ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ФОНОННОГО СПЕКТРА КРИСТАЛЛОВ С ПРОТЯЖЕННЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Я.А.Иосилевский

Цель настоящей заметки – обратить внимание на некоторые весьма общие особенности спектральных функций кристаллов с линейными и двухмерными дефектами (краевые дислокации, дефекты упаковки, плоские границы и пр.). Если дефект имеет вид прямой линии или плоскости (предполагая, что концентрация дефектов мала, мы рассматриваем их как изолированные), он приводит к нарушению трансляционной симметрии кристалла лишь в перпендикулярных (этой линии или плоскости) направлениях. Поэтому составляющая $f_{\parallel}$ волнового вектора, параллельная оси или плоскости дефекта, является интегралом движения, а нормальные колебания кристалла имеют вид волн $\phi_{f_{\parallel} p}(x_{\ell\perp})\exp(i f_{\parallel} x_{\ell\parallel})$ с частотами $\omega(f_{\parallel}, p)$, где $x_{\ell\parallel}$ и $x_{\ell\perp}$ – соответственно параллельная и перпендикулярная (дефектной линии или плоскости) составляющая радиус-вектора ℓ-й частицы, p – индекс, нумерующий нормальные колебания при каждом $f_{\parallel}$ и принимающий $3L_{\perp}$ значений ("номер ветви"; число значений $f_{\parallel}$ равно $L_{\parallel}$), $L_{\parallel}$ и $L_{\perp}$ – числа частиц на оси или плоскости дефекта и вдоль перпендикулярного сечения (плоского или линейного), соответственно, так что $L = L_{\parallel} L_{\perp}$ – полное число частиц в системе.

Как показывает анализ простых моделей протяженных дефектов (см. [1,2]), среди указанных волновых решений, как правило, имеются такие, амплитуда которых экспоненциально убывает с удалением от дефекта: $\phi_{f_{\parallel}p} \sim \exp(-x_{\ell\perp})/\rho$ $(\rho = \rho(f_{\parallel}, p)$ – глубина проникновения). В возможности существования таких решений можно, однако, убедиться и не прибегая к упрощенным моделям. Вдали от дефекта динамическая матрица соответствует идеальному кристаллу, нормальные колебания которого – плоские волны с частотами $\omega_0(f, \sigma)$ (σ – номер ветви). При каждом фиксированном $f_{\parallel}$ $(f = f_{\parallel} + f_{\perp})$ эти частоты имеют нижнюю и верхнюю границы: $\underline{\omega}_0(f_{\parallel})$ и $\bar{\omega}_0(f_{\parallel})$ (для простоты, рассматривается одноатомная матрица без оптических ветвей; обобщение на случай произвольной матрицы, в спектре которой могут быть щели, производится непосредственно), так что

$$\underline{\omega}_0(f_{\parallel}) \leqslant \omega_0(f_{\parallel} + f_{\perp}, \sigma) \leqslant \bar{\omega}_0(f_{\parallel}). \qquad (1)$$

Закрепим мысленно все атомы кристалла, за исключением тех, которые находятся в области дефекта, и возбудим в таком "связанном" дефекте собственное колебание с некоторым $f_{\parallel}$ и частотой $\omega_d(f_{\parallel}, p)$. При каждом $f_{\parallel}$ таких волн может быть $3r_{\perp}$ $(p = 1,2,...,3r_{\perp})$, где $r_{\perp}$ – число атомов в перпендикулярном сечении дефекта (плоскостью или линией в случае одно- и двухмерного дефектов, соответственно). Если окажется, что при некотором p

$$\omega_d(f_{\parallel}, p) < \underline{\omega}_0(f_{\parallel}) \quad \text{или} \quad \omega_d(f_{\parallel}, p) > \bar{\omega}_0(f_{\parallel}), \qquad (2)$$

тогда, в силу (1), указанное возбуждение после снятия связей не сможет распространяться по кристаллу и останется локализованным в небольшой области около дефекта. Это колебание будет происходить с несколько изменившейся частотой $\omega(f_{\parallel}, p)$, определяемой путем точного решения динамической задачи, но по-прежнему удовлетворяющей одному из неравенств (2) $(\omega_d(f_{\parallel}, p) \to \omega(f_{\parallel}, p))$.

Таким образом, из $3L_{\perp}$ "ветвей" колебаний конечное число ($\sim 3r_{\perp}$) "ветвей" могут оказаться локализованными и для анализа их вклада в спектральные функции $g^{ik}(\omega^2, x_{\ell\perp}^{(d)})$ и $g(\omega^2)$, описывающие динамику отдельных атомов в дефектной области и всего кристалла как целого, соответственно (см. [3]; $x_{\ell\perp} = x_{\ell\perp}^{(d)}$ соответствует дефектным атомам), применима теорема Ван Хова[4]. Используя результаты этой теоремы, относящиеся к одно- и двухмерным системам, непосредственно находим, что при наличии локальных колебаний

$$g^{ik}(\omega^2, x_{\ell\perp}^{(d)}) = g_R^{ik}(\omega^2, x_{\ell\perp}^{(d)}) + g_J^{ik}(\omega^2, x_{\ell\perp}^{(d)}), \qquad (3)$$

где $g_J^{ik}(\omega^2, \underline{x}_{\underline{\mathcal{U}}}^{(d)})$ имеет следующие особенности в окрестности критических точек ω_{pI} каждой из локальных ветвей ($p = 1,2,\ldots,\sim 3r_{\perp}$):

$$g_J^{ik}(\omega^2, x_{\mathcal{U}}^{(d)}) = C^{ik} |\omega^2 - \omega_{pI}^2|^{-1/2} [1 + (-1)^I \operatorname{sgn}(\omega^2 - \omega_{pI}^2)] \quad I = 0,1 \qquad (4)$$

в случае линейных дефектов и

$$g_J^{ik}(\omega^2, \underline{x}_{\mathcal{U}}^{(d)}) = \begin{cases} \epsilon_I C^{ik} \operatorname{sgn}(\omega^2 - \omega_{pI}^2), \ \epsilon_0 = 1, \epsilon_2 = -1, I = 0,2 & а \\ -C^{ik} \ln |\omega^2 - \omega_{pI}^2|, \quad I = 1 & б \end{cases} \qquad (5)$$

в случае двухмерных дефектов (C^{ik} – некоторые константы). Функция $g_R^{ik}(\omega^2, x_{\mathcal{U}}^{(d)})$ имеет сингулярности на порядок по $(\omega^2 - \omega_{pI}^2)$ более слабые либо сингулярности обычного трехмерного типа [4] (вообще говоря, в других точках). Критическая точка $\omega_{pI} = \omega(f_{\parallel кр}, p)$ соответствует значению $f_{\parallel} = f_{\parallel кр.}$, при котором обращается в нуль градиент $\nabla_{f_{\parallel}} \omega^2 (f_{\parallel кр}, p)$ для p-локальной ветви, а ее индекс I определяется здесь как в [5]. Аналогично представляется функция $g(\omega^2)$ с той лишь разницей, что ее сингулярная часть (4) или (5) (C^{ik} заменяется скалярной константой C) пропорциональна концентрации дефектов.

Минимальное число критических точек ω_{pI} индекса I для каждой локальной ветви определяется теоремой Морса [4,5], за исключением критических точек индекса 0 акустических локальных ветвей (т.е. тех, для которых $\omega(f_{\parallel}, p) = c f_{\parallel}$ при малых $f_{\parallel}$; их число не превышает трех), если таковые имеются. Глубина проникновения $\rho(f_{\parallel}, p)$ акустических локальных колебаний при малых $f_{\parallel}$ пропорциональна $f_{\parallel}^{-1}$ (ср. Рэлеевские волны), так что эти колебания сильно "коллективизируются" при $f_{\parallel} \to 0$. Поэтому особенность типа (4) или (5а) в окрестности минимума $\omega^2 = \omega^2(0, p) = 0$ ($I = 0$) не появляется и рассматриваемые спектральные функции оказываются пропорциональными $\sqrt{\omega^2}$, как это свойственно трехмерным системам. В связи с этим отметим, что наличие линейных или плоских дефектов в кристалле больших размеров при сохранении гармонического характера междуатомных сил во всем кристалле не может привести к отклонению решеточной теплоемкости от закона T^3 при $T \ll \hbar\omega_{кр.мин}$, где $\omega_{кр.мин}$ – ближайшая к нулю критическая точка типа (4) или (5). Случаи, на которые указывается, например, в [5], по существу, обусловлены другими причинами (кристалл ограниченных размеров с закрепленными границами, тонкие пластины). Отклонения, однако, могут возникнуть, при $T \sim \hbar\omega_{кр.мин}$, если $\omega_{кр.мин}$ расположена достаточно низко.

Отметим также, что особенности типа (4), (5) являются аналогом δ-функциональных особенностей в спектре, соответствующих локальным колебаниям нуль-мерных дефектов (например, примесных атомов). Однако, в отличие от последних (сравнить с квазилокальными колебаниями [6]), особенности (4), (5) четко проявляются даже в том случае, если они попадают в область непрерывного спектра матрицы $(0, \omega_{0\,макс})$; ω_{pI} не должна лишь принадлежать области (1) (при $f_{\parallel} = f_{\parallel кр.}$), которая, вообще говоря, существенно уже диапазона $(0, \omega_{0\,макс})$.

Особенностями вида (4) или (5) должны, очевидно, обладать функции плотности состояний элементарных возбуждений любого типа, если для этих возбуждений возможны локализованные состояния вблизи протяженных дефектов.

Автор признателен Э.И.Рашбе за обсуждение работы.

Институт
физики твердого тела
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
17 октября 1967 г.

Литература

[1] И.М.Лифшиц, А.М.Косевич. Динамика кристаллической решетки с дефектами. Препринт ФТИ АН УССР № 170/Т-025, Харьков, 1965.
[2] Я.А.Иосилевский. ЖЭТФ, 51, 201, 1966; ФТТ, 10, 1968.
[3] Я.А.Иосилевский. Phys. Stat. Sol., 24, № 2, 1967.
[4] L.Van Hove. Phys. Rev., 89, 1189, 1953.
[5] А.Марадудин, Э.Монтролл, Дж.Вейсс. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. Изд-во "Мир", М., 1965.
[6] Ю.М.Каган, Я.А.Иосилевский. ЖЭТФ, 42, 259, 1962; 44, 284, 1963.