Письма в ЖЭТФ, том 73, вып. 11, с. 680 – 683

Особенности плотности квазилокальных состояний вдоль резонансных кривых в сплошном спектре

А. М. Косевич, Д. В. Мацокин[+1)], *С. Е. Савотченко*[*]

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, 61103 Харьков, Украина

[+]*Харьковский национальный университет им. В. Н. Каразина, 61077 Харьков, Украина*

[*]*Белгородский государственный университет, 308007 Белгород, Россия*

Поступила в редакцию 23 апреля 2001 г.

Рассчитаны и проанализированы плотности квазилокализованных состояний в одномерной системе с точечным дефектом и в ГЦК кристалле с плоским дефектом. Плотность состояний имеет ярко выраженный пик, который находится вблизи энергии (частоты) резонансного прохождения частицы (волны) через дефект, хотя и слегка смещен относительно нее. При подходе к краю непрерывного спектра пик приближается к резонансной частоте и обостряется, стремясь к δ-образному.

PACS: 03.65.-w, 63.20.Mt

В последнее время проявляется большой интерес к явлениям, связанным со взаимодействием свободно распространяющихся волн или частиц с локализованными вблизи дефектов однотипными состояниями. Предметом обсуждения оказываются особенности резонансного рассеяния волн при наличии многоканальных процессов [1 – 3]. Природа этих особенностей тесно связана со свойствами квазилокальных состояний сплошного спектра [4]. Целью данной работы является проанализировать связь между обсуждаемыми особенностями амплитуд рассеяния и спектральной плотностью состояний изучаемой системы. Анализ проведен на двух примерах: взаимодействие двух частиц с разными законами дисперсии в одномерной квантовой системе и резонансные процессы рассеяния фононов в ГЦК кристалле с плоским дефектом.

В п.1 проанализированы амплитуды рассеяния частицы на точечном дефекте в рамках модели одномерной системы, в которой существуют два типа элементарных возбуждений, отличающихся параметрами квадратичных законов дисперсии. В такой системе при определенных значениях параметров возникают так называемые резонансы Фано (аналогичная ситуация возникала при рассмотрении рассеяния электронов на примеси в 2D квантовом канале в [2]). Рассчитана плотность квазилокальных состояний и показано, что ее максимум привязан к энергии резонансного прохождения, хотя и смещен относительно нее.

В п.2 проанализированы особенности плотности квазилокальных состояний в рамках дискретной модели плоского дефекта в ГЦК кристалле с центральным взаимодействием ближайших соседей. Спектры резонансных колебаний, а также щелевые локализованные состояния в такой модели были рассчитаны в [5]. Плотность квазилокализованных колебаний имеет ярко выраженный пик вблизи частоты резонансного прохождения упругой волны через плоский дефект, но смещенный относительно нее. Показано, что при приближении к краю сплошного спектра пик плотности состояний приближается к резонансной частоте и обостряется, стремясь к δ-образному. Вне сплошного спектра резонансная кривая непрерывно продолжается в виде дисперсионной кривой локализованного у дефекта щелевого состояния.

1. Особенности плотности состояний в 1D системе с двумя ветвями закона дисперсии. Рассматривается 1D квантовая система с двумя группами квазичастиц, имеющих квадратичные законы дисперсии:

$$E = E_1 + \frac{k^2}{2m_1}, \quad E = E_2 + \frac{k^2}{2m_2}, \quad E_1 < E_2, \qquad (1)$$

постоянная Планка $\hbar$ взята равной единице. Если в такой системе есть пассивный точечный дефект, расположенный в точке $x = 0$, то взаимодействие на этом дефекте, следуя [3], можно представить в виде следующего локального потенциала:

$$H_{int}(x,x') = U_0\{\alpha_1|\psi_1(0)|^2 + \alpha_2|\psi_2(0)|^2 + \\ +\beta[\psi_1^*(0)\psi_2(0) + \psi_2^*(0)\psi_1(0)]\}\delta(x)\delta(x'), \qquad (2)$$

[1)]e-mail: matsokin@univer.kharkov.ua

где $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ – волновые функции частиц соответственно первого и второго типов.

Пусть частица первого типа падает слева на дефект, обладая энергией E, где $E_1 < E < E_2$. Вторая частица при такой энергии может находиться только в локализованном состоянии с волновой функцией

$$\psi_2 = Be^{-\kappa|x|}, \quad \kappa = \sqrt{2m_2(E_2 - E)}. \tag{3}$$

В [3] показано, что при определенных соотношениях параметров взаимодействия и энергии рассеивающейся частицы возможно резонансное ее прохождение через дефект. Физической причиной резонанса при прохождении через пассивный дефект является взаимодействие свободно распространяющейся частицы первого типа с локализованным состоянием второго типа. Полное прохождение имеет место при $\alpha_1\kappa = m_2U_0(\beta^2 - \alpha_1\alpha_2)$.

Покажем, что энергия, отвечающая полной прозрачности дефекта, связана с особенностью плотности стационарных состояний квазилокального типа. Дело в том, что в изучаемой системе в интервале энергий $E_1 < E < E_2$ существуют квазилокализованные состояния, у которых волновая функция ψ_1 имеет вид стоячей волны

$$\psi_1(z) = \begin{cases} A\cos(kx - \varphi), & x < 0 \\ A\cos(kx + \varphi), & x > 0 \end{cases}, \tag{4}$$

а ψ_2 локализована вблизи дефекта в соответствии с (3).

Квазилокальные состояния обладают непрерывным спектром, который характеризуется одним параметром – фазой φ. Используя граничные условия, вытекающие из наличия потенциала H_{int}, нетрудно получить соотношение, определяющее фазу φ:

$$\mathrm{tg}\varphi = \Delta_r(E)/\Delta_t(E), \tag{5}$$

где

$$\Delta_r(E) = m_1U_0\{m_2U_0(\beta^2 - \alpha_1\alpha_2) - \alpha_1\kappa\},$$

$$\Delta_t(E) = k(\kappa + \alpha_2m_2U_0), \quad k = \sqrt{2m_1(E - E_1)}.$$

Следующая формула определяет добавку к объемной плотности состояний:

$$\delta g(E) = \frac{1}{\pi}\frac{d\varphi(E)}{dE} = \frac{1}{\pi}\frac{\Delta_r'(E)\Delta_t(E) - \Delta_r(E)\Delta_t'(E)}{\Delta_r^2(E) + \Delta_t^2(E)}. \tag{6}$$

Допустим, что в системе имеет место полное прохождение ($\Delta_r(E_t) = 0$). И предположим, что вблизи E_t функции $\Delta_r(E)$ и $\Delta_t(E)$ изменяются слабо, то есть точка $E = E_t$ достаточно далека от каких-либо особенностей спектра (границы ветвей спектра и т.п.). Тогда, производя разложение в (6) по степеням $\delta E = E - E_t$, в основном приближении получим:

$$\delta g(E) = \frac{1}{\pi}\frac{\Gamma}{\left(\delta E + \Delta_t\Delta_t'/\Delta'^2_t + \Delta'^2_r)\right)^2 + \Gamma^2}, \tag{7}$$

где $\Gamma = \Delta_r'\Delta_t/(\Delta'^2_r + \Delta'^2_t)$, $\Delta_{t,r} \equiv \Delta_{t,r}(E = E_t)$, $\Delta'_{t,r} \equiv \Delta'_{t,r}(E = E_t)$. Это разложение справедливо, если Δ_t' не стремится к нулю, то есть кроме случаев

$$E^* - E_t \ll E_t - E_1, E_2 - E_t,$$

где

$$E^* = \frac{1}{8}(8E_1 + 8E_2 - \alpha_2^2U_0^2m_2 +$$
$$+[32E_1^2 + 32E_2^2 + 192E_1E_2 + \alpha_2^4U_0^4m_2^2 - 16E_1\alpha_2^2U_0^2m_2)]^{1/2}.$$

Видно, что плотность состояний вблизи точки $E = E_t$ имеет вид лоренцевского пика с шириной Γ, центр которого смещен относительно точки E_t на величину $\Delta_t\Delta_t'/(\Delta'^2_t + \Delta'^2_r)$ (рис.1).

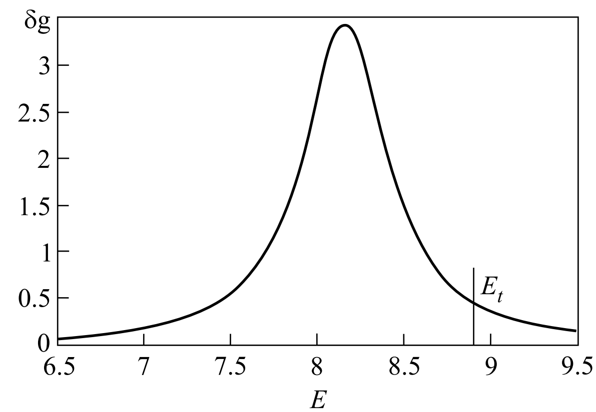

Рис.1. Зависимость добавки к плотности состояний от энергии; $U_0 = -0.7$, $m_1 = 1$, $m_2 = 2$, $\alpha_1 = 2$, $\alpha_2 = 2$, $\beta = 1$, $E_1 = 0$, $E_2 = 10$, E_t – частота полного прохождения

2. Особенности плотности состояний в ГЦК кристалле с плоским дефектом. Рассматривается динамика ГЦК кристалла с плоским дефектом, совпадающим с плоскостью (001). Оси координат направлены вдоль ребер куба, ось z перпендикулярна плоскости дефекта. Ограничимся учетом взаимодействия атомов только с ближайшими соседями. Будем считать, следуя [5], что дефект характеризуется изменением силовой константы взаимодействия между атомами слоя $z = 0$ и $z = -1$ (ребро куба элементарной ячейки взято равным двум). Отношение силовой константы в дефектном слое к силовой константе в бездефектном кристалле обозначим ε.

Как было показано в [5] для такого кристалла собственные (в том числе и квазилокализованные) колебания могут быть двух видов: симметричные и антисимметричные. Нас будут интересовать симметричные колебания, для которых

$$u_x^+(n_z-1)=-u_x^-(-n_z),\quad u_z^+(n_z-1)=u_z^-(-n_z),$$

где u_i^+ – смещение в верхнем полупространстве $(n_z\geq 0)$, u_i^- – смещение в нижнем полупространстве $(n_z<0)$, n_z нумерует атомные слои вдоль оси z.

Эффекты резонансного прохождения и отражения имеют место для таких фононов, частоты которых лежат внутри одной из ветвей объемных колебаний кристалла, но оказываются вне другой ветви. В таких областях спектра возможно существование собственных квазилокальных состояний, то есть двухпарциальных колебаний, одна компонента которых локализована у дефекта, а другая свободно распространяется в глубь кристалла.

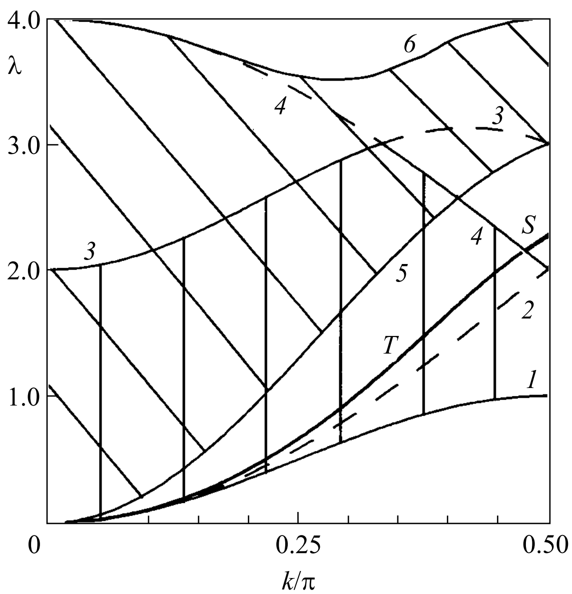

Рис.2. Дисперсионные зависимости частот резонансного прохождения T и симметричного колебания S при $\varepsilon=3$. Вертикальная штриховка соответствует псевдопоперечной ветви, наклонная – псевдопродольной. Кривая *2* – $\lambda=2(1-\cos k)$, $q=0$; *3* – $\lambda=2-\cos 2k-\cos k$, $q=\pi$; *4* – $\lambda=2(1+\cos k)$, $q=\pi$; *5* – $\lambda=2-\cos 2k+\cos k$, $q=0$; *1, 6* – соответственно нижняя и верхняя границы спектра

Рассмотрим волну, распространяющуюся в направлении [110]. Эта волна имеет две независимых компоненты – более низкочастотную (псевдопоперечную), спектр которой на рис.2 выделен вертикальной штриховкой, и более высокочастотную (псевдопродольную), спектр которой на рис.2 отмечен наклонной штриховкой. В этом случае в спектре есть три области существования квазилокальных состояний (рис.2): первая ограничена кривыми *2, 5, 4*; вторая – сплошной частью кривой *3* и штриховой частью кривой *4*; третья – кривой *5*, сплошной частью кривой *4* и штриховой частью кривой *3*. Кривая T в низкочастотной области квазилокальных состояний отвечает условиям полного прохождения через дефект псевдопоперечной волны. В правой части рис.2 эта кривая выходит на границу щели между псевдопоперечной и псевдопродольной полосами частот. Далее эта кривая непрерывно продолжается дисперсионной кривой S для щелевой локализованной у дефекта волны.

Рассмотрим низкочастотную область квазилокальных колебаний. Вектор смещения волны при $z\geq 0$ имеет вид

$$u_x^+(x,z)=(u_t\cos(qz+\varphi)+u_l e^{-\kappa z})e^{ik(x+y)},$$

$$u_z^+(x,z)=(iu_t\Gamma_t\sin(qz+\varphi)+u_l\Gamma_l e^{-\kappa z})e^{ik(x+y)},\tag{8}$$

где

$$\Gamma_t=-\frac{2-\cos 2k-\cos k\cos q-\lambda}{\sin k\sin q},$$

$$\Gamma_l=i\frac{2-\cos 2k-\cos k\,\mathrm{ch}\kappa-\lambda}{\sin k\,\mathrm{sh}\kappa},$$

$\lambda=m\omega^2/4\gamma$, γ – силовая константа в объеме кристалла.

Добавка к невозмущенной плотности состояний в этой области спектра

$$\delta g=\frac{1}{\pi}\frac{\partial\varphi}{\partial\lambda},\tag{9}$$

которую мы вычислим для симметричных квазилокализованных состояний. Явные формулы для φ и $\delta g(\omega)$ достаточно громоздки, поэтому мы представляем только результаты вычислений.

На кривой плотности состояний при фиксированном k наблюдается пик, немного смещенный относительно частоты резонансного прохождения в сторону низких частот. Если следить за изменением плотности состояний с изменением волнового числа k вдоль кривой полного прохождения T (рис.2), то видно, что вблизи точки на краю объемного спектра, в которой T стыкуется с кривой закона дисперсии щелевых локализованных колебаний S, пик на плотности состояний приближается к частоте полного прохождения и обостряется с ростом k, стремясь к δ-образному на краю сплошного спектра (рис.3). Именно это состояние при выходе из сплошного спектра превращается

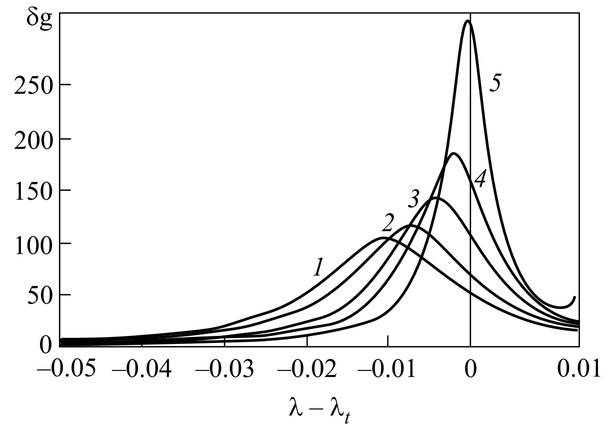

Рис.3. Зависимость плотности состояний от $\lambda - \lambda_t$ для разных k вдоль кривой T: λ_t соответствует частоте полного прохождения. Кривая *1* – $k = 84\frac{\pi}{180}$; *2* – $k = 85\frac{\pi}{180}$; *3* – $k = 86\frac{\pi}{180}$; *4* – $k = 86.5\frac{\pi}{180}$; *5* – $k = 86.9\frac{\pi}{180}$; $\varepsilon = 3$

в локализованное вблизи дефекта колебание симметричного типа (рис.2, кривая S).

Таким образом, на примере 1D квантовой системы с двумя группами возбуждений и ГЦК кристалла с плоским дефектом показано, что кривые резонансного прохождения в сплошном спектре сопровождаются пиками плотности состояний. Наличие острого пика на кривой плотности колебательных состояний показывает, что соответствующие колебания резко выделены и действительно имеют характер резонансов в сплошном спектре. Применительно к ГЦК кристаллу это означает, что именно эти колебания могут играть роль так называемых “вытекающих волн”.

Работа частично поддержана грантом INTAS-1999 # 167.

1. A. N. Darynskii and G. A. Maugin, Wave Motion **23**, 363 (1996).
2. Ч. С. Ким, А. М. Сатанин, ЖЭТФ **115**, 211 (1999).
3. А. М. Косевич, ЖЭТФ **115**, 306 (1999).
4. А. М. Косевич, С. Е. Савотченко, ФНТ **25**, 737 (1999).
5. А. М. Косевич, Д. В. Мацокин, С. Е. Савотченко, ФНТ **25**, 63 (1999).