

Локализация колебаний вблизи примесных атомов в полубесконечной и бесконечной линейных цепочках

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

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

Статья поступила в редакцию 1 апреля 1999 г.

Для полубесконечной линейной цепочки с примесью на конце, а также для бесконечной линейной цепочки, содержащей примеси замещения или внедрения (в общем случае — трехатомный дефектный кластер), получены точные аналитические выражения для локальных плотностей атомов данной системы в зависимости от расстояния до дефекта, а также от параметров дефекта (изменений массы и силовых постоянных). Определена зависимость от параметров дефекта условий возникновения и частот локальных колебаний, а также амплитуд колебаний с данными частотами различных атомов системы (т.е. характер их затухания). Получены и проанализированы точные аналитические выражения, определяющие пороговые значения параметров дефекта как функции расстояния от примесного атома до края цепочки.

Для напівобмеженого лінійного ланцюжка з домішкою на кінці, а також для необмеженого лінійного ланцюжка, що містить домішки заміщення та проникнення (в загальному випадку — триатомний дефектний кластер), одержано точні аналітичні вирази для локальних густин коливань атомів даної системи в залежності від відстані до дефекту, а також від параметрів дефекту (змін маси та силових сталих). Визначено залежність від параметрів дефекту умов виникнення та частот локальних коливань, а також амплітуд коливань з даними частотами різних атомів системи (тобто характер їхнього згасання). Одержано та проаналізовано точні аналітичні вирази, що визначають порогові значення параметрів дефекту як функцію відстані від домішкового атома до краю ланцюжка.

PACS: 61.72.-y, 63.20.-e

Как известно, наиболее распространенным способом получения соединений с заранее заданными свойствами (термодинамическими, оптическими, электронными) является введение в кристалл-матрицу разного рода примесей [1–3]. Поэтому получение точных выражений, в аналитической форме описывающих разнообразные аспекты влияния примесей на квазичастичные спектры возбуждений в кристаллической решетке, представляет собой актуальную задачу даже в случае предельной простоты используемой модели. Возросший в последние годы интерес к исследованию квазиодномерных систем (различных цепочечных, микро- и наноструктур, линейных макромолекул и т. п.) связан с успехами в технологии выращивания совершенных монокристаллов низкой размерности [4–6]. Квазинизкоразмерное поведение электронных и

фононных характеристик является отличительной чертой как ВТСП систем, так и многих обычных сверхпроводников [7], что обусловлено наличием цепочечных элементов в их структуре. Все это определяет необходимость решения задачи о нахождении в точном аналитическом виде колебательных характеристик одномерных цепочек с локальными нарушениями периодичности расположения атомов. Одним из простых типов таких нарушений является присутствие в цепочке локальных примесей замещения и внедрения.

В настоящей работе с помощью метода J -матриц [8–10] получены точные аналитические выражения для локальных плотностей колебаний и проанализированы амплитуды колебаний примесных атомов и атомов, расположенных вблизи примеси замещения или внедрения, находящейся в линейной цепочке с одноатомной

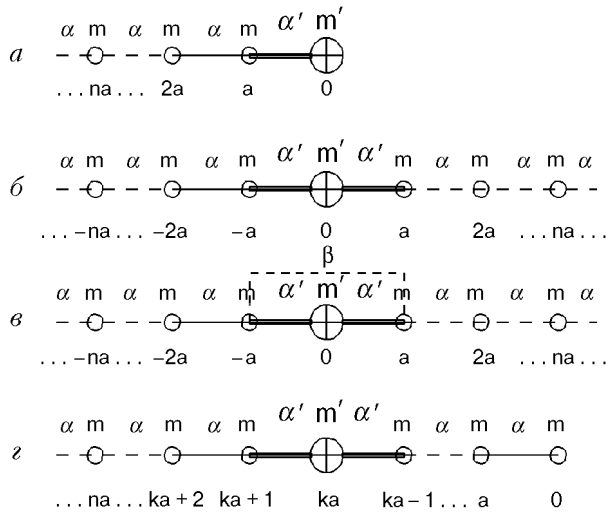


Рис. 1. Схематическое изображение рассматриваемых систем: *а* – полубесконечная цепочка с примесью замещения на свободном конце; *б* и *в* – бесконечная цепочка с примесями замещения и внедрения соответственно; *г* – полубесконечная цепочка с примесью замещения, отстоящей от свободного конца на k межатомных расстояний.

элементарной ячейкой (как полубесконечной, так и бесконечной). Примесь отличается от атома основной решетки массой и силовым взаимодействием с ближайшими соседями.

Рассмотрены, в частности, ситуации, когда на локальной частоте амплитуда колебаний соседних с примесью атомов может превышать амплитуду колебаний примесного атома. Изучен также более общий случай примеси, отстоящей от края цепочки на произвольное число межатомных расстояний, и получена зависимость пороговых значений параметров дефекта от местонахождения примесного атома.

Функция Грина полубесконечной линейной цепочки с примесью на конце

Рассмотрим полубесконечную одноатомную цепочку, крайний («поверхностный») атом которой замещен примесью, отличающейся от атомов матрицы как массой, так и постоянной связи с соседним атомом (рис. 1, *а*). Оператор возмущения, описывающий такой дефект, имеет вид

$$\Lambda^s(n, n') = -\mathbf{L}(n, n') \Theta(-n) \Theta(-n') + \frac{\lambda_m}{4} \frac{\eta + 1}{\varepsilon + 1} \delta_{n,0} \delta_{n',0} - \frac{\lambda_m}{4} \left[\frac{1 + \eta}{\sqrt{2(1 + \varepsilon)}} - 1 \right] \times (\delta_{n,0} \delta_{n',1} + \delta_{n',0} \delta_{n,1}). \quad (1)$$

Здесь $n = 0, 1, 2, \dots$; $\varepsilon = (m' - m)/m$ (дефект массы, m' и m – соответственно масса примеси и атома основной решетки); $\eta = (\alpha' - \alpha)/\alpha$ (дефект силового взаимодействия, α' и α – постоянные силового взаимодействия примесного атома с атомами матрицы и атомов матрицы между собой); \mathbf{L}_0 – оператор, описывающий колебания атомов идеальной цепочки:

$$\mathbf{L}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{L}_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\lambda_m}{4} \begin{cases} -1, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = a; \\ 2, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = 0; \\ 0, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| > a \end{cases} \quad (2)$$

($\lambda_m = 4\alpha/m$ – квадрат максимальной частоты колебаний идеальной линейной цепочки).

Функция Грина такой системы, т.е. первый диагональный элемент оператора $\mathbf{G} \equiv (\lambda \mathbf{I} - \mathbf{L} - \Lambda^s)^{-1}$ (λ – квадрат частоты), может быть легко найдена с помощью метода \mathbf{J} -матриц (см., например, [8–10]). Аналогичные расчеты для одномерных систем достаточно подробно изложены в [11–14].

В базисе $\{\mathbf{h}_n\}_{n=0}^{\infty} = \{(-1)^n |n\rangle\}_{n=0}^{\infty}$, где индекс n нумерует атомы начиная от поверхности, операторы \mathbf{L} и Λ^s представляются в форме \mathbf{J} -матриц вида $a_i \delta_{i,k} + b_i (\delta_{i,k+1} + \delta_{i,k-1})$. Ранг матрицы оператора Λ^s равен двум, а все матричные элементы \mathbf{J} -матрицы оператора \mathbf{L} (ее ранг бесконечен), кроме a_0 , равны предельным значениям матричных элементов \mathbf{J} -матрицы оператора, спектр которой не имеет люков и находится в полосе $[0, \lambda_m]$ – $a = \lambda_m/2$; $b = \lambda_m/4$.

Если с некоторого номера n матричные элементы \mathbf{J} -матрицы равны своим предельным значениям, то для функции Грина в [9] справедливо

$$\mathcal{G}_{00}(\lambda) = (\mathbf{h}_0, \mathbf{G} \mathbf{h}_0) = \frac{Q_n(\lambda) - b_{n-1} Q_{n-1}(\lambda) K_{\infty}(\lambda)}{P_n(\lambda) - b_{n-1} P_{n-1}(\lambda) K_{\infty}(\lambda)}. \quad (3)$$

Входящие в это выражение ортогональные полиномы $\{P, Q\}_m(\lambda, \eta, \varepsilon)$, удовлетворяют следующим рекуррентным соотношениям:

$$b_m \{P, Q\}_{m+1}(x) = (x - a_m) \{P, Q\}_m(x) - b_{m-1} \{P, Q\}_{m-1}(x) \quad (4)$$

при начальных условиях $P_{-1}(x) \equiv 0$; $P_0(x) \equiv 1$; $Q_0(x) \equiv 0$; $Q_1(x) = b_0^{-1}$, а функция $K_{\infty}(\lambda)$ определяется видом предельных значений элементов \mathbf{J} -матрицы, в нашем случае

$$K_{\infty}(\lambda) = 4\lambda_m^{-2} \left[2\lambda - \lambda_m + 2Z(\lambda) \sqrt{\lambda |\lambda - \lambda_m|} \right]; \quad (5)$$

$$Z(\lambda) = i\Theta(\lambda)\Theta(\lambda_m - \lambda) - \Theta(\lambda - \lambda_m), \quad (6)$$

а $\Theta(x)$ — Θ -функция Хевисайда.

Для рассматриваемой системы $n = 2$ и

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{00}^s(\lambda, \eta, \varepsilon) &= \frac{1}{R^s(\lambda, \eta, \varepsilon)} \times \\ &\times \left\{ -\lambda \left[\lambda\eta - \frac{\lambda_m}{8} \frac{\eta + 1}{\varepsilon + 1} [\eta(2\varepsilon + 3) + (2\varepsilon + 1)] \right] + \right. \\ &\left. + Z(\lambda) \frac{\lambda_m}{8} \frac{(\eta + 1)^2}{\varepsilon + 1} \sqrt{|\lambda(\lambda_m - \lambda)|} \right\}, \quad (7) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} R^s(\lambda, \eta, \varepsilon) &= \lambda \left\{ -\lambda^2\eta + \lambda \frac{\lambda_m}{4} \frac{\eta + 1}{\varepsilon + 1} \times \right. \\ &\left. \times [(\eta + 1)(\varepsilon + 2) - 2] + \frac{\lambda_m^2}{16} \left(\frac{\eta + 1}{\varepsilon + 1} \right)^2 \right\}. \quad (8) \end{aligned}$$

Функция $\mathcal{G}_{00}^s(\lambda, \eta, \varepsilon)$ имеет полюсы в точках

$$\lambda_{l1, l2}^s = \frac{\lambda_m}{8\eta} \left(\frac{\eta + 1}{\varepsilon + 1} \right) \left\{ (\eta + 1)(\varepsilon + 2) \right.$$

$$\left. - 2 \pm \sqrt{(\eta + 1)[(\eta + 1)(\varepsilon + 2)^2 - 4(\varepsilon + 1)]} \right\}. \quad (9)$$

Полюс $\lambda_{l1}^s \equiv \lambda_l^s$, соответствующий в (9) знаку «+» перед корнем, совпадает с верхней границей полосы сплошного спектра при $\eta_l^s = (2\varepsilon + 1)/(2\varepsilon + 3)$:

$$\lambda_l^s(\eta_l^s) = \lambda_m$$

и возрастает при выполнении неравенства $\eta \geq (2\varepsilon + 1)/(2\varepsilon + 3)$ пропорционально как постоянной связи α' , так и массе m' (т.е. ε и η). Таким образом, λ_l^s определяет квадрат локальной частоты, возникающей в данной системе. Интенсивность этого локального колебания определяется вычетом в данном полюсе и равна

$$\begin{aligned} \mu_l^s &= \left[1 - \frac{(\eta + 1)(\varepsilon + 1)}{\sqrt{(\eta + 1)[(\eta + 1)(\varepsilon + 2)^2 - 4(\varepsilon + 1)]}} \right] \times \\ &\times \Theta \left(\eta - \frac{2\varepsilon + 1}{2\varepsilon + 3} \right). \quad (10) \end{aligned}$$

Локальная фононная плотность колебаний примесного атома на конце цепочки как функция квадрата частоты и параметров локального искажения связи и массы имеет вид

$$\begin{aligned} g^s(\lambda, \eta, \varepsilon) &= \frac{1}{\pi} \text{Im} \mathcal{G}_{00}^s(\lambda, \eta, \varepsilon) + \mu_l \delta(\lambda - \lambda_l) = \\ &= \frac{(\lambda_m/8)[(\eta + 1)^2/(\varepsilon + 1)] \sqrt{(\lambda_m - \lambda)/\lambda}}{-\lambda^2\eta + \lambda(\lambda_m/4)[(\eta + 1)/(\varepsilon + 1)] [(\eta + 1)(\varepsilon + 2) - 2] + (\lambda_m^2/16) [(\eta + 1)/(\varepsilon + 1)]^2} + \mu_l \delta(\lambda - \lambda_l). \quad (11) \end{aligned}$$

Отметим, что $\eta = \eta_l$ соответствует появлению корневой особенности локальной плотности $\rho^s(\lambda_m, \eta, \varepsilon) \propto (\lambda_m - \lambda)^{-1/2} \rightarrow \infty$ на верхней границе полосы сплошного спектра.

Локальная плотность колебаний атома цепочки, отстоящего на n межатомных расстояний от свободного конца, выражается как [12]

$$g_n^s(\lambda, \eta, \varepsilon) = g^s(\lambda, \eta, \varepsilon) \tilde{P}_n^2(\lambda, \eta, \varepsilon), \quad (12)$$

где $\tilde{P}_n(\lambda, \eta, \varepsilon)$ — ортогональные полиномы, порождаемые \mathbf{J} -матрицей оператора $\mathbf{L} + \mathbf{\Lambda}^s$ (4).

Из сопоставления (9), (10), (11) с выражениями для квадрата частоты и интенсивности локального колебания, а также для локальной плотности колебаний примесного атома, полученными в [11] для бесконечной

линейной цепочки с примесью замещения, видно, что они переходят друг в друга при замене $2\varepsilon + 1 \rightarrow \varepsilon$ в выражениях (9), (10), (11), т.е. локальные характеристики колебаний примеси на свободном конце соответствуют аналогичным характеристикам примеси замещения вдвое большей массы в бесконечной цепочке. Поэтому дальнейшее исследование этих характеристик мы будем проводить для обеих данных систем одновременно.

Локальные колебания в бесконечной и полубесконечной цепочке

Исследуем поведение локальных колебательных плотностей одноатомной линейной цепочки с взаимодействием ближайших соседей, содержащей примесь замещения или внедрения,

отличие между которыми заключается в том, что в случае примеси внедрения сохраняется прямое взаимодействие между ближайшими соседями примесного атома (рис. 1,б и в соответственно). Как легко видеть, в случае полубесконечной цепочки возможна только примесь замещения. Будем считать, что примесный атом находится в начале координат.

Ближайшие соседи примеси также являются дефектными атомами и образуют вместе с примесью дефектный кластер (трехатомный в бесконечной цепочке и двухатомный — в полубесконечной).

В бесконечной цепочке примесный атом является центром симметрии рассматриваемой системы и пространство атомных смещений H можно представить в виде прямой суммы инвариантных относительно операторов \mathbf{L} и $\mathbf{L} + \mathbf{\Lambda}$ подпространств симметричных и антисимметричных смещений.

Подпространство симметричных (противофазных) смещений является линейной оболочкой, натянутой на векторы

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

Находящийся в центре симметрии примесный атом в данном подпространстве покоится.

Подпространство антисимметричных (синфазных) смещений — линейная оболочка, натянутая на векторы

$$\mathbf{h}_0^{(0)} = |0|1\rangle; \quad \mathbf{h}_n^{(0)} = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} n & 1 \\ -n & 1 \end{vmatrix}. \quad (14)$$

В каждом из этих подпространств оператор \mathbf{L} индуцирует соответственно операторы $\mathbf{L}^{(0)}$ и $\mathbf{L}^{(\pm 1)}$, представленные в виде \mathbf{J} -матриц, матричные элементы которых легко вычислить [11].

Для первых диагональных матричных элементов операторов, индуцированных гриновским оператором в каждом из инвариантных подпространств (функций Грина), получим

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{00}^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon) &= \\ &= \frac{-4\lambda\eta + \lambda_m [(1+\eta)/(1+\varepsilon)][(1+\eta)(2+\varepsilon) - 2]}{R^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon)} + \\ &+ \lambda_m \frac{(1+\eta)^2}{1+\varepsilon} \frac{\sqrt{(\lambda - \lambda_m)/\lambda}}{R^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon)}, \quad (15) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} R^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon) &= -4\lambda^2\eta + \lambda\lambda_m \left(\frac{1+\eta}{1+\varepsilon} \right) \times \\ &\times [(1+\eta)(3+\varepsilon) - 4] + \lambda_m^2 \left(\frac{1+\eta}{1+\varepsilon} \right)^2 \end{aligned}$$

(после замены $\varepsilon \rightarrow 2\varepsilon + 1$ данное выражение переходит в (7)) и

$$\mathcal{G}_{00}^{(\pm 1)}(\lambda, \eta) = \frac{4}{\lambda_m} \frac{[2\lambda - \lambda_m(1+\eta) + 2Z(\lambda)\sqrt{\lambda|\lambda - \lambda_m|}]}{R^{(\pm 1)}(\lambda, \eta)}, \quad (16)$$

где

$$R^{(\pm 1)}(\lambda, \eta) = -4\lambda\eta + \lambda_m(1+\eta)^2.$$

Величина $Z(\lambda)$ определена в (6).

Исходя из вида базисных векторов (13) и (14), легко убедиться, что функция Грина $\mathcal{G}_{00}^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon)$ будет одинаковой для примесей замещения и внедрения, а функция $\mathcal{G}_{00}^{(\pm 1)}(\lambda, \eta, \beta)$ для случая примеси внедрения может быть получена из (16) заменой $\eta \rightarrow \eta + \beta/\alpha$.

Корни функций $R^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon)$ и $R^{(\pm 1)}(\lambda, \eta)$ — соответственно $\lambda_l^{(0)}$ и $\lambda_l^{(\pm 1)}$ — лежат за пределами полосы сплошного спектра:

$$\begin{aligned} \lambda_l^{(0)} &= \frac{\lambda_m}{8} \left(\frac{1+\eta}{1+\varepsilon} \right) \left\{ 3 + \varepsilon - \frac{1-\varepsilon}{\eta} + \right. \\ &+ \left. \frac{3+\varepsilon}{\eta} \left((1+\eta) \left[\left(\frac{1-\varepsilon}{3+\varepsilon} \right)^2 + \eta \right] \right)^{1/2} \right\} > \lambda_m; \quad (17) \end{aligned}$$

$$\lambda_l^{(\pm 1)} = \lambda_m \frac{(1+\eta)^2}{4\eta} > \lambda_m. \quad (18)$$

Они определяют квадраты частот локальных колебаний, а вычеты в них — интенсивности этих колебаний (соответственно $\mu_0^{(0)}$ и $\mu_0^{(\pm 1)}$):

$$\text{rés}_{\lambda = \lambda_l^{(0)}} \mathcal{G}_{00}^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon) \equiv \mu_0^{(0)} \theta \left(\eta - \frac{\varepsilon}{2+\varepsilon} \right), \quad (19)$$

$$\mu_0^{(0)} = \mu_0^{(0)}(\eta, \varepsilon) = 1 - (1+\varepsilon) \left[\frac{1+\eta}{\eta(3+\varepsilon)^2 + (1-\varepsilon)^2} \right]^{1/2},$$

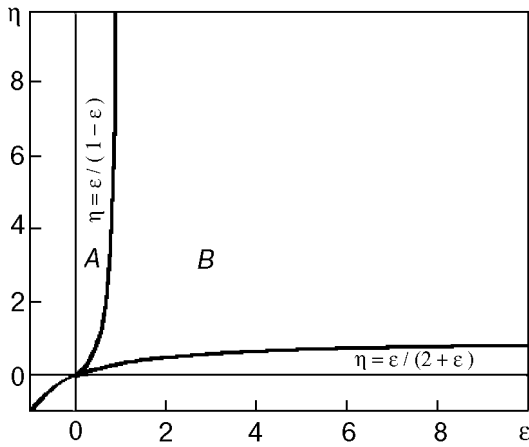


Рис. 2. Область существования локальных колебаний в циклическом подпространстве $H^{(0)}$, порожденном смещением примесного атома ($\eta > \varepsilon/(2 + \varepsilon)$), и ее разбиение на области преимущественной локализации данных колебаний: A — на самой примеси; B — на ее ближайших соседях. Также изображена область $\eta > 1$, в которой существуют локальные колебания в циклическом подпространстве $H^{(\pm 1)}$, порожденном противофазным смещением ближайших соседей примесного атома (примесь в этом подпространстве покоится)

$$\begin{aligned} \text{res}'_{\lambda = \lambda_i^{(\pm 1)}} G_{00}^{(\pm 1)}(\lambda, \eta) &= \mu_0^{(\pm 1)} \theta(\eta - 1) = \\ &= \frac{\eta^2 - 1}{\eta^2} \theta(\eta - 1). \end{aligned} \quad (20)$$

Область значений η и ε , при которых интенсивность отлична от нуля, — это область существования локальных колебаний с частотой $\sqrt{\lambda_i^{(i)}}$, т. е. в подпространстве $H^{(\pm 1)}$ локальные колебания возникают при

$$\eta > 1; \quad (21)$$

в подпространстве $H^{(0)}$ — при

$$\eta > \frac{\varepsilon}{2 + \varepsilon} \quad (22)$$

(рис. 2). Отметим, что при $\eta > 1$ в рассматриваемой системе независимо от массы примеси возникают два взаимно ортогональных локальных колебания.

При «пороговых» значениях параметров дефекта $\eta = 1$ в подпространстве $H^{(\pm 1)}$ и $\eta > \varepsilon/(2 + \varepsilon)$ в подпространстве $H^{(0)}$ на соответствующей спектральной плотности появляется корневая особенность при $\lambda = \lambda_m$ (рис. 3).

Как было показано в [12–14], интенсивность локального колебания изменяется с ростом атомного номера n как

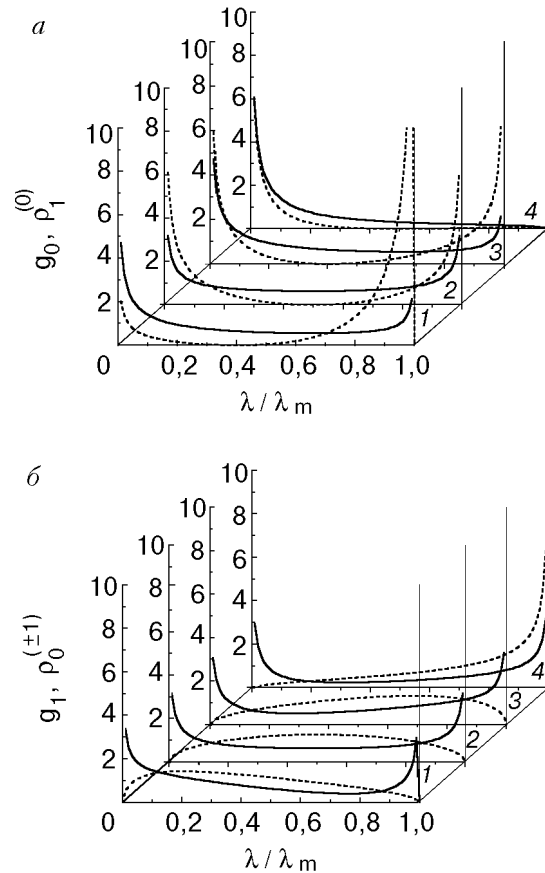


Рис. 3. Локальные и спектральные плотности, характеризующие колебания атомов дефектного кластера для значений параметров дефекта, соответствующих возникновению локальных колебаний в различных подпространствах: функции $g_0(\lambda) \equiv \rho_0^{(0)}(\lambda)$ — сплошные кривые; функции $\rho_1^{(0)}(\lambda)$ — штриховые кривые (а); функции $g_1(\lambda)$ — сплошные кривые; функции $\rho_0^{(\pm 1)}$ — штриховые кривые (б). Кривые 1–3 соответствуют пороговым значениям для возникновения локального колебания в подпространстве $H^{(0)}$ ($\eta = \varepsilon/(2 + \varepsilon)$): $\eta = -1/3$, $\varepsilon = -0,5$ (кривые 1); $\eta = \varepsilon = 0$ (кривые 2); $\eta = 0,2$; $\varepsilon = 0,5$ (кривые 3); $\eta = \varepsilon = 1$ (кривые 4) соответствуют пороговому значению для возникновения локального колебания в подпространстве $H^{(\pm 1)}$ ($\eta = 1$).

$$\mu_n = \mu_0 P_n^2(\lambda, \eta, \varepsilon). \quad (23)$$

Как известно (см., например, [8]), вклад локальной частоты в среднеквадратичное смещение атома пропорционален интенсивности локального колебания, поэтому затухание амплитуды локального колебания по мере удаления от дефекта будет происходить пропорционально $P_n(\lambda, \eta, \varepsilon)$.

Примесный атом не принимает участия в движениях, входящих в циклическое подпространство $H^{(\pm 1)}$, поэтому отношение амплитуд колебаний на локальной частоте $\sqrt{\lambda_i^{(\pm 1)}}$ атомов с номерами m и n равно

$$\frac{u_m}{u_n} = \left| \frac{P_{m-1}^{(\pm 1)}(\lambda_l^{(\pm 1)}, \eta)}{P_{n-1}^{(\pm 1)}(\lambda_l^{(\pm 1)}, \eta)} \right|.$$

Легко убедиться, что значения $P_n^{(\pm 1)}(\lambda_l^{(\pm 1)}, \eta) = 1/\eta^n$, т.е. в области существования локальных колебаний для циклического подпространства $H^{(\pm 1)}$ (при $\eta > 1$) образуют бесконечную убывающую геометрическую прогрессию, и в данном подпространстве амплитуда локальных колебаний экспоненциально затухает по мере удаления от дефекта. Сумма интенсивностей локальных колебаний на всех атомах равна

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mu_n^{(\pm 1)}(\eta) = 1, \quad (24)$$

что согласуется с известными формулами для изменения примесью полного фононного спектра кристалла при наличии локальных колебаний (см., например, [8, 15–20]).

Аналогично в циклическом подпространстве $H^{(0)}$, порожденном смещением самого примесного атома, изменение амплитуды колебаний атома с номером $n \geq 0$ на локальной частоте $\sqrt{\lambda_l^{(0)}}$ можно записать как

$$\frac{u_m}{u_n} = \left| \frac{P_m^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta)}{P_n^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta)} \right|.$$

С помощью метода математической индукции можно доказать, что начиная с $n = 1$ значения полиномов $[P_n^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]^2$ образуют геометрическую прогрессию. Докажем, что

$$\sum_{n=0}^{\infty} \mu_n^{(0)}(\eta, \varepsilon) \equiv \mu_0^{(0)}(\eta, \varepsilon) \times \sum_{n=0}^{\infty} [P_n^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]^2 = 1, \quad (25)$$

откуда, в частности, получим, что знаменатель прогрессии $[P_2^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)/P_1^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]^2 < 1$.

Преобразуем левую часть (25):

$$\mu_0^{(0)}(\eta, \varepsilon) \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} [P_n^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]^2 \right\} =$$

$$= \mu_0^{(0)}(\eta, \varepsilon) \left\{ 1 + \frac{[P_1^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]^4}{[P_1^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]^2 - [P_2^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]^2} \right\},$$

используем тождество

$$[P_1^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]^2 \equiv \frac{P_1^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon) + P_2^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)}{2} \sqrt{2(1 + \varepsilon)},$$

в справедливости которого легко убедиться простой подстановкой (17) в рекуррентные соотношения (4), и представим (25) в виде

$$\begin{aligned} & \mu_0^{(0)}(\eta, \varepsilon) [P_1^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]^2 \sqrt{2(1 + \varepsilon)} = \\ & = 2 [1 - \mu_0^{(0)}(\eta, \varepsilon)] [P_1^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon) - P_2^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]. \end{aligned} \quad (26)$$

Справедливость (26) легко подтверждается с помощью (4), (17) и (20).

Таким образом, за пределами дефектного кластера амплитуды обоих локальных колебаний экспоненциально затухают с ростом n . Внутри этого кластера соотношение между амплитудами $u_0(\lambda_l^{(0)}, T)$ и $u_l(\lambda_l^{(0)}, T)$ будет зависеть от параметров дефекта. Амплитуда локальных колебаний примесного атома будет превышать амплитуду аналогичных колебаний его ближайшего соседа, если

$$[P_1^{(0)}(\lambda_l^{(0)}, \eta, \varepsilon)]^2 < \frac{2}{1 + \varepsilon}, \quad (27)$$

т.е.

$$\begin{aligned} & - \frac{(1 + \eta)(1 - \varepsilon) - 4\eta}{\eta} < \\ & < \frac{1}{\eta} \sqrt{(1 + \eta)[\eta(3 + \varepsilon)^2 + (1 - \varepsilon)^2]} < \\ & < \frac{(1 + \eta)(1 - \varepsilon) + 4\eta}{\eta}. \end{aligned}$$

Левая половина данного неравенства выполняется тождественно, а правая — либо при одновременном выполнении условий

$$\begin{cases} \eta \geq \frac{\varepsilon - 1}{5 - \varepsilon}, \\ \eta > \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon}, \end{cases}$$

либо при

$$\eta < \frac{\varepsilon - 1}{5 - \varepsilon}$$

(разумеется, речь идет только о таких значениях параметров дефекта, при которых локальное колебание в циклическом подпространстве $H^{(0)}$ существует, т. е. $\eta > \varepsilon/(2 + \varepsilon)$).

Данным условиям удовлетворяет область A на рис. 2.

В области B на том же рисунке

$$0 < \frac{\varepsilon}{2 + \varepsilon} < \eta < \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon},$$

т.е. локальное колебание в циклическом подпространстве $H^{(0)}$, порожденном смещением примеси, локализовано главным образом на ближайших соседях.

Напомним, что для подпространства $H^{(0)}$ заменой ε на $2\varepsilon + 1$ мы получим соответствующие результаты для полубесконечной цепочки с примесью на свободном конце, а заменой для подпространства $H^{(\pm 1)}$ η на $\eta + \beta/\alpha$ — результаты для случая примеси внедрения.

Примесные резонансные уровни в полосе сплошного спектра линейной цепочки

Хорошо известно (см., например, [16,17]), что изотопическая примесь не может обусловить возникновение в полосе сплошного спектра линейной цепочки острых резонансных максимумов на плотности состояний (квазилокальных колебаний). Однако такие квазилокализованные на примесном атоме состояния могут возникать при наличии в линейной цепочке примеси, отличающейся от атомов основной решетки не только массой, но и силовым взаимодействием с ближайшими соседями (легкой и слабосвязанной примеси). На возможность такой локализации указывалось, например, в [21], а детальный анализ эволюции локальных плотностей примесного атома в процессе образования таких острых резонансных пиков был проведен в [11]. Однако немалый интерес представляет поведение вблизи такой квазилокальной частоты локальных плотностей и других спектральных характеристик соседних атомов, особенно ближайших соседей, которые вместе с примесью образуют дефектный кластер.

Рассмотрим распределение колебаний по частотам в полосе сплошного спектра нашей системы. Спектральные плотности $\rho^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon)$ и

$\rho^{(\pm 1)}(\lambda, \eta)$ определены в интервале $[0, \lambda_m]$ и равны

$$\rho^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon) = \frac{\lambda_m [(1 + \eta)^2 / (1 + \varepsilon)] \sqrt{(\lambda_m - \lambda) / \lambda}}{4\pi R^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon)}; \quad (28)$$

$$\rho^{(\pm 1)}(\lambda, \eta) = \frac{8 \sqrt{\lambda(\lambda_m - \lambda)}}{\pi \lambda_m R^{(\pm 1)}(\lambda, \eta)}. \quad (29)$$

Локальные плотности $g_n(\lambda, \eta, \varepsilon)$ можно теперь легко получить с помощью формулы

$$\begin{aligned} g_n(\lambda, \eta, \varepsilon) = & \\ & = \left[\rho^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon) + \mu_0^{(0)} \theta \left(\eta - \frac{\varepsilon}{2 + \varepsilon} \right) \delta(\lambda - \lambda_l^{(0)}) \right] \times \\ & \times [P_n^{(0)}]^2(\lambda, \eta, \varepsilon) + \\ & + \left[\rho^{(\pm 1)}(\lambda, \eta) + \mu_0^{(\pm 1)} \theta(\eta - 1) \delta(\lambda - \lambda_l^{(\pm 1)}) \right] [P_{n-1}^{(\pm 1)}]^2(\lambda, \eta). \end{aligned} \quad (30)$$

Так, например, несложно проверить и строго доказать с помощью метода математической индукции, что для любого n

$$\begin{aligned} g_n(\lambda, 0, 0) = \rho^{(0)}(\lambda, 0, 0) = \\ = \frac{\rho_n^{(0)}(\lambda, 0, 0) + \rho_{n-1}^{(\pm 1)}(\lambda, 0)}{2} = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\lambda(\lambda_m - \lambda)}}, \end{aligned}$$

т.е. плотности состояний идеальной линейной цепочки.

На рис. 4 представлена эволюция с изменением параметров дефекта локальных плотностей и входящих в них спектральных плотностей для атомов примесного кластера. Для всех кривых $\eta = \varepsilon < 0$, и на примесном атоме постепенно формируется локализованное колебание, значение квадрата частоты которого λ^* находится приблизительно посередине полосы разрешенных значений λ .

На рис. 4,а изображены локальные плотности примесного атома $g_0(\lambda, \eta, \varepsilon) \equiv \rho_0^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon)$ (сплошные кривые) и спектральные плотности $\rho_1^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon)$ (штриховые кривые). Видно, что по мере формирования острого резонансного пика с полушириной $\Delta\lambda < \lambda^*$ узел спектральной плотности $\rho_1^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon)$ ($\lambda^* = a_0^{(0)}$ — корень полинома $P_1^{(0)}(\lambda, \eta, \varepsilon)$, или, как следует из (4), квадрат эйнштейновской частоты в данном циклическом подпространстве) попадает в эту

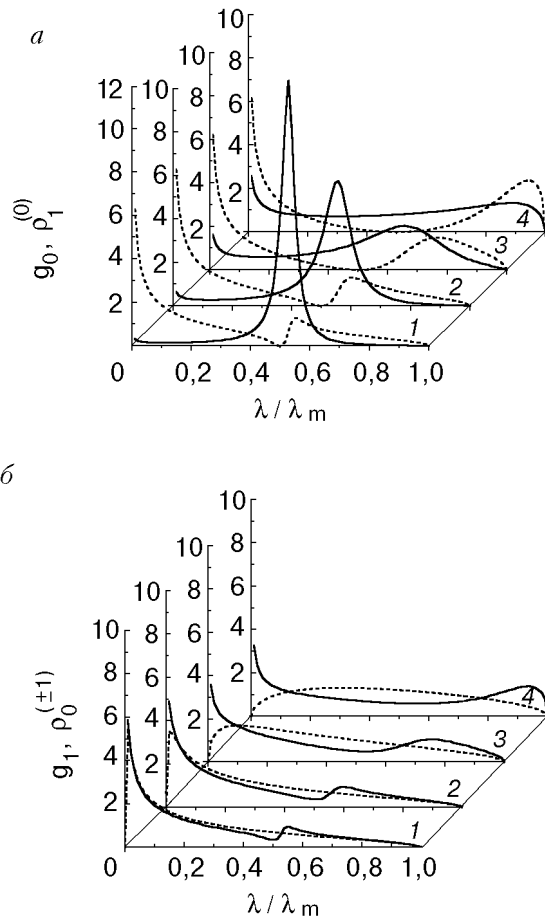


Рис. 4. Локальные и спектральные плотности, характеризующие колебания атомов дефектного кластера для значений параметров дефекта, соответствующих возникновению локализованных на легкой слабосвязанной примеси колебаний с частотами, лежащими в полосе сплошного спектра линейной цепочки: функции $g_0(\lambda) \equiv \rho_0^{(0)}(\lambda)$ – сплошные кривые; функции $\rho_1^{(0)}(\lambda)$ – штриховые кривые (а); функции $g_1(\lambda)$ – сплошные кривые; функции $\rho_0^{(\pm 1)}(\lambda)$ – штриховые кривые (б); $\eta = \epsilon = -0,9$ (кривые 1); $\eta = \epsilon = -0,8$ (кривые 2); $\eta = \epsilon = -0,5$ (кривые 3); $\eta = \epsilon = -0,2$ (кривые 4).

полуширину. Это легко понять, так как с усилением локализации квазилокальная частота становится ближе к эйнштейновской. Следовательно, при $\lambda \in [\lambda^* - \Delta\lambda, \lambda^* + \Delta\lambda]$ колебания ближайших соседей примеси и примесного атома практически не взаимодействуют. Этим и обусловлена локализация колебаний на частотах, при которых для идеальной системы отнюдь не мала не только полная фононная плотность, но и спектральная плотность в соответствующем инвариантном подпространстве. Локальные плотности ближайших соседей $g_1(\lambda, \eta, \epsilon)$ (сплошные кривые на рис. 4, б) определяются главным образом колебаниями из ортогонального к смещениям примеси циклического подпространства $H^{(\pm 1)}$ (соответствующие

спектральные плотности $\rho_0^{(\pm 1)}(\lambda, \eta)$ изображены там же штриховыми линиями).

Зависимость пороговых значений параметров дефекта от расстояния между примесью и конечным атомом цепочки

В предыдущих разделах было показано, что в полуограниченной цепочке с примесью замещения на свободном конце возможно образование только одной локальной частоты (9), в то время как присутствие той же примеси «в глубине» цепочки порождает две локальные частоты, (17) и (18). Это существенное обстоятельство отражает разницу в количестве и характере типов независимых колебаний, в которых может принимать участие атом примеси, находясь под и на поверхности (иначе говоря, речь идет о числе возможных ортогональных смещений внутри дефектного кластера, порождающих различные подпространства смещений). Так, в бесконечной цепочке независимые колебания атомов, на которые влияет наличие примеси, отвечают общей схеме разбиения на подпространства (13), (14). Одно из подпространств соответствует смещениям примеси и, далее, синфазным смещениям ее ближайших соседей, другое – противофазным смещениям ближайших соседей примеси при неподвижном примесном атоме. Очевидно, ситуация не должна меняться принципиально до тех пор, пока примесь не оказывается в роли поверхностного атома, у которого имеется всего один сосед. В этом случае число независимых (ортогональных) типов колебаний, в которых может участвовать атом примеси, сокращается до одного. Этот тип колебаний определяется смещением самой примеси и соответствует порождающему вектору $\mathbf{h}_0^s = |01\rangle$ в подпространстве H^s .

Подтверждение этих рассуждений конкретным расчетом с получением точных аналитических выражений для колебательных характеристик модели двухпараметрической примеси замещения, отстоящей на произвольное число межатомных расстояний от «поверхности» цепочки (следуя общей схеме применения метода **J**-матриц, как это было сделано в предыдущем разделе), вызывает, вообще говоря, непреодолимые трудности вычислительного характера. Это связано с необходимостью учета взаимного расположения далеких друг от друга дефектов решетки, т.е. с произвольно большим рангом матрицы возмущения. Некоторая модификация упомянутой схемы позволяет, однако, в аналитическом виде получить точную

зависимость пороговых значений параметров, описывающих дефект, от «глубины» расположения данной примеси под поверхностью. Поведение этой зависимости, как будет показано, хорошо согласуется со сделанными выше выводами.

Рассмотрим полуограниченную одноатомную цепочку, которая содержит примесь замещения, отличающуюся от атомов матрицы как массой, так и взаимодействием с ближайшим окружением. Пусть данную примесь отделяет от поверхности k атомов основной решетки (рис. 1,з). Полную систему базисных векторов в единственном для полубесконечной цепочки подпространстве получаем, выбирая в качестве порождающего вектора смещение крайнего атома. Якобиева матрица динамического оператора для данной системы будет иметь следующие элементы:

$$(\mathbf{L} + \mathbf{\Lambda})_{ik} = \begin{bmatrix} a/2 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ b & a & b & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & b & a & b & \dots & \dots \\ \dots & \dots & b & \tilde{D}_k(\eta, \varepsilon) & b & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & b & a & b & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}, \quad (31)$$

где a и b — предельные значения, к которым стремятся элементы якобиевой матрицы a_n и b_n с ростом номера n (в нашем случае $a = \lambda_m/2$; $b = \lambda_m/4$). Якобиева матрица, элементы которой отвечают искажению массы и силовых постоянных на расстоянии k атомов от края цепочки, обозначена как

$$\tilde{D}_k(\eta, \varepsilon) = \begin{bmatrix} \tilde{a}_{k-1}(\eta) & \tilde{b}_k(\eta, \varepsilon) & 0 \\ \tilde{b}_k(\eta, \varepsilon) & \tilde{a}_k(\eta, \varepsilon) & \tilde{b}_{k+1}(\eta, \varepsilon) \\ 0 & \tilde{b}_{k+1}(\eta, \varepsilon) & \tilde{a}_{k+1}(\eta) \end{bmatrix}, \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{k-1}(\eta) &= \tilde{a}_{k+1}(\eta) = a \left(1 + \frac{\eta}{2} \right), \\ \tilde{b}_{k-1}(\eta, \varepsilon) &= \tilde{b}_k(\eta, \varepsilon) = b \frac{1 + \eta}{\sqrt{1 + \varepsilon}}, \end{aligned} \quad (33)$$

$$\tilde{a}_k(\eta, \varepsilon) = a \left(\frac{1 + \eta}{1 + \varepsilon} \right).$$

Используя выражение для функции Грина системы (3) в соответствии с описанным выше механизмом отщепления дискретных состояний от

полосы сплошного спектра, можно записать уравнение, которому должны удовлетворять пороговые комбинации значений параметров дефекта $\{\eta, \varepsilon\}_d$:

$$\begin{aligned} \tilde{R}(\lambda_m) &\equiv \tilde{P}_{k+1}(\lambda_m, \eta, \varepsilon) - \\ &- \tilde{b}_k(\eta, \varepsilon) \tilde{P}_k(\lambda_m, \eta, \varepsilon) K_\infty(\lambda_m) = 0. \end{aligned} \quad (34)$$

В области решетки, не затронутой непосредственным взаимодействием с дефектом, полиномы $P_n(\lambda)$ на верхней границе непрерывного спектра цепочки имеют простой вид:

$$P_n(\lambda_m) = 2n + 1,$$

где $n = 0, 1, \dots, k-1$. Однако начиная с $n = k$ функции $P_n(\lambda_m)$ становятся зависящими от параметров дефекта, принимая все более громоздкий вид:

$$\begin{aligned} \tilde{P}_k(\lambda_m, \eta, \varepsilon) &= \frac{\sqrt{\varepsilon + 1}}{\eta + 1} [2k(1 - \eta) + (1 + \eta)]; \\ \tilde{P}_{k+1}(\lambda_m, \eta, \varepsilon) &= \frac{2}{(\eta + 1)^2} (2\varepsilon + 1 - \eta) \times \\ &\times [2k(1 - \eta) + (1 + \eta)] - (2k - 1); \\ \tilde{P}_{k+2}(\lambda_m, \eta, \varepsilon) &= \frac{2}{(\eta + 1)^2} \{(2 - \eta)(2\varepsilon + 1 - \eta) \times \\ &\times [2k(1 - \eta) + (1 + \eta)]\} - 2k(3 - 2\eta) + (1 - 2\eta). \end{aligned} \quad (35)$$

Поэтому выражение (34) упрощается:

$$\tilde{R}(\lambda_m) = \tilde{P}_{n+2}(\lambda_m) - \tilde{P}_{n+1}(\lambda_m). \quad (36)$$

Подстановка (35) в (36) дает возможность получить зависимость порогового значения параметра связи дефекта от расстояния примеси до «поверхности», т.е. до крайнего атома цепочки, соответствующего $n = 0$, как решение уравнения

$$\begin{aligned} \eta^2 [4k(\varepsilon + 2) - (2\varepsilon + 3)] - \\ - 2\eta[4k(\varepsilon + 1) + 1] + [4k\varepsilon + (2\varepsilon + 1)] = 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Таким образом, окончательно получаем

$$\eta_{1,2}(k, \varepsilon) = \frac{4k(\varepsilon + 1) + 1 \pm 2\sqrt{4k^2 + (\varepsilon + 1)^2}}{4k(\varepsilon + 2) - (2\varepsilon + 3)}. \quad (38)$$

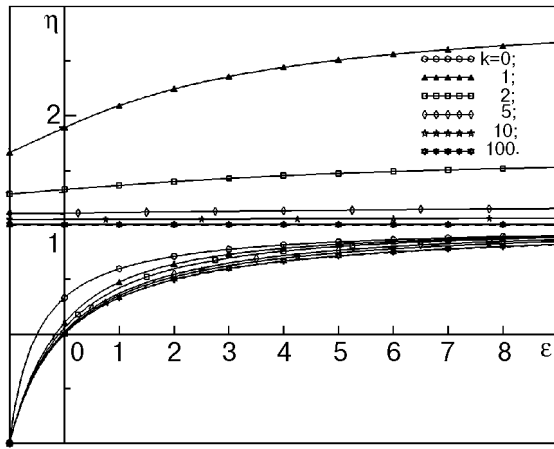


Рис. 5. Эволюция пороговых значений параметра $\eta_{1,2}(k, \epsilon)$ с удалением атома примеси от «поверхности».

Анализируя предельные случаи задачи — примесь в роли поверхностного атома ($k \rightarrow 0$) и примесь в бесконечной цепочке ($k \rightarrow \infty$),

$$\lim_{k \rightarrow 0} \eta_{1,2}(k, \epsilon) = \begin{cases} -1 \\ 1 + 2\epsilon \\ 2\epsilon + 3 \end{cases} \quad (39)$$

и

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \eta_{1,2}(k, \epsilon) = \begin{cases} 1 \\ \epsilon \\ \epsilon + 2 \end{cases} \quad (40)$$

соответственно, нетрудно видеть, что замещение примесью крайнего атома цепочки представляет собой единственный случай существования в системе только одной локальной частоты во всем диапазоне изменения $\{\eta, \epsilon\}$. Решение $\eta = -1$ соответствует нефизической области отрицательной силовой постоянной связи $\eta < -1$ ($\alpha' < 0$), что дает возможность не рассматривать данное значение в качестве реального «порога», обеспечивающего появление дискретного состояния.

На рис. 5 представлена эволюция пороговых значений параметра $\eta_{1,2}(k, \epsilon)$ с удалением атома примеси от «поверхности». Оказывается, что в предельном случае (40) пороговые кривые асимптотически стремятся к зависимостям, характерным для примеси в бесконечной цепочке.

Совпадение (39), (40) с аналогичными пороговыми соотношениями, полученными для подпространств $H^{(0)}$, $H^{(\pm 1)}$ и H^{ξ} , подтверждает корректность проведенного выше анализа.

Итак, в настоящей работе с помощью метода **J**-матриц показано, что предложенная точно решаемая модель примеси внедрения

(замещения) в линейной цепочке обнаруживает большое разнообразие особенностей («пороговая» локализация колебаний за пределами сплошного спектра, формирование квазилокальных резонансных максимумов плотности колебаний в зоне разрешенных частот, эффект «перераспределения» амплитуды колебаний на дискретных частотах между атомами дефектного кластера и т. д.), характерных для кристаллов больших размерностей. В последнем случае, однако, получение аналогичных характеристик фоннного спектра представляет известные вычислительные трудности, преодолимые только с помощью численного счета.

Теоретическое и экспериментальное изучение как систем пониженной размерности, так и влияния нарушений кристаллической регулярности на физические свойства твердых тел всегда занимали видное место в тематике Института низких температур. Именно во ФТИНТе более 30-ти лет назад В. И. Пересада был предложен метод якобиевых матриц, развитие которого показало его исключительную эффективность для теоретического расчета систем с нарушениями кристаллической регулярности. Эта тематика входила в сферу научных интересов директора института Б. И. Веркина, который активно поддерживал деятельность по созданию и развитию новых методов исследования, и ФТИНТ дал науке много совершенных и оригинальных методик.

Поэтому авторам особенно приятно посвятить эту работу памяти основателя ФТИНТ академика Бориса Иеремиевича Веркина.

1. Р. Ланно, Ж. Бургуэн, *Точечные дефекты в полупроводниках*, Мир, Москва (1984).
2. *Строение металлических твердых растворов*. Сб. научных трудов. Металлургия, Москва (1966).
3. Г. Вертхейм, А. Хаусман, *Электронная структура точечных дефектов*, Мир, Москва (1977).
4. С. А. Melendres, V. A. Maroni, A. Narayanasami, and R. W. Siegel, *J. Mater. Res.* **4**, 1246 (1989).
5. Y. Kanemitsu, K. Suzuki, Y. Nakayoshi, and Y. Masumoto, *Phys. Rev.* **B46**, 3916 (1992).
6. *Electronic Properties of Inorganic Quasi-one-dimensional Compounds*. Part I, *Experiment*, Pierre Monceau (ed.), D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland (1985).
7. R. A. Klemm, in: *Electronic Properties of Inorganic Quasi-one-dimensional Compounds*. Part II, Pierre Monceau (ed.), D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland (1985), p. 195.
8. В. И. Пересада, в сб.: *Физика конденсированного состояния*, ФТИНТ АН УССР, Харьков (1968), с. 172.
9. В. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, В. С. Боровиков, *ФНТ* **1**, 461 (1975).
10. R. Haydock, in: *Solid State Physics*, 35 H. Ehrenreich, F. Scitz, and D. Turnbull (eds.), Academic Press, New York (1980), p. 129.

11. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **20**, 586 (1994).
12. М. А. Мамалуй, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФТТ* **38**, 3683 (1996).
13. М. А. Мамалуй, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **24**, 773 (1998).
14. М. А. Мамалуй, Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, *ФНТ* **25**, 72 (1999).
15. I. M. Lifshits, *Ново Сит. Suppl.* **3**, 716 (1956).
16. А. А. Марадуин, Э. Монролл, Дж. Вейсс, *Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении*, Мир, Москва (1965).
17. А. М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Вншшкола, Харьков (1988).
18. Г. Лейбфрид, П. Бройер, *Точечные дефекты в металлах*, Мир, Москва (1981).
19. Х. Бетгер, *Принципы динамической теории решетки*, Мир, Москва (1986).
20. А. П. Жернов, Н. А. Черноплеков, Э. Мрозан, *Металлы с немагнитными примесными атомами*, Энергоатомиздат, Москва (1992).
21. Ю. В. Скрипник, *Электронные и фононные спектры низкотемпературных кристаллов с примесными состояниями большого радиуса*, Автореф. дисс. канд. физ.-мат. наук, Киев, Институт металлофизики НАН Украины (1992).

Localization of vibrations nearly the impurity atoms in semi-infinite and infinite linear chains

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

For a semi-infinite linear chain with an end impurity and for an infinite linear chain with an interstitial or substitutional impurity (a triatomic defective cluster in the general case), exact analytical expressions are derived for local densities of atoms of the system in relation to the distance to a defect and to the defect parameters (variations in mass and force constants). The defect parameter dependences of the conditions for formation of local vibrations and of the amplitudes of vibrations of these frequencies (i.e the character their damping) are determined for different atoms of the system. Exact analytical expressions which determine the threshold values of the parameters as a function of separation between impurity atom and end of the chain are derived and analysed.