## АКУСТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ УПРУГИХ ВОЛН В РЕШЕТКЕ С ТЯЖЕЛЫМИ ПРИМЕСЯМИ ВНЕДРЕНИЯ

А.М.Косевич

При рассмотрении колебаний решетки с примесными центрами обычно предполагается, что соответствующий точечный дефект является примесью замещения, т.е. расположен в узле кристаллической решетки. Мы хотим обратить внимание на то, что наличие в решетке примесей внедрения, увеличивающих число степеней свободы кристалла, приводит к некоторому своеобразию в изменениях колебаний решетки. Подобную ситуацию впервые отметил Вагнер [I,2], рассмотрев молекулярные примеси в решетке.

Следуя Лифшицу [3], ограничимся рассмотрением простейшей модели решетки, обладающей только одной ветвью колебаний, и обозначим через $\chi(\vec{r})$ амплитуду колебания атома в узле $\vec{r}$, а через $\psi_j$ амплитуду колебания примеси в точке $\vec{R}_j$. Тогда уравнения стационарных колебаний решетки с частотой $\omega$ в гармоническом приближении должны иметь вид

$$\begin{cases} \omega^2\chi(\vec{r})-\sum\limits_{\vec{r}\,'} L(\vec{r}-\vec{r}\,')\chi(\vec{r}\,')=\sum\limits_j\Big\{\sum\limits_{\vec{r}\,'} U(\vec{r}-\vec{R}_j,\vec{r}\,'-\vec{R}_j)\chi(\vec{r}\,')+A(\vec{r}-\vec{R}_j)\psi_j\Big\}, \\ \omega^2 M\psi_j = M\sum\limits_{\vec{r}} A(\vec{r}-\vec{R}_j)\chi(\vec{r})+\alpha_0^2\psi_j, \end{cases} \tag{1}$$

где $\hat{L}$ - матрица упругих постоянных идеальной решетки, $M$ - масса атома примеси, $\alpha_0^2$ - константа упругой связи примесного атома с решеткой, а матрицы $\hat{U}$ и $\hat{A}$ описывают соответствующие возмущения упругих постоянных.

Если воспользоваться условиями, связывающими матрицы возмущений [3], то из уравнения (I) можно исключить амплитуды $\psi_j$.

Для упрощения дальнейшего анализа предположим, следуя [3], что матрица $\hat{U}$ мультипликативна $U(\vec{\xi},\vec{\xi}\,')=$

$=U_0 f(\vec{\xi}) f(\vec{\xi})$. Тогда упомянутые выше связи матриц возмущения приводят к следующим свойствам этих матриц:

$$A(\vec{\xi}) = -\omega_0 \sqrt{U_0}\, f(\vec{\xi}), \qquad \sum_{\vec{r}} f(\vec{r}-\vec{R}) = \frac{\omega_0}{\sqrt{U_0}},$$
$$\omega_0^2 = \frac{\alpha_0^2}{M}, \; U_0 > 0, \tag{2}$$

и уравнение для $\chi(\vec{r})$ после исключения амплитуд $\psi_j$ приводится к

$$\omega^2 \chi(\vec{r}) - \sum_{\vec{r}'} L(\vec{r}-\vec{r}')\chi(\vec{r}') =$$
$$= \frac{\omega^2 U_0}{\omega^2 - \omega_0^2} \sum_j f(\vec{r}-\vec{R}_j) \times \sum_{\vec{r}'} f(\vec{r}'-\vec{R}_j)\chi(\vec{r}'). \tag{3}$$

Для длинных волн, при описании которых координаты атомов $\vec{r}$ можно считать пробегающими непрерывную совокупность значений, положим $f(\vec{\xi}) = \delta(\vec{\xi})$, где $\delta(\vec{\xi})$ - дельта-функция (тогда $U_0 = \omega_0^2$ ).

В случае, когда частота $\omega_0$ лежит выше полосы непрерывного спектра акустических колебаний, уравнение (3) является уравнением такого же типа, какие исследованы Лифшицем [3]. Однако, если $\omega_0$ попадает в полосу непрерывного спектра (большие массы $M$), оператор возмущения в (3) обладает резонансным знаменателем, наличие которого весьма существенно в тех случаях, когда $\omega_0$ лежит в окрестности нижнего или верхнего края непрерывного спектра [4]. Для выяснения роли резонансного знаменателя предположим, что $\omega_0 \ll \omega_D$, где $\omega_D$ – дебаевская частота, т.е. рассмотрим предельный случай очень больших масс $M$ и ограничимся приближением длинных волн, упрощающим уравнение (3).

Будем считать, что концентрация примесей достаточно мала и их распределение в среднем однородно. Тогда для упругих колебаний, длины волн которых значительно превышают средние расстояния между примесями, можно говорить о "в среднем плоских" волнах, полагая $\chi(\vec{R}) = \chi e^{i\vec{k}\vec{R}}$. Закон дисперсии для этих волн в линейном по концентрации приближении может быть найден из уравнения (см.§ 5 обзора [3]):

$$\omega_0^2(\vec{k}) = \omega^2 n^2(\omega); \quad n^2(\omega) = 1 - c\Lambda(\omega)\left\{1 + \Lambda(\omega)\int \frac{\omega^2 \nu(z)\, dz}{z^2 - \omega^2}\right\}^{-1},$$

где $\omega = \omega_0(\vec{k})$ – закон дисперсии для идеальной решетки (в изотропном приближении для длинных волн $\omega_0(\vec{k}) = sk$, где $s$ – скорость звука), $c$ – концентрация примесей, $\Lambda(\omega) = \omega_0^2/(\omega^2 - \omega_0^2)$ и $\nu(\omega)$ – спектральная плотность частот идеального кристалла.

При $\omega \ll \omega_D$

$$\int \frac{\omega^2 \nu(z)\, dz}{z^2 - \omega^2} \cong \left(\frac{\omega}{\omega_k}\right)^2 + i\frac{\pi}{2}\omega\nu(\omega), \quad \frac{1}{\omega_k^2} = \int \frac{\nu(z)\, dz}{z^2},$$

где, как очевидно из определения $\omega_D$, $\omega_k \sim \omega_D$.

Запишем $n(\omega)=n_0(\omega)+i\varkappa(\omega)$ ; тогда величины $n_0$ и $\varkappa$ определятся из соотношений:

$$n_0^2-\varkappa^2=1-c\frac{(\omega^2-\omega_n^2)\,\omega_0^2}{(\omega^2-\omega_n^2)^2+\Gamma^2(\omega)},$$
$$2n_0\varkappa=c\,\frac{\omega_0^2\,\Gamma(\omega)}{(\omega^2-\omega_n^2)^2+\Gamma^2(\omega)};\ \Gamma(\omega)=\frac{\pi}{2}\,\omega_0^2\,\omega\,\nu(\omega),\tag{4}$$

где $\omega_n$ - перенормированная частота сооственных колебаний примеси: $\omega_n=\omega_0[1-(\omega_0/\omega_k)^2]$. При $\omega\ll\omega_D$ по порядку величины $\nu(\omega)\sim\omega^2/\omega_D^3$, и $\Gamma(\omega)\sim\omega_0^2(\omega/\omega_D)^3\ll\omega_0^2$.

Смысл величин $n_0$ и $\varkappa$ известен: в изотропном приближении $n_0$ определяет перенормировку скорости звука в решетке с примесями: $s_n(\omega)=s/n_0(\omega)$, а $\varkappa$ - коэффициент поглощения упругих волн в кристалле $\gamma$ : $\gamma(\omega)=\omega\,\varkappa(\omega)/s$.

Из (4) следует, что как и при квазилокальных колебаниях [4], поглощение упругих волн имеет ярко выраженный резонансный характер. Резонансная частота $(\omega=\omega_n)$ как бы разделяет спектр частот на две области, в первой из которых $(\omega\ll\omega_n)$ колебания кристаллической решетки с дефектами являются обычными акустическими колебаниями. Второй области частот $(\omega\gg\omega_n)$ соответствуют колебания, при которых дефекты остаются практически неподвижными в процессе колебания основных атомов решетки. Эти колебания напоминают оптические колебания сложной решетки.

Заметим, что отношение длины затухания волны в резонансе к ее длине порядка $c\omega_0^2/\Gamma(\omega_0)$. При концентрациях примеси $c \sim \Gamma(\omega_0)/\omega_0^2 \sim (\omega_0/\omega_D)^3$ затухание плоской упругой волны вблизи резонансной частоты происходило бы на расстояниях порядка длины волны. Кристаллическая решетка с примесями такой концентрации была бы практически "непрозрачной" для этих волн в узком интервале частот $\Delta\omega \sim c\omega_0$ вблизи $\omega = \omega_n$, и ее спектр частот оказался бы разделенным на акустическую и "оптическую" полосы с узкой щелью между ними.

Автор благодарен И.М.Лифшицу за весьма полезные обсуждения.

Харьковский физико-технический институт
Академии наук Украинской ССР

Поступило в редакцию
27 апреля 1965 г.

Литература

[1] M.Wagner. Phys. Rev., 131, 2520, 1963.
[2] M.Wagner. Phys. Rev., 133, A750, 1964.
[3] И.М.Лифшиц. УФН, 83, 617, 1964.
[4] Ю.Каган, Я.Иосилевский. ЖЭТФ, 42, 259, 1962.