенном ненулевом значении параметра связи  $\lambda_*$  спектральная плотность приобретает корневую особенность на той границе сплошного спектра, от которой отщепляется дискретная частота. Таким образом, для образования как щелевого, так и локального состояний в данной системе существует порог, что и следовало предполагать исходя из вида спектральной плотности колебаний несвязанной полубесконечной цепочки.

Ясно, что крайний атом цепочки может принадлежать как легкой, так и тяжелой подрешетке. Эти две ситуации мы рассмотрим отдельно.

Если крайний атом цепочки  $m_1$  легкий (см. рис. 6, кривые 1–5), то верхней границей акустической зоны является  $\lambda_2$ , а нижней границей оптической —  $\lambda_1$ . Интенсивности дискретных колебаний в этом случае равны

$$\mu_g(\lambda_*) = \frac{4(\lambda_g - \lambda_*)(\lambda_g - \lambda_2) \Theta(\lambda_*) \Theta(\lambda_1 - \lambda_*)}{\sqrt{[(\lambda_1 + \lambda_*)(\lambda_1 - \lambda_*) + \lambda_2(2\lambda_* - \lambda_1)]^2 + 2\lambda_1 \lambda_2 (\lambda_1 - \lambda_*)^2}}, \quad (39)$$

$$\mu_l(\lambda_*) = -\frac{4(\lambda_l - \lambda_*)(\lambda_l - \lambda_2) \Theta(\lambda_1 + \lambda_2 - \lambda_*)}{\sqrt{[(\lambda_1 + \lambda_*)(\lambda_1 - \lambda_*) + \lambda_2(2\lambda_* - \lambda_1)]^2 + 2\lambda_1 \lambda_2 (\lambda_1 - \lambda_*)^2}}. \quad (40)$$

Анализ выражений для щелевой частоты  $\lambda_g$  (38) и ее веса (39) показывает, что в предельном

случае разрыва связи  $\lambda_* = 0$  существует дискретное щелевое состояние

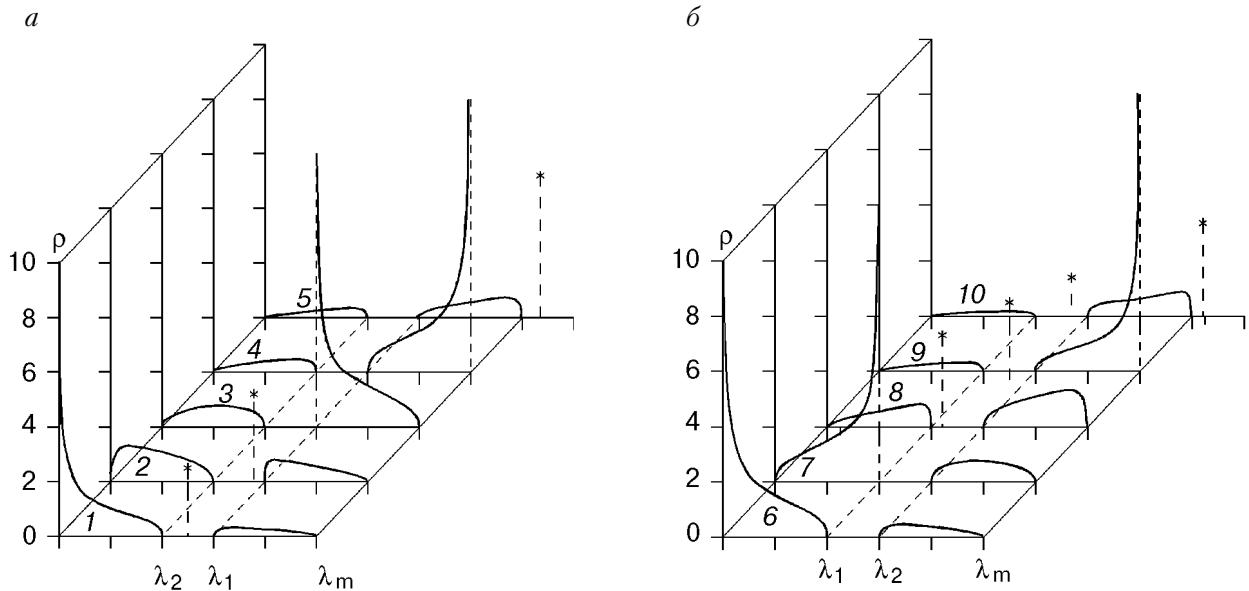


Рис. 6. Спектральные плотности концевой атома адсорбированной полуограниченной линейной цепочки с двухатомной элементарной ячейкой.

$$\lambda_g(0) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2}, \quad \mu_g(0) = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1}, \quad (41)$$

что согласуется с результатами [1,7]. Усиление связи в диапазоне  $\lambda_* \in [0, \lambda_1]$  приводит к росту щелевого корня  $\lambda_g$  до значения  $\lambda_g = \lambda_1$  (т.е. до нижней границы оптической зоны) и сопровождается монотонным уменьшением  $\mu_g$  до нуля.

Заметим, что соотношение  $\lambda_* = \lambda_1$  означает равенство силовой постоянной взаимодействия крайнего атома цепочки с поверхностью твердого тела  $\alpha'$  и постоянной связи между остальными атомами цепочки  $\alpha$ . При дальнейшем росте параметра связи  $\lambda_*$  у спектральной плотности колебаний формируется максимум вблизи верхней границы оптической зоны, а выполнение неравенства  $\lambda_* > \lambda_{\max}$  (т.е.  $\alpha' > \alpha(1 + m_1/m_2)$ ) приводит к образованию локального колебания с квадратом частоты  $\lambda_l$  (38). Вес этого колебания  $\mu_l$  (40) монотонно увеличивается от нуля при  $\lambda_* = \lambda_{\max}$  до единицы в случае  $\lambda_* \rightarrow \infty$ .

Рассмотрим теперь ситуацию, когда цепочка связана с адсорбирующей поверхностью посредством тяжелого атома (см. рис. 6, кривые 6–10). Щелевое колебание отщепляется от верхней границы акустической зоны, если  $\lambda_*$  превышает пороговое значение ( $\lambda_* \geq \lambda_1$ ).

Дальнейшее усиление связи приводит к отщеплению локального колебания от верхней границы спектра аналогично случаю  $m_1 < m_2$  с тем же порогом:  $\lambda_* \geq \lambda_{\max}$ . В пределе  $\lambda_* \rightarrow \infty$  щелевое состояние асимптотически приближается к нижней границе оптической зоны, а частота локального состояния при этом стремится к бесконечности:

$$\lim_{\lambda_* \rightarrow \infty} \lambda_g = \lambda_2; \quad \lim_{\lambda_* \rightarrow \infty} \lambda_l = \infty.$$

Таким образом, в случае достаточно сильного взаимодействия тяжелого крайнего атома цепочки с поверхностью твердого тела ( $\alpha' > \alpha(1 + m_1/m_2)$ ) в спектре присутствуют и локальное колебание с квадратом частоты  $\lambda_l$ , и щелевое колебание  $\lambda_g$ .

Интенсивность щелевого состояния

$$\mu_g = \frac{4(\lambda_g - \lambda_*)(\lambda_g - \lambda_2) \Theta(\lambda_* - \lambda_1)}{\sqrt{[(\lambda_1 + \lambda_*)(\lambda_1 - \lambda_*) + \lambda_2(2\lambda_* - \lambda_1)]^2 + 2\lambda_1 \lambda_2 (\lambda_1 - \lambda_*)^2}} \quad (42)$$

имеет немонотонную зависимость от параметра  $\lambda_*$ . Нетрудно показать, что  $\mu_g$  обращается в нуль как при  $\lambda_* = \lambda_1$ , так и при  $\lambda_* \rightarrow \infty$ . В то же время интенсивность локального состояния  $\mu_l$  (40) монотонно возрастает с усилением связи цепочки с адсорбирующей поверхностью. Затухание дискретного состояния по мере удаления от дефекта происходит в соответствии с [1,6], где показано, что в линейной цепочке с взаимодействием ближайших соседей интенсивность дискретного колебания атома с номером  $n$ , обусловленного находящимся в начале отсчета локальным дефектом, пропорциональна  $P_n^2(\lambda_d)$ , а полиномы  $P_n(\lambda_d)$  вне дефектного кластера образуют убывающую геометрическую прогрессию. Таким образом, степень локализации щелевого колебания с квадратом частоты  $\lambda_g \in [\lambda_1, \lambda_2]$  меньше, чем локального колебания, квадрат частоты которого  $\lambda_l > \lambda_m$ .

Отметим, что подобная модель была рассмотрена в [7]. В отличие от использованного там подхода введение величины  $\mu_{g,l}$  — интенсивности локализованного состояния как вычета функции  $\mathcal{G}_{00}(\lambda, \lambda_*)$  в соответствующем полюсе — позволяет отбирать те полюса, которые отвечают истинным дискретным колебаниям. Например, у двух-

атомной полуограниченной линейной цепочки со свободным концом щелевой уровень не возникает, если крайний атом цепочки тяжелый, поскольку  $\mu_g$  в этом случае равен нулю. В то же время атом легкой подрешетки на конце цепочки приводит к возникновению щелевого состояния (41).

Полученные результаты могут быть использованы и для анализа других квазичастичных возбуждений в одномерных системах. В этой связи любопытно отметить, что в настоящее время в одномерных вырожденных электронных системах интенсивно изучаются (в том числе и экспериментально) различные характеристики, включая транспортные [8] и оптические свойства [9], резонансное туннелирование [10], многочастичные эффекты и плазмонные возбуждения [11], роль примесей [12], особенности электрон-фононного взаимодействия [13], спектр коллективных колебаний одномерной системы электронов над жидким гелием [14,15] и т.д.

Авторы выражают благодарность А. М. Косевичу за полезное обсуждение результатов.

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда фундаментальных исследований Украины № 2.4/165 («USKO»).

1. М. А. Мамалуй, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **24**, 773 (1998).
2. В. И. Пересада, в сб.: *Физика конденсированного состояния*, ФТИНТ АН УССР, Харьков (1968), с. 172.
3. В. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, В. С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975).
4. R. Haydock, in: *Solid State Physics* **35**, H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (eds.), Academic Press, New York (1980), p. 129.
5. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **20**, 586 (1994).
6. М. А. Мамалуй, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФТТ* **38**, 3683 (1996).
7. Е. Я. Глушко, В. А. Хрисанов, *ФНТ* **23**, 1215 (1997).
8. C. W. S. Beenakker and H. van Houten, in: *Solid State Physics* **44**, H. Ehrenreich and D. Turnbull (eds.), Academic Press, New York (1991), p. 1.
9. A. S. Plaut, H. Lage, P. Grambow, D. Heitmann, K. von Klitzing, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1642 (1991).
10. S. Tarucha, Y. Hirayama, T. Saku, and T. Kimura, *Phys. Rev.* **B41**, 5459 (1990).
11. L. Wendler and V. G. Grigoryan, *Phys. Rev.* **B49**, 14531 (1994).
12. A. Ferreira da Silva, *Phys. Rev.* **B41**, 1684 (1990).
13. Вл. Л. Гинзбург, Ю. П. Монарха, *ФНТ* **4**, 1236 (1978).
14. С. С. Соколов, О. И. Киричек, *ФНТ* **20**, 764 (1994).
15. В. А. Николаенко, Х. Яяма, Ю. З. Ковдря, А. Томокийо, *ФНТ* **2**, 642 (1997).

Effect of local defects on vibrational characteristics of infinite and semi-infinite one-dimensional structures in external periodic field

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

Exact analytic expressions are obtained for Green's functions of chain-like structures with defects which are exposed to external periodic field. The two-atomic impurity molecule in the one-atomic chain and the adsorbed chains with a one-atomic and a diatomic unit cell are considered. The conditions for the formation and the peculiar features of local and gap vibrations are investigated. The evolution of the threshold values of masses of two isotopic impurities responsible for the formation of localized states is analyzed depending on the distance between the impurities.