

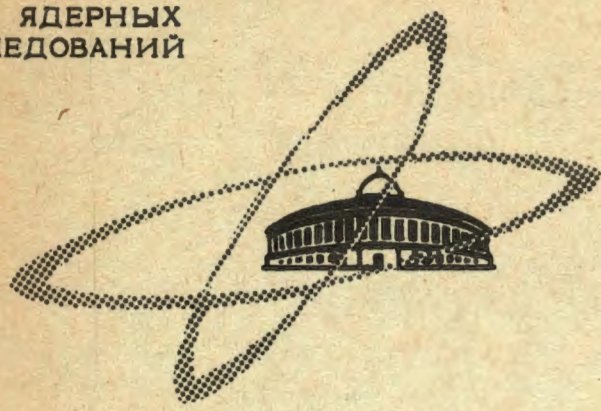
30/IX 68

17-182

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 4031



ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

К. Парлиньски

ОБ ИЗМЕНЕНИИ
СИЛОВЫХ ПОСТОЯННЫХ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ

1968

P4 - 4031

7494/2 нр.

К. Парлиньски

ОБ ИЗМЕНЕНИИ
СИЛОВЫХ ПОСТОЯННЫХ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ

Направлено в ЖЭТФ

Объединенный институт
ядерных исследований
ЕМЕЛЮТЕНА

Введение

Известно, что введение легкого примесного атома в кристаллическую решетку может привести к возникновению добавочных локальных частот, расположенных выше максимальной частоты спектра решетки (см. напр. ^{/1/}). Как показано в работе Кагана и Иосилевского ^{/2/}, обнаружение локальных частот возможно при помощи неупругого рассеяния нейтронов. Ряд экспериментальных работ по неупругому рассеянию нейтронов ^{/3-6/} показывает, что в реальных кристаллах энергия локальных колебаний отличается от теоретического значения, полученного из расчетов, в которых примесь считалась изотопической. Эффект этот связан с изменением силовых констант примесного атома.

В этой работе изучается поведение легкого примесного атома, находящегося в узле кристаллической решетки, и изменение его силовых постоянных за счет сильного ангармонизма. Известно, что амплитуда колебаний примесного атома больше амплитуды колебаний основных атомов, поэтому ангармонические эффекты проявляются значительно раньше для примесного атома, чем для атомов основной решетки.

Метод, позволяющий учесть ангармонические эффекты высших порядков в кристаллах, развит в работе ^{/7/}. В настоящей работе мы применяем псевдогармоническое приближение. В этом приближении силовые постоянные вычисляются с помощью самосогласованного потенциала и зависят от температуры. Учет затухания колебаний и дополнительной перенормировки энергий фононов за счет процессов распада приводит к некоторым изменениям полученных значений параметров, но этих эффектов мы здесь рассматривать не будем.

Для простоты ограничиваемся рассмотрением одномерной цепочки с одним примесным атомом, масса которого меньше массы основных атомов, обладающим затравочным потенциалом таким же, как атомы основной решетки. Будем рассматривать только взаимодействие ближайших соседей. Учет ангармонических эффектов приведет к перенормировке силовой константы примесного атома, перенормировке энергий локальной частоты и изменению межуатомного расстояния около примеси.

1. Псевдогармоническое приближение

Псевдогармоническое приближение учитывает перенормировку энергий фононов в самосогласованном поле всех остальных фононов. Это приближение соответствует первому порядку теории возмущений для массового оператора, в котором, однако, учитывается вклад от ангармонизма всех порядков. В этом приближении в отличие от гармонического силовые постоянные являются вторыми производными некоторого самосогласованного потенциала. Этот потенциал находится путем усреднения затравочного потенциала с функцией $e^{-\frac{x^2}{2}}$ по области средних отклонений атомов из положения равновесия.

Спектр частот колебаний одномерной решетки с примесями определяется полюсами функции Грина $G_{nn'}(\omega)$, которая в псевдогармоническом приближении находится из решения системы следующих уравнений^{/7-9/}:

$$\sum_m \{ M_m \omega^2 \delta_{nm} - F_{nm} \} G_{mn'}(\omega) = \delta_{nn'} \quad (1.1)$$

$$F_{nm} = \begin{cases} \left. \frac{\partial^2 \phi(R_n - R_m)}{\partial R_n \partial R_m} \right|_{\substack{R_n = n \\ R_m = m}} & n \neq m \\ - \sum_{m' \neq n} F_{nm'} & n = m \end{cases} \quad (1.2)$$

$$\bar{\phi}(R_n - R_m) = \langle \phi(R_n - R_m) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} \phi(R_n - R_m + x \sqrt{\langle (u_n - u_m)^2 \rangle}) \quad (1.3)$$

$$\langle (u_n - u_m)^2 \rangle = \langle u_n^2 \rangle + \langle u_m^2 \rangle - 2 \langle u_n u_m \rangle \quad (1.4)$$

$$\langle u_n u_m \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{e^{\frac{\omega}{\theta}} - 1} \{-2 \operatorname{Im} G_{nm}(\omega + i\eta)\}, \quad (1.5)$$

где M_m — масса m -го атома,

F_{nm} — силовая постоянная,

$\langle (u_n - u_m)^2 \rangle$ — средний квадрат относительного смещения.

Система (1.1) + (1.5) является самосогласованной: вычисление потенциала (1.3) требует знания среднего квадрата смещения (1.4) (1.5), зависящего от спектра решетки (1.1), который, в свою очередь, зависит от силовых постоянных (1.2).

Для упрощения расчетов в качестве затравочного потенциала взаимодействия выберем потенциал Морза /10/:

$$\phi(R) = D_0 \{ (e^{-2\alpha_0(R-r_0)} - 1)^2 - 1 \}, \quad (1.6)$$

где D_0 — глубина потенциальной ямы, r_0 — среднее расстояние между атомами в $\theta = 0^\circ \text{K}$, $1/\alpha_0$ — ширина ямы. Самосогласованный потенциал Морза, вычисленный с помощью формулы (1.3), имеет вид:

$$\begin{aligned} \phi_{nm}^*(R) = D_0 [e^{-2\alpha_0(R-r_0)} e^{2\alpha_0 \langle (u_n - u_m)^2 \rangle} - \\ - 2 e^{-\alpha_0(R-r_0)} e^{\frac{\alpha_0^2}{2} \langle (u_n - u_m)^2 \rangle}]. \end{aligned} \quad (1.7)$$

2. Одномерная решетка без примесей

Будем рассматривать линейную цепочку в приближении взаимодействия ближайших соседей. Используя формулы (1.1) + (1.7) и то обстоятельство, что функция Грина зависит только от разницы индексов $(m-n)$, получаем следующую систему самосогласованных уравнений /7,8/:

$$\omega_k^2(\theta) = \omega_L^2(\theta) \sin^2 \frac{k \ell_0}{2} \quad (2.1)$$

$$\omega_L^2(\theta) = \frac{4F(\theta)}{M} \quad (2.2)$$

$$F(\theta) = D_0 a_0^2 e^{-\alpha_0^2 \bar{u}_0^2} \quad (2.3)$$

$$\bar{u}_0^2 = \langle (u_n - u_{n-1})^2 \rangle = \frac{1}{2NF(\theta)} \sum_k \omega_k^2(\theta) \operatorname{cth} \frac{\omega_k(\theta)}{2\theta}, \quad (2.4)$$

где ℓ_0 — среднее расстояние между ближайшими соседями.

ℓ_0 определяется из равенства нулю первой производной самосопряженного потенциала (1.3). При нулевом внешнем натяжении получаем:

$$\ell_0 = r_0 + \frac{3}{2} a_0 \bar{u}_0^2. \quad (2.5)$$

Система уравнений (2.1) + (2.4) позволяет найти средний квадрат смещения \bar{u}_0^2 как функцию температуры, и тем самым найти температурную зависимость силовой постоянной (2.3), спектра (2.1) и междоузельного расстояния (2.5).

Фурье-образ функции Грина этой системы имеет простой вид /8/:

$$G_{mn}(\omega) = \frac{1}{NM} \sum_k e^{ik\ell_0(m-n)} \frac{1}{\omega^2 - \omega_k^2(\theta)} = \quad (2.6)$$

$$= \frac{1}{NM} \sum_k \cos k\ell_0(m-n) \frac{1}{\omega^2 - \omega_k^2(\theta)}.$$

3. Линейная цепочка с примесным атомом замещения

Пусть в линейной цепочке атом, находящийся в узле $n = 0$, замещается другим атомом с меньшей массой. Будем считать, что взаимодействие примеси с другими атомами имеет вид потенциала Морза (1.7), в общем случае с другими коэффициентами D, r, a . Среднее расстояние между примесью и ближайшим соседним атомом, как и в случае идеальной решетки, получим в виде:

$$\ell = r + \frac{3}{2} a \bar{u}^2, \quad (3.1)$$

где $\bar{u}^2 = \langle (u_0 - u_1)^2 \rangle$ - средний квадрат смещения примесного атома относительно его соседа.

Силовая постоянная между примесным атомом и его соседом является второй производной самосогласованного потенциала (1.7), взятой в точке ℓ (3.1).

$$f(\theta) = D a^2 e^{-\alpha^2 \bar{u}^2} \quad (3.2)$$

Средняя амплитуда колебаний примесного атома отличается от средней амплитуды колебаний основных атомов за счет различия масс примеси и основных атомов, другого расстояния между примесью и ближайшим соседом $\ell \neq \ell_0$, а также различных коэффициентов D, r, a . Это приводит к другому значению силовой постоянной между примесным атомом и его ближайшим соседом (3.2), а также к другой температурной зависимости этой силовой постоянной.

Значение $f(\theta)$ можно было бы найти, решая систему уравнений (1.1) + (1.4), но значительно проще найти ее относительное изменение

$$\gamma(\theta) = \frac{f(\theta) - F(\theta)}{F(\theta)}. \quad (3.3)$$

Для этого разделим уравнение (3.2) на (2.3) и получим

$$1 + \gamma(\theta) = \frac{D}{D_0} \left(\frac{a}{a_0} \right)^2 e^{-\left(\alpha^2 \bar{u}^2 - \alpha_0^2 \bar{u}_0^2 \right)} \quad (3.4)$$

Выписанное здесь уравнение (3.4) является самосогласованным трансцендентным уравнением относительно $\gamma(\theta)$. Для его решения нужно знать явную зависимость среднего квадрата относительного смещения примесного атома \bar{u}^2 , который, в свою очередь, зависит от $\gamma(\theta)$.

В дальнейшем будем рассматривать только случай, когда потенциал взаимодействия примеси с соседями такой же, как потенциал взаимодействия остальных атомов, т.е. $D = D_0$, $a = a_0$, $r = r_0$. Тогда самосогласованное уравнение принимает вид:

$$1 + \gamma(\theta) = e^{-\alpha_0^2 \left[\bar{u}^2(\epsilon, \gamma) - \bar{u}_0^2 \right]} \quad (3.5)$$

В этом случае деформация решетки около примеси, зависящая от температуры, будет описываться уравнением:

$$l - l_0 = -\frac{3}{2 a_0} \ln(1 + \gamma(\theta)), \quad (3.6)$$

где $\gamma(\theta)$ — решение уравнения (3.5).

4. Средний квадрат колебаний примесного атома \bar{u}^2

Найдем функцию Грина решетки с примесью, выраженную через функцию Грина (2.6) чистого кристалла. Уравнение для функции Грина решетки с примесью /1,7/ в псевдогармоническом приближении, согласно (1.1), можно записать в матричном виде:

$$\bar{L} \cdot \bar{G} = \bar{1} \quad (4.1)$$

Для кристалла без примеси имеем

$$\bar{L}^0 \cdot \bar{g} = \bar{1}, \quad (4.2)$$

где

$$L_{nm}^0 = M \omega^2 \delta_{nm} - F_{nm} \quad (4.3)$$

g_{mn} - функция Грина (2.6).

Элементы матрицы \bar{L} запишем в виде:

$$L_{nm} = L_{nm}^0 - \delta L_{nm}, \quad (4.4)$$

где

$$\delta L_{nm} = \epsilon M \omega^2 \delta_{nm} \delta_{n0} - (F_{nm} - f_{nm})$$

$\epsilon = 1 - \frac{m}{M}$ - дефект массы.

Предполагая, что введение примеси меняет силовые постоянные только ближайших соседей, матрицу возмущения можно записать в виде:

$$\bar{\delta L} = \begin{pmatrix} \lambda_0 + 2\gamma F, & -\gamma F, & -\gamma F, & 0, & \dots \\ -\gamma F, & \gamma F, & 0, & 0, & \dots \\ -\gamma F, & 0, & \gamma F, & 0, & \dots \\ 0, & 0, & 0, & 0, & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

где $\lambda_0 = M \omega^2 \epsilon$. Учитывая (4.1), (4.2) и (4.4), находим функцию Грина кристалла с примесью:

$$\bar{G} = (1 - \bar{g} \cdot \bar{\delta L})^{-1} \cdot \bar{g} \quad (4.6)$$

В дальнейшем нас будут интересовать только функции Грина, соответствующие парам узлов (00), (01), (11). Поэтому можно рассматривать решение (4.6) только для матриц третьего ранга, описывающих примесный атом и прилегающие к нему атомы.

Введем унитарную матрицу

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

и произведем преобразование /11/:

$$T^T \bar{G} T = [T^T (1 - \bar{g} \bar{\delta} L)^{-1} T] \cdot T^T \bar{g} T. \quad (4.8)$$

Тогда

$$T^T \bar{G} T = \begin{pmatrix} G_{00} & \sqrt{2} G_{01} & 0 \\ \sqrt{2} G_{01} & G_{11} + G_{1\bar{1}} & 0 \\ 0 & 0 & G_{11} - G_{1\bar{1}} \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Матрица, $T^T (1 - \bar{g} \bar{\delta} L) T$, которую обозначим через $M(\omega^2)$, принимает квазидиагональный вид:

$$M(\omega^2) = \begin{pmatrix} 1 - [\lambda_0 g_{00} + 2\gamma F(g_{00} - g_{01})] & \sqrt{2}\gamma F(g_{00} - g_{01}) & 0 \\ -\sqrt{2}\lambda_0 g_{10} - \sqrt{2}\gamma F(2g_{10} - g_{11} - g_{1\bar{1}}) & 1 + \gamma F(2g_{10} - g_{11} - g_{1\bar{1}}) & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \gamma F(g_{11} - g_{1\bar{1}}) \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

Условие обращения в нуль детерминанта этой матрицы определяет полюса функции Грина (4.6) и, следовательно, частоты спектра колебаний решетки. Учитывая свойства детерминанта, имеем:

$$\det M(\omega^2) = \det \begin{pmatrix} M_s(\omega^2) & 0 \\ 0 & M_p(\omega^2) \end{pmatrix} = \det M_s(\omega^2) \det M_p(\omega^2) = 0, \quad (4.11)$$

где

$$\det M_s(\omega^2) = 1 + \gamma - M \omega^2 [g_{00}(\epsilon + \gamma) + \gamma(\epsilon - 1)g_{01}]$$

$$\det M_p(\omega^2) = 1 - \gamma F(g_{11} - g_{11}^-). \quad (4.12)$$

При получении (4.12) использовано свойство функции Грина одномерной цепочки /12/:

$$g_{00} - g_{10} = \frac{1}{2F} (M \omega^2 g_{00} - 1)$$

$$2g_{10} - g_{11} - g_{11}^- = \frac{M}{F} \omega^2 g_{01} \quad (4.13)$$

$$2g_{10}g_{01} - g_{00}(g_{11} + g_{11}^-) = \frac{1}{F} g_{01}.$$

Как видно, благодаря преобразованию (4.8) удалось выделить два типа колебаний: колебание типа s , для которого существенно изменение массы — это локализованное в пространстве колебание, в котором, главным образом, участвует примесный атом. Колебание типа p , обусловленное изменением силовых постоянных между примесью и соседним атомом. Примесь в колебаниях p -типа не участвует.

Из (4.8), (4.10) после вычисления обратной матрицы $M^{-1}(\omega^2)$ получим интересующие нас функции Грина:

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon_{00} + \gamma \epsilon_{01}}{\det M_s}, & \frac{\sqrt{2}(\epsilon_{01} + \gamma \epsilon_{01})}{\det M_s}, & 0 \\ \frac{\sqrt{2}(\epsilon_{01} + \gamma \epsilon_{01})}{\det M_s}, & \frac{\epsilon_{11} + \epsilon_{1\bar{1}} + (\frac{M \omega^2 \epsilon}{F} + 2\gamma) \epsilon_{01}}{\det M_s}, & 0 \\ 0, & 0, & \frac{\epsilon_{11} - \epsilon_{1\bar{1}}}{\det M_p} \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Для вычисления среднего квадрата относительного смещения примесного атома выразим $\text{Im}(G_{00} + G_{11} - 2G_{01})$ через элементы матрицы (4.14), используя (4.9) и тождество:

$$\begin{aligned} \text{Im}(G_{00} + G_{11} - 2G_{01}) &= \\ &= \text{Im} \left[G_{00} + \frac{1}{2}(G_{11} + G_{1\bar{1}}) + \frac{1}{2}(G_{11} - G_{1\bar{1}}) - 2G_{01} \right]. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Мнимые части элементов матрицы (4.14), которые равны мнимым частям функций Грина (4.9), находим, раскладывая числитель и знаменатель каждого элемента, т.е. функции Грина (2.6) на действительную и мнимую части. Полученное таким образом явное выражение (4.15) подставляем в спектральное соотношение (1.4).

Для среднего квадрата относительного смещения получаем:

$$\bar{u}^2 = \frac{1}{2NF} \sum_k \omega_k \operatorname{cth} \frac{\omega_k}{2\theta} \left\{ \frac{S(\omega_k^2)}{V_1^2(\omega_k^2) + V_2^2(\omega_k^2)} + \frac{P_k}{W_1^2(\omega_k^2) + W_2^2(\omega_k^2)} \right\} +$$

$$+ \frac{1}{2\omega_{\text{lok}}} \operatorname{cth} \frac{\omega_{\text{lok}}}{2\theta} \frac{R(\omega_{\text{lok}}^2)}{\left| \frac{dV}{d\omega^2}(\omega^2 = \omega_{\text{lok}}^2) \right|},$$

где

$$S(\omega_k^2) = \frac{1}{2} [1 - \epsilon - \cos k\ell_0 (1 + 2\gamma + \epsilon)] + \gamma \frac{m}{M} \left[1 - \frac{\omega_k^2}{\omega_L^2} \frac{M+m}{M} \right]$$

$$V_1(\omega^2) = \begin{cases} (1+\gamma) + \gamma \frac{m}{M} \frac{2\omega^2}{\omega_L^2} & \text{при } 0 \leq \omega^2 \leq \omega_L^2 \\ (1+\gamma) - (\epsilon+\gamma) \sqrt{\frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_L^2}} + \gamma \frac{m}{M} \left[\sqrt{\frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_L^2}} - \frac{2\omega^2}{\omega_L^2} \left(\sqrt{\frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_L^2}} - 1 \right) \right] & \text{при } \omega^2 > \omega_L^2 \end{cases}$$

$$V_2(\omega^2) = \operatorname{sign} \omega (\epsilon + \gamma) \sqrt{\frac{\omega^2}{\omega_L^2 - \omega^2}} -$$

$$- \gamma \frac{m}{M} \frac{\pi \operatorname{sign} \omega}{N} \sum_k \left(1 - \frac{\omega_k^2}{\omega_L^2} \right) \omega_k^2 \delta(\omega^2 - \omega_k^2) \quad (4.17)$$

$$\text{при } 0 \leq \omega^2 \leq \omega_L^2$$

$$R(\omega_{\text{lok}}^2) = \frac{1}{F \omega_L} \left(\omega_{\text{lok}}^2 + \frac{\omega_L^2}{2} \right) \left(\frac{\omega_{\text{lok}}^2}{\sqrt{\omega_{\text{lok}}^2 (\omega_{\text{lok}}^2 - \omega_L^2)}} - 1 \right) +$$

$$+ \frac{(\epsilon - 1) \omega_{\text{Lok}}^2}{2F \sqrt{\omega_{\text{Lok}}^2 (\omega_{\text{Lok}}^2 - \omega_L^2)}} \quad \text{при } \omega_{\text{Lok}}^2 > \omega_L^2 \quad (4.18)$$

$$P_k = \frac{1}{2}(1 + \cos k \ell_0)$$

$$W_1(\omega^2) = 1 + \gamma \left(1 - \frac{2\omega_k^2}{\omega_L^2}\right) \quad \text{при } 0 \leq \omega^2 \leq \omega_L^2$$

$$W_2(\omega^2) = \frac{2 \operatorname{sign} \omega}{\omega_L^2} \gamma \omega \sqrt{\omega_L^2 - \omega^2}$$

(4.19)

$$\text{при } 0 \leq \omega^2 \leq \omega_L^2.$$

Первый член (4.16) описывает вклад колебаний типа \mathbf{v} , второй — типа \mathbf{p} , а последний член учитывает локальное колебание типа \mathbf{v} , которое возникает при частотах выше максимальной частоты ω_L .

Вычисление суммы по k в (4.16) достаточно сложно, так что примем некоторое приближение. Предположим, что масса рассматриваемой примеси намного меньше массы основных атомов $m \ll M$ и отбросим члены порядка $\gamma \frac{m}{M}$. Таким образом, это приближение является удовлетворительным в области очень легкой примеси и дает правильный результат при $m \rightarrow M$, поскольку в этом случае $\gamma \rightarrow 0$. Заметим, что функции (4.19) вычисляются точно.

Частота локального колебания, определяемая из уравнения $V_1(\omega^2) = 0$, в принятом приближении равна

$$\omega_{\text{lok}} = \frac{\omega_L}{\sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon + \gamma}{1 + \gamma}\right)^2}}, \quad (4.20)$$

при условии, что $|\gamma| < \epsilon$. Если относительное изменение силовых постоянных превышает дефект массы, то локальная частота входит в непрерывный спектр.

Подставляя (4.17), (4.19) и значение локальной частоты (4.20) в (4.16), вычислим средний квадрат смещения для двух предельных случаев $\theta \gg \omega_L$ или $\theta \rightarrow 0$. В случае высоких температур, когда $\omega_L \ll \theta$ и $\text{cth } x = \frac{1}{x}$, разница квадратов относительных смещений примесного атома и атома чистой решетки равна:

$$\bar{u}^2 - \bar{u}_0^2 = -\frac{\theta}{F} [L_1(\epsilon, \gamma) + s_1(\epsilon, \gamma) + p_1(\gamma) - 1], \quad (4.21)$$

где

$$L_1(\epsilon, \gamma) = \begin{cases} \frac{(1-\epsilon)(\epsilon+\gamma) \{ 3(1+\gamma)^2 - (\epsilon+\gamma)^2 - (1+\gamma)[(1+\gamma)^2 - (\epsilon+\gamma)^2] \}}{(1+\gamma)[(1+\gamma)^2 - (\epsilon+\gamma)^2]^2} & \text{при } \gamma \geq -\epsilon \\ 0 & \text{при } \gamma < -\epsilon \end{cases}$$

$$s_1(\epsilon, \gamma) = \frac{(1+\epsilon)(1-2\epsilon) + \gamma(1-5\epsilon) - 2\gamma^2}{2(1+\epsilon+2\gamma)^2} \quad (4.22)$$

$$p_1(\gamma) = \frac{1}{2(1+\gamma)}$$

В случае низких температур, когда $\omega_L \gg \theta$ и $\text{cth } x = 1$, имеем:

$$\bar{u}^2 - \bar{u}_0^2 = -\frac{\omega_L(\theta)}{\pi F(\theta)} [L_0(\epsilon, \gamma) + s_0(\epsilon, \gamma) + p_0(\gamma) - 1], \quad (4.23)$$

где

$$L_0(\epsilon, \gamma) = \begin{cases} \frac{\frac{\pi}{2}(1-\epsilon)(\epsilon+\gamma) \{ 3(1+\gamma)^2 - (\epsilon+\gamma)^2 - (1+\gamma)[(1+\gamma)^2 - (\epsilon+\gamma)^2] \}}{[(1+\gamma)^2 - (\epsilon+\gamma)^2]^{3/2}} & \text{при } \gamma \geq -\epsilon \\ 0 & \text{при } \gamma < -\epsilon \end{cases}$$

$$s_0(\epsilon, \gamma) = \frac{1}{[1 + 2\gamma(1-\epsilon)]^2} \left\{ \frac{1-\epsilon}{3} (2 + 7\gamma + 9\gamma^2 + 3\epsilon + 4\epsilon^2 + 11\gamma\epsilon) - \right. \\ \left. - \frac{(\epsilon + \gamma)[(1+\gamma) + (1-\epsilon)(\epsilon + 2\gamma + 2\gamma^2)]}{\sqrt{1 + 2\gamma(1-\epsilon)}} \left[\frac{\pi}{2} - \arctg \frac{\gamma + \epsilon}{\sqrt{1 + 2\gamma(1-\epsilon)}} \right] \right\} \quad (4.24)$$

$$p_0(\gamma) = \frac{1}{4\gamma} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{1-\gamma}{\sqrt{-\gamma}} \ln \left(\frac{1 + \sqrt{-\gamma}}{1 - \sqrt{-\gamma}} \right) \right] \quad \text{при } \gamma < 0.$$

При получении (4.21) и (4.23) использовано приближение $\bar{u}_0^{-2} = \frac{\theta}{F}$, справедливое при $\theta \ll \omega_L$ и приближение $\bar{u}_0^{-2} = \frac{\omega(\theta)}{\pi F(\theta)}$, справедливое при $\theta \ll \omega_L$.

Легко показать, что в высокотемпературном и низкотемпературном пределах получаем правильную аппроксимацию $\bar{u}^2 - \bar{u}_0^{-2} \rightarrow 0$ при $m \rightarrow M$ и $\gamma \rightarrow 0$. В этом случае вклад локального колебания $L_0(\epsilon=0, \gamma=0) = 0$ и $L_1(\epsilon=0, \gamma=0) = 0$. Вклад колебаний типа s и p различный: $s_1(\epsilon=0, \gamma=0) = \frac{1}{2}$, $p_1(\gamma=0) = \frac{1}{2}$, $s_0(\epsilon=0, \gamma=0) = \frac{2}{3}$, $p_0(\gamma=0) = \frac{1}{3}$. Функции $L_1(\epsilon, \gamma)$, $L_0(\epsilon, \gamma)$ являются непрерывными функциями в точке $\gamma = -\epsilon$, но их производные терпят в этой точке скачок. Заметим еще, что функции $s(\epsilon, \gamma) \rightarrow \infty$ при $\gamma \rightarrow -(\frac{1+\epsilon}{2})_+$ и $s_1(\epsilon, \gamma = -\epsilon) = \frac{1}{2}$.

Из формул (4.21) и (4.23) отношение амплитуд колебаний получим в виде:

$$\sqrt{\frac{\bar{u}^2}{\bar{u}_0^{-2}}} = \sqrt{L(\epsilon, \gamma) + s(\epsilon, \gamma) + p(\gamma)}. \quad (4.25)$$

Относительное расстояние между примесным атомом и ближайшим соседом, согласно (2.5) и (3.6), выражается формулой

$$\frac{\rho}{\rho_0} = 1 - \frac{\frac{3}{2} \ln(1+\gamma)}{r_0 a_0 + \frac{3}{2} \bar{u}_0^2} \quad (4.26)$$

5. Решение самосогласованного уравнения

А. Случай высоких температур ($\omega_L \ll \theta$).

Учитывая первый член разложения $\text{cth} \frac{\omega_k}{2\theta} = \frac{2\theta}{\omega_k}$ в выражении (2.4) и используя (2.3), получаем самосогласованное уравнение для чистой одномерной цепочки /8,9/:

$$\frac{D_0}{\theta} y_\theta = e^{y_\theta} \quad (5.1)$$

где

$$y_\theta = a_0^2 \bar{u}_0^2 = -\frac{a_0^2 \theta}{F(\theta)} \quad (5.2)$$

Легко видеть, что это уравнение имеет решения при $\theta < \theta_c = \frac{D_0}{e}$. Выше критической температуры θ_c \bar{u}_0^2 является комплексным, и решетка становится неустойчивой.

Параметр γ , описывающий изменение силовых постоянных примесного атома, является решением уравнения

$$-\frac{F(\theta)}{\theta a_0^2} \ln(1+\gamma) = L_1(\epsilon, \gamma) + s_1(\epsilon, \gamma) + p_1(\gamma) - 1, \quad (5.3)$$

которое следует из (3.5) и (4.21).

На рис.1 представлено решение уравнения (5.3) в зависимости от температуры при нескольких значениях дефекта массы. При этом учтено,

что силовая постоянная основной решетки $F(\theta)$ меняется с температурой согласно (2.3).

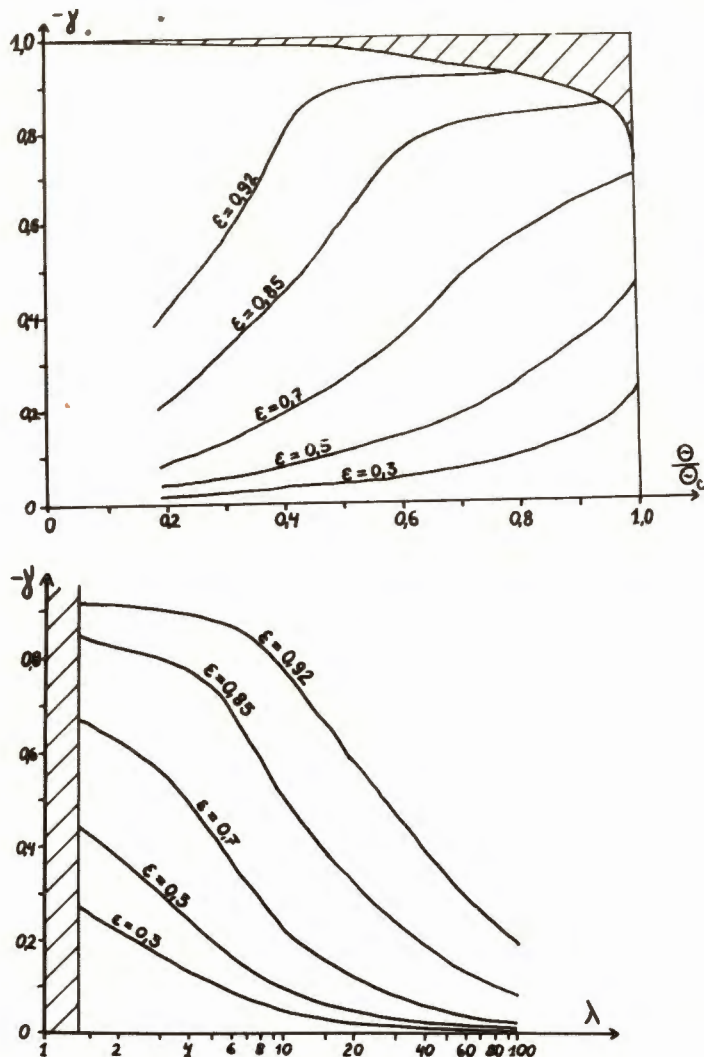


Рис.1. Решение самосогласованных уравнений (5.3) и (5.8). Изменение силовой постоянной примесного атома γ в зависимости от температуры θ (при $\omega_L \ll \theta$) и параметра $\lambda = \frac{\pi\sqrt{D_0 M}}{2a}$ (при $\omega_L \gg \theta$).

θ_c - критическая температура неустойчивости основной решетки. Заштрихованные области - области неустойчивости. При $\omega_L \ll \theta$ (верхний рисунок) неустойчивость наступает в примесном узле, при $\omega_L \gg \theta$ (нижний рисунок) решетка в целом неустойчива в заштрихованной области.

Видно, что изменение силовых постоянных растет с ростом температуры. Для очень легкой примеси ($\epsilon > \epsilon_{кр}$) решетка становится неустойчивой в примесном узле при температуре $\theta_{кр}$, ниже, чем критическая температура основной решетки. При критической температуре $\theta_{кр}$ изменение силовой постоянной равно дефекту массы $\gamma = -\epsilon$. Значение $\theta_{кр}$ находится из уравнения

$$\frac{a_0^2 \theta_{кр}}{F(\theta_{кр})} = -\frac{2}{3} (1-\epsilon) \ln(1-\epsilon). \quad (5.4)$$

При критическом значении дефекта массы $\theta_{кр} = \theta_c$. Используя это условие, легко найти, что $\epsilon_{кр} = 0,72$. При $\epsilon < \epsilon_{кр}$ решетка с примесью устойчива вплоть до критической температуры основной решетки θ_c .

Локальная частота (рис.2) уменьшается с ростом температуры. Расстояние между примесным и ближайшим к нему атомом (4.26) представлено на рис.3. Нужно отметить, что концы рассматриваемой решетки не закреплены, поэтому не возникает дополнительных сил, препятствующих расширению решетки.

Амплитуда колебаний примесного атома $\sqrt{u^2}$ в 1,5+3 раза больше амплитуды колебаний основных атомов $\sqrt{u_0^2}$ и составляет $\frac{1}{10} + \frac{1}{3}$ межуатомного расстояния l_0 .

Б. Случай низких температур ($\omega_L \gg \theta$)

Система уравнений (2.1)–(2.4) в этом случае имеет вид /8,9/

$$\lambda^2 y_\lambda^2 = e^y \lambda, \quad (5.5)$$

где

$$\lambda = \frac{\pi \sqrt{M D_0}}{2 a_c} \quad (5.6)$$

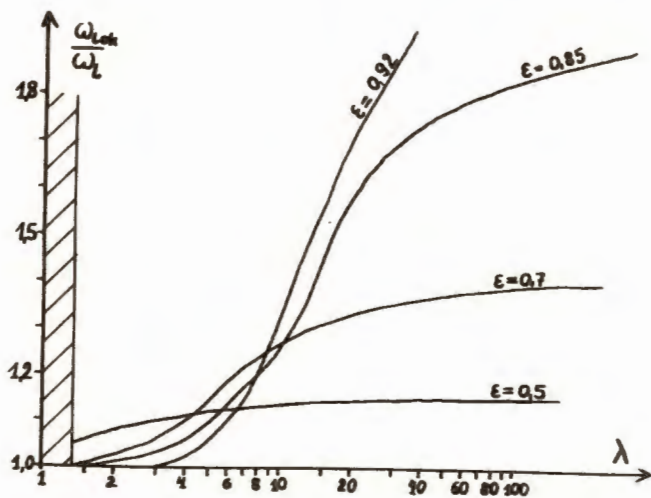
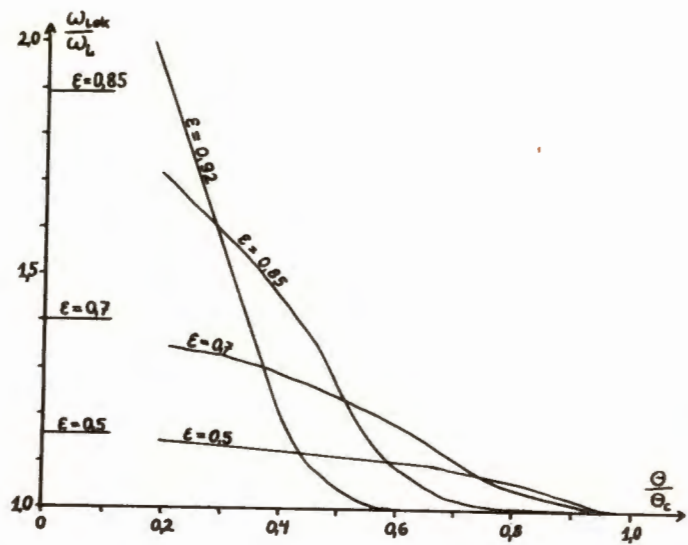


Рис.2. Зависимость локальной частоты от температуры θ (при $\omega_L \ll \theta$) и параметра $\lambda = \frac{\pi \sqrt{D_0 M}}{2 a_0}$ (при $\omega_L \gg \theta$). θ_c - критическая температура неустойчивости основной решетки. На оси ординат отмечены положения локальных частот изотопической примеси.

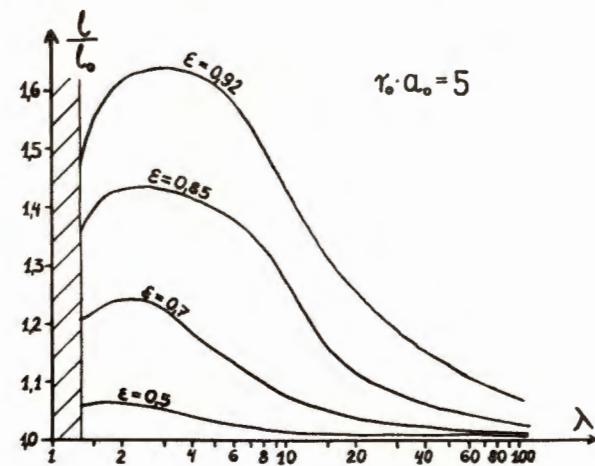
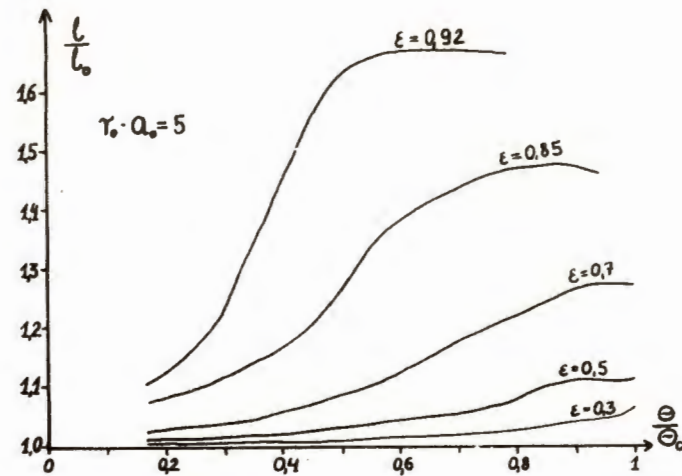


Рис.3. Расстояние между примесью и соседним атомом в зависимости от температуры θ (при $\omega_L \ll \theta$) и параметра $\lambda = \frac{\pi \sqrt{D_0 M}}{2 a_0}$ (при $\omega_L \gg \theta$). θ_c - критическая температура неустойчивости основной решетки.

$$y_{\lambda} = a_0^2 \bar{u}_0^2 = \frac{a_0^2 \omega_L(\theta)}{\pi F(\theta)} \quad (5.7)$$

Если параметры решетки таковы, что $\lambda < \lambda_c = \frac{a_0}{2}$, уравнение (5.5) не имеет действительных решений, и цепочка неустойчива даже при температуре $\theta = 0^\circ \text{K}$.

Поведение примеси при низкой температуре, согласно (3.5) и (4.23), определяется уравнением:

$$-\frac{1}{y_{\lambda}} \ln(1+y) = L_0(\epsilon, \gamma) + s_0(\epsilon, \gamma) + p_0(\gamma) - 1, \quad (5.8)$$

где y_{λ} — решение уравнения (5.5) при фиксированном λ . Решение y этого уравнения как функция параметра λ представлено на рис.1. Примесь в этом случае остается устойчивой.

При увеличении λ локальная частота (рис.2) стремится к своему предельному значению — локальной частоте изотопической примеси. Расстояние между примесью и ближайшим соседом (рис.3) уменьшается с увеличением λ . В 0°K амплитуда колебаний примесного атома $\sqrt{\bar{u}^2}$ в 2–4 раза больше амплитуды колебаний атомов основной решетки $\sqrt{\bar{u}_0^2}$ и становится $\frac{1}{10} + \frac{1}{3}$ междуатомного расстояния ℓ_0 .

6. Обсуждение

В псевдогармоническом приближении получена сильная перенормировка (уменьшение) силовых постоянных примесного атома при нулевом внешнем натяжении. В этой перенормировке учитывается и тот факт, что расстояние между примесью и его соседом меняется. Вследствие перенормировки силовых постоянных меняется и энергия локального колебания. Учет процессов распада фононов приведет к дополнительной перенормировке локальной частоты и затуханию колебаний, что несколько изменит значение полученных параметров.

Показано, что очень легкая примесь при $\epsilon > \epsilon_{\text{кр}}$ становится неустойчивой. В других случаях неустойчивость основной решетки наступает раньше. Амплитуда колебаний примесного атома остается всегда значительно меньше постоянной решетки.

Обобщение этого метода на случай примеси с произвольным затравочным потенциалом не представляет труда. Достаточно использовать вместо уравнения (3.5) уравнение (3.4).

В заключение мне хотелось бы поблагодарить Д.Н.Зубарева, Н.П.Плакиду и В.Б.Приезжева за плодотворные обсуждения.

Л и т е р а т у р а

1. A.A.Maradudin, *Solid State Physics* **18**, 174 (1966).
2. Ю.Каган, Я.Иосилевский. *ЖЭТФ*, **44**, 1375 (1963).
3. В.Mozer, K.Otnes, C.Thaper, *Phys. Rev.*, **152**, (2), 535 (1966).
4. М.Г.Землянов, В.А.Соменков, Н.А.Черноплеков. *ЖЭТФ* **52**(3), 665(1967).
5. I.Natkaniec, K.Parlinski, A.Bajorek, M.Sudnik-Hrynkiwicz, *Phys. Letters*, **24A**, 517 (1967).
6. I.Natkaniec, K.Parlinski, J.A.Janik, A.Bajorek, M.Sudnik-Hrynkiwicz. Препринт ОИЯИ Е14-3825 (1968). *Inelastic Scattering of Neutron* IAEA Vienna, 1968 (in print).
7. Н.М.Плакида, Т.Шиклош. Препринт ОИЯИ Р4-3449 (1967).
8. Н.М.Плакида, Т.Шиклош. Препринт ОИЯИ Р4-3706 (1968).
9. Н.М.Плакида, Т.Сиклос, *Phys. Letters* **26A**(8), 342 (1968).
10. A.A.Maradudin, P.A.Flinn, R.A.Coldwell-Horsfall *Ann. of Phys.* (N.Y) **15**, 337, 360 (1961).
11. Ю.А.Изюмов, М.В.Медведев. *ФММ* **22**(5), 641 (1966).
12. T.Wolfram, J.Callaway, *Phys. Rev.*, **130**(6), 2207 (1963).

Рукопись поступила в издательский отдел
9 августа 1968 года.