

# ОСОБЕННОСТИ ТРАНСФОРМАЦИИ ЛОКАЛЬНЫХ УРОВНЕЙ В ПРИМЕСНУЮ ЗОНУ НА ПРИМЕРЕ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ag_{1-p}Al_p$

**А. М. Косевич**, **И. А. Господарев**, **В. И. Гришаев**, **А. В. Котляр**,  
**В. О. Круглов**, **Е. В. Манжелей**, **Е. С. Сыркин\***, **С. В. Феодосьев\*\***

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина Национальной академии наук Украины  
61103, Харьков, Украина*

С помощью метода матриц Якоби получены фоновые плотности состояний неупорядоченных твердых растворов алюминия в серебре различной концентрации. Исследован процесс преобразования дискретного колебательного уровня (локального колебания), обусловленного наличием в решетке серебра изолированной примеси алюминия, с ростом концентрации примесных атомов в примесную зону. В частности показано, что при сравнительно небольших (около 5–15 %) концентрациях алюминия, размытие основного локального уровня сопровождается появлением дополнительных резонансных пиков, несущих важную информацию о межатомном взаимодействии в таких растворах.

PACS: 63.20.-e

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Наличие в кристалле примеси, масса которой меньше массы атома основной решетки или примеси, связанной с основной решеткой сильнее, чем связаны между собой атомы основной решетки, может приводить к образованию дискретных примесных уровней за пределами полосы квазинепрерывного фононного спектра идеальной решетки. Такие локальные колебания локализованы на примесных атомах — их амплитуды быстро убывают по мере удаления от дефекта. При этом степень локализации колебания будет тем выше, чем дальше удалена его частота от верхней границы полосы сплошного спектра. Если расстояние от дефекта существенно превышает характерный радиус межатомного взаимодействия в кристалле, затухание амплитуды локального колебания можно считать экспоненциальным.

Систематическое изучение локальных колебаний было начато работами Лифшица [1–4]. Условия образования и характеристики таких колебаний в настоящее время приведены во многих монографиях по динамике кристаллической решетки (см., на-

пример, [5–7]). К настоящему времени существуют многочисленные методики экспериментального определения локальных частот и во многих твердых растворах эти частоты определены (см., например, [8, 9]). Подобные экспериментальные данные содержат обширную и, как было показано в [10], сравнительно легко извлекаемую информацию о параметрах дефекта и основной решетки.

В реальном эксперименте локальные частоты можно наблюдать в твердых растворах с конечной концентрацией примесных атомов, когда не всегда можно пренебречь взаимодействием состояний на близко расположенных дефектах. Такое взаимодействие может трансформировать локализованные колебательные уровни в примесные зоны с квазинепрерывным спектром [11–15]. Степень размытия дискретных локальных уровней в такие примесные зоны будет зависеть не только от концентрации, но и от параметров, характеризующих дефект, основную решетку, а также междефектное взаимодействие. Даже по одной этой причине интерес к тому, сохраняется ли при конкретной концентрации конкретной примеси в конкретной матрице резонансный характер примесного колебания и, если сохраняется, то смещается ли частота соответствующего резонансного максимума от частоты локального колебания,

\*E-mail: syrkin@ilt.kharkov.ua

\*\*E-mail: feodosiev@ilt.kharkov.ua

обусловленного изолированной примесью, представляется вполне обоснованным.

К настоящему времени построена последовательная теория эволюции локальных колебаний в примесные зоны для случая малых концентраций [12–15], когда среднее расстояние между примесями  $l$  намного превышает расстояние между атомами основной решетки  $a$ . Для плотности состояний в примесной зоне было получено разложение по степеням величины  $c \equiv (a/l)^3$ .

Сразу отметим, что уже при малых значениях концентрации  $p$  (которую определим обычным способом, т. е. как отношение числа примесных атомов к общему числу атомов в системе), величина  $l$  становится меньше  $2a$  (для плотноупакованных структур при  $p \lesssim 2\%$ , для простого куба — при  $p \lesssim 3\%$  и т. п.). При таком расстоянии между примесными атомами эффективное взаимодействие между ними, как было показано в [10], может заметно изменить частоту локального колебания, т. е. уже при таких малых концентрациях примеси может наблюдаться не отдельный дискретный сильно локализованный колебательный уровень, а примесная зона, фоновый спектр внутри которой квазинепрерывен.

Для достаточно быстро затухающих фононов узких оптических зон эволюция дискретных локальных уровней в примесные зоны изучалась в работах [16, 17]. Однако для слабо затухающих акустических фононов предложенная в данных работах расчетная процедура, основанная на вычислении функций Грина с помощью диаграммной техники, сходится очень медленно.

В предлагаемой работе проведен численный расчет фоновых плотностей состояний неупорядоченных твердых растворов алюминия в серебре  $\text{Ag}_{1-p}\text{Al}_p$ , в которых из-за совпадения кристаллических структур и очень близких значений постоянной решетки концентрация  $p$  может принимать практически любое значение от нуля до единицы. Показано, что с изменением концентрации в области от одного до десяти процентов, размытие локального дискретного уровня в примесную зону сопровождается возникновением дополнительных резонансных уровней, несущих, в частности, важную информацию о силовых взаимодействиях в таких растворах.

## 2. ФОНОННЫЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

В основе расчетов, проведенных в настоящей работе, лежит метод матриц Якоби (или  $\mathcal{J}$ -матриц) [18–20] (см., также [21]), в основе которого ле-

жит классификация колебаний, отличная от традиционного разложения по плоским волнам.

Уравнения колебаний кристаллической решетки можно записать в операторном виде следующим образом:

$$(\lambda \hat{\mathcal{I}} - \hat{\mathcal{L}}) \vec{\psi} = 0. \quad (1)$$

В (1)  $\hat{\mathcal{L}}$  — оператор, описывающий колебания кристаллической решетки

$$\mathcal{L}_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\Phi_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\sqrt{m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')}}.$$

Здесь  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}'$  — радиус-векторы взаимодействующих атомов;  $\Phi_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  — матрица силовых постоянных, описывающая это взаимодействие;  $m(\mathbf{r})$  и  $m(\mathbf{r}')$  — массы атомов. Оператор  $\hat{\mathcal{L}}$  действует в пространстве перенормированных атомных смещений  $H$ , векторы этого  $3N$ -мерного пространства ( $N$  — число атомов в системе) мы будем обозначать стрелками над соответствующими символами (в отличие от обычных «трехмерных векторов», которые традиционно будем выделять жирным шрифтом)

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \frac{\psi(\mathbf{r})}{\sqrt{m(\mathbf{r})}} e^{i\omega t}.$$

Величины  $\lambda \equiv \omega^2$  являются собственными значениями оператора  $\hat{\mathcal{L}}$  (квадратами собственных частот  $\omega$ );  $\hat{\mathcal{I}}$  — единичный оператор.

Выбрав в пространстве  $H$  некоторый вектор  $\vec{h}_0 \in H$ , соответствующий смещению какого-либо из атомов решетки или определенному смещению какой-нибудь группы атомов, с помощью оператора  $\hat{\mathcal{L}}$  можно построить последовательность

$$\{\hat{\mathcal{L}}^n \vec{h}_0\}_{n=0}^{\infty} = \vec{h}_0, \hat{\mathcal{L}} \vec{h}_0, \hat{\mathcal{L}}^2 \vec{h}_0, \dots, \hat{\mathcal{L}}^n \vec{h}_0, \dots, \quad (2)$$

представляющую собой форму записи принципа Гюйгенса. Линейная оболочка, натянутая на векторы (2), является некоторым подпространством пространства  $H$  ( $H_{\vec{h}_0} \subset H$ ), инвариантным относительно оператора  $\hat{\mathcal{L}}$ .

Оператор  $\hat{\mathcal{L}}$  индуцирует в подпространстве  $H_{\vec{h}_0}$  некоторый оператор  $\hat{\mathcal{L}}_{\vec{h}_0}$ , который в базисе  $\{\vec{h}_n\}_{n=0}^{\infty}$ , получаемом ортонормализацией (2), представляется трехдиагональной матрицей Якоби ( $\mathcal{J}$ -матрицей). Диагональные элементы этой матрицы будем обозначать  $a_n$ , а недиагональные  $b_n$  ( $n \in [0; 3N \rightarrow \infty]$ ).

Если полоса квазинепрерывного спектра односвязна, т. е.  $\omega \in [0; \omega_m]$ , то для матричных элементов  $a_n$  и  $b_n$  справедливы следующие предельные соотношения:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = 2 \lim_{n \rightarrow \infty} b_n = \frac{\lambda_m}{2} \quad (\lambda_m \equiv \omega_m^2). \quad (3)$$

В каждом из подпространств  $H_{\vec{h}_0}$  оператор  $\hat{\mathcal{L}}$  обладает простым спектром, что существенно упрощает вычисление фоновых плотностей состояний и колебательных характеристик. Так, произвольный матричный элемент  $\mathcal{G}_{mn}(\lambda)$  оператора резольвенты  $\hat{\mathcal{G}}(\lambda) \equiv (\lambda\hat{\mathcal{L}} - \hat{\mathcal{L}})^{-1}$  сравнительно просто выражается через элемент  $\mathcal{G}_{00}(\lambda)$  (функцию Грина). Для  $m < n$  имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{mn}(\lambda) &\equiv (\vec{h}_m, \hat{\mathcal{G}}(\lambda)\vec{h}_n) = \\ &= -\mathcal{P}_m(\lambda)\mathcal{Q}_n(\lambda) + \mathcal{P}_m(\lambda)\mathcal{P}_n(\lambda)\mathcal{G}_{00}(\lambda). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь  $\mathcal{P}_n(\lambda)$  — полиномы степени  $n$ , удовлетворяющие рекуррентному соотношению

$$b_n\mathcal{P}_{n+1}(\lambda) = (\lambda - a_n)\mathcal{P}_n(\lambda) - b_{n-1}\mathcal{P}_{n-1}(\lambda) \quad (5)$$

при начальных условиях

$$\mathcal{P}_{-1}(\lambda) = 0, \quad \mathcal{P}_0(\lambda) = 1 \quad (6)$$

(заметим, что базисные векторы  $\vec{h}_n$  можно выразить через порождающий вектор  $\vec{h}_0$  как  $\vec{h}_n = \mathcal{P}_n(\hat{\mathcal{L}})\vec{h}_0$ ),  $\mathcal{Q}_n(\lambda)$  — полиномы степени  $n - 1$ , удовлетворяющие тому же рекуррентному соотношению (5), но при начальных условиях

$$\mathcal{Q}_0(\lambda) = 0, \quad \mathcal{Q}_1(\lambda) = b_0^{-1}. \quad (7)$$

Функция Грина системы  $\mathcal{G}(\lambda) \equiv \mathcal{G}_{00}(\lambda)$  может быть легко записана в виде непрерывной дроби, которая сворачивается к следующему виду:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\lambda) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{G}_{(n)}(\lambda), \\ \mathcal{G}_{(n)}(\lambda) &= \frac{\mathcal{Q}_n(\lambda) - b_{n-1}\mathcal{Q}_{n-1}(\lambda)\mathcal{K}_\infty(\lambda)}{\mathcal{P}_n(\lambda) - b_{n-1}\mathcal{P}_{n-1}(\lambda)\mathcal{K}_\infty(\lambda)}. \end{aligned} \quad (8)$$

В (8)  $\mathcal{K}_\infty(\lambda)$  — функция, в которую сворачивается непрерывная дробь, соответствующая  $\mathcal{J}$ -матрице, все элементы которой равны своим асимптотическим значениям. Для предельных значений (3)

$$\mathcal{K}_\infty(\lambda) = \frac{4}{\lambda_m^2} \left\{ 2\lambda - \lambda + 2\mathcal{Z}(\lambda)\sqrt{\lambda|\lambda - \lambda_m|} \right\}, \quad (9)$$

$$\mathcal{Z}(\lambda) \equiv i\theta(\lambda)\theta(\lambda_m - \lambda) - \theta(\lambda - \lambda_m), \quad (10)$$

$\theta(x)$  — функция Хевисайда.

Область существования мнимой части функции Грина определяет полосу  $\mathcal{D}$  квазинепрерывного спектра оператора  $\hat{\mathcal{L}}$  (вообще говоря неодносвязную). Спектральная плотность  $g(\omega)$  определена при  $\omega \in \mathcal{D}$  и равна

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \mathcal{G}(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \mathcal{G}(\lambda). \quad (11)$$

Данный метод не использует в явном виде трансляционную симметрию кристаллической решетки и позволяет непосредственно вычислять спектральные плотности, соответствующие смещениям различных атомов рассматриваемой системы вдоль разных кристаллографических направлений  $i$ . Если порождающий вектор  $\vec{h}_0$  есть смещение атома с радиус-вектором  $\mathbf{r}$  в направлении  $i$ , то полученная с помощью (8)–(11) спектральная плотность  $g_i(\omega, \mathbf{r})$  будет характеризовать частотный спектр колебаний данного атома в данном направлении. Так, для температурной зависимости соответствующего среднеквадратичного смещения имеем

$$\langle u_i^2(\mathbf{r}, T) \rangle = \frac{\hbar}{m(\mathbf{r})} \int_{\mathcal{D}} \frac{g_i(\omega, \mathbf{r})}{\omega} \text{cth} \left( \frac{\hbar\omega}{2kT} \right) d\omega.$$

Фоновая плотность состояний твердого раствора с концентрацией примеси  $p$ , определяемая как

$$\langle g(\omega, p) \rangle = \frac{2\omega}{\pi N} \text{Sp Im} \left( \hat{\mathcal{L}}\omega^2 - \hat{\mathcal{L}} \right)^{-1}, \quad (12)$$

является самоусредняемой величиной [12–15] и может быть получена усреднением функций  $g_i(\omega, \mathbf{r})$  по всем положениям атомов  $\mathbf{r}$  и всем направлениям их смещений  $i$ .

Конкретные расчеты данной работы выполнены для модели, которая достаточно адекватно описывает твердый раствор  $\text{Ag}_{1-p}\text{Al}_p$ . И серебро, и алюминий имеют кристаллические ГЦК-решетки, постоянные которых очень близки (у серебра  $a \approx 4.08 \text{ \AA}$ , у алюминия  $a \approx 4.05 \text{ \AA}$ ). Межатомное взаимодействие обоих этих металлов (а следовательно, и рассматриваемого раствора) может быть вполне удовлетворительно описано в рамках взаимодействия ближайших соседей (см., например, [7]).

Для ГЦК-кристалла со взаимодействием ближайших соседей матрица оператора  $\hat{\mathcal{L}}$  может быть представлена в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{ik} \left( \mathbf{r}, \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \left[ \frac{a}{2} \frac{a}{2} 0 \right] \right) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')}} \begin{pmatrix} \alpha & \gamma & 0 \\ \gamma & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (13)$$

Остальные матрицы могут быть получены с помощью операций симметрии группы  $O_h$ , а матрица

$$\mathcal{L}_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \frac{1}{m(\mathbf{r})} (8\alpha + 4\beta)\delta_{ik}.$$

В идеальной решетке кубической симметрии и со взаимодействием только между ближайшими со-

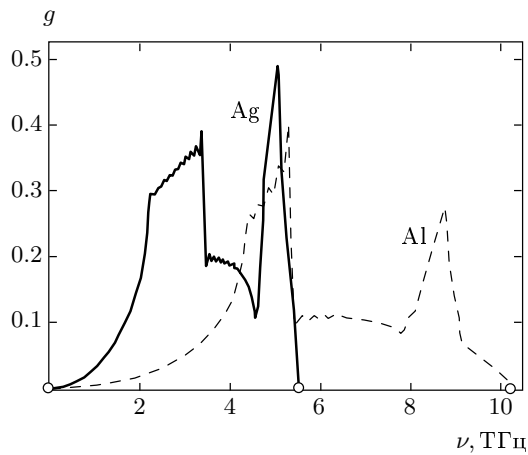


Рис. 1. Фононные плотности состояний чистых серебра (сплошная линия) и алюминия (штриховая линия)

седамя силовые константы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  могут быть однозначно восстановлены по упругим модулям кристалла [22]. Так, для серебра  $\alpha \approx 1.3432$ ,  $\beta \approx -0.2994$ ,  $\gamma \approx 1.5162$  ( $10^5$  дин/см), для алюминия  $\alpha \approx 1.1544$ ,  $\beta \approx -0.5157$ ,  $\gamma \approx 0.9448$  ( $10^5$  дин/см). На рис. 1 представлены фононные плотности идеальных решеток Ag и Al, рассчитанные по этим силовым постоянным методом  $\mathcal{J}$ -матриц (с помощью формул (2)–(11)).

В рассмотренной нами модели неупорядоченного твердого раствора мы считали, что благодаря близости постоянных решетки у обоих компонентов взаимодействие Ag–Ag и Al–Al будет таким же, как и у чистых материалов [22]. Взаимодействию алюминия с серебром приписали те же постоянные, что и взаимодействию серебра с серебром, поскольку силовые константы обоих металлов достаточно близки, серебро тяжелее почти в четыре раза и для межатомного взаимодействия в нем характерна меньшая нецентральность.

Случайное распределение примесей осуществлялось с помощью датчика псевдослучайных чисел, равномерно распределенных в интервале (0,1). Работа датчика основана на мультипликативном конгруэнтном методе [23]. Нами были вычислены плотности состояний для различных концентраций примесных атомов. Для каждого значения концентрации усреднение проводилось по нескольким тысячам случайных конфигураций распределения примеси, а для каждой конфигурации плотность состояний определялась усреднением нескольких десятков спектральных плотностей, соответствующим смещениям вдоль различных кристаллографических

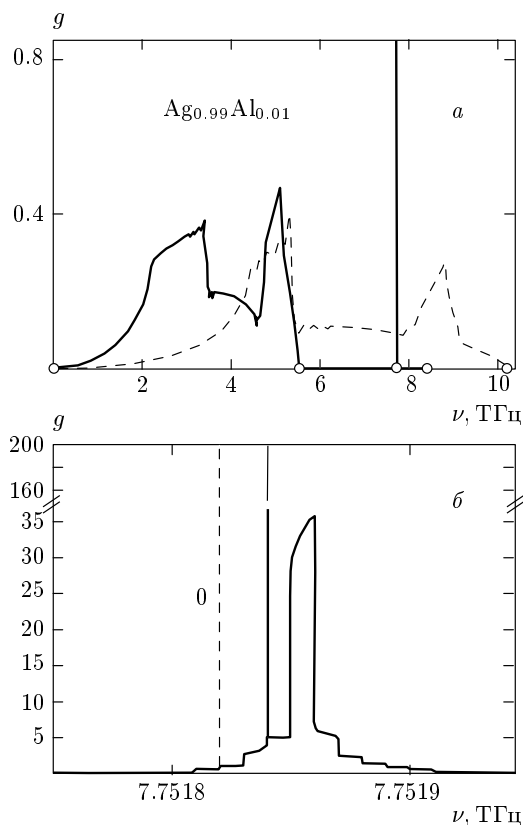
направлений нескольких десятков последовательно расположенных атомов.

Аналитические свойства вычисленных нами матриц Якоби при значениях  $p \gtrsim 0.1\%$  однозначно указывают на односвязность полосы квазинепрерывного фононного спектра неупорядоченных твердых растворов. Щель, отделяющая в случае изолированной примеси полосу сплошного спектра от локальной частоты, уже для предельно малых концентраций примесных атомов заполняется фононами. Собственные частоты лежат в интервале  $[0, \omega_m(p)]$ , где частота  $\omega_m(p)$  определяется асимптотическим поведением матричных элементов [18–20]. Она превышает значение частоты локального колебания, соответствующего изолированной примеси с таким же дефектом массы, но меньше, чем так называемая естественная граница спектра (см., например, [15]), т. е. чем максимальная частота колебаний идеальной кристаллической решетки алюминия ( $\sim 10.2$  ТГц). Последнее обстоятельство является следствием конечности ранга вычисляемых нами  $\mathcal{J}$ -матриц (в наших расчетах он равен 60) и, следовательно, невозможности возникновения в рассматриваемых конфигурациях (охватывающих несколько менее  $10^6$  атомов) «сколь угодно большой» области, занятой исключительно примесью Al. При  $p \lesssim 50\%$  поведение спектральных плотностей вблизи  $\omega_m(p)$  можно считать экспоненциальным затуханием, как и следует из общей теории фононных спектров неупорядоченных твердых растворов [12–15].

Односвязность области квазинепрерывного спектра рассматриваемых систем позволяет использовать для расчета функций Грина и спектральных плотностей их аппроксимацию аналитической функцией — непрерывной дробью (8)–(11). Такая аппроксимация позволяет с высокой точностью вычислять данные функции при любых значениях частоты, что особенно важно в данном случае, когда спектральные плотности содержат острые резонансные пики.

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ. ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ РЕЗОНАНСНЫЕ УРОВНИ, ВОЗНИКАЮЩИЕ ПРИ КОНЕЧНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЯХ ПРИМЕСИ

На рис. 2–5 представлена эволюция фононных плотностей состояний  $\langle g(\nu, p) \rangle$  с ростом концентрации примеси алюминия  $p(\nu \equiv \omega/2\pi)$ . Данные плотности состояний получены усреднением аппроксима-



**Рис. 2.** Фононные плотности состояний твердого раствора  $\text{Ag}_{0.99}\text{Al}_{0.01}$ : *a* — на всем частотном интервале; *b* — вблизи локальной частоты. Сплошные линии соответствуют функции  $\langle g(\omega) \rangle_{p=0.01}$ ; тонкая штриховая вертикальная прямая — локальная частота, рассчитанная в приближении [10]. Штриховая линия на рис. *a* — фононная плотность состояний чистого алюминия

ций спектральных плотностей (8)–(12), рассчитанных для многочисленных случайных конфигураций распределения примесных атомов. Эти рисунки иллюстрируют трансформацию локальной частоты в примесную зону.

На рис. 2–4 фрагменты *b* показывают участки этих функций, соответствующие тем значениям  $\nu > \nu_m^{(\text{Ag})}$  (граница полосы квазинепрерывного спектра идеальной решетки серебра  $\approx 5.5$  ТГц), на которых плотности состояний существенно отличны от нуля.

При  $p = 1\%$  (рис. 2, фрагменты *a* и *b*) колебания примесных атомов сильно локализованы. Их частоты находятся в очень узкой (шириной около  $3 \cdot 10^{-6} \nu_m^{(\text{Ag})}$ ) зоне вблизи частоты локального колебания ( $\nu_0$ ), обусловленного одной изолированной примесью. Эта частота с высокой точностью ( $\sim 0.01\%$ )

описывается в рамках аппроксимации, предложенной в [10]. Данная аппроксимация изображена штриховой линией и обозначена 0.

Для  $p = 5$  и  $10\%$  (рис. 3) локальный уровень  $\nu_0$  размывается. Форма примесных зон при данных концентрациях находится в хорошем согласии с общими результатами [12–15]. Количество примесных пар (примесей, взаимодействующих друг с другом непосредственно, т. е. в нашем случае являющихся ближайшими соседями) становится достаточным, чтобы заметно проявиться в фононном спектре. Для таких пар межпримесное взаимодействие проявляется уже в первом моменте спектральной плотности. В работе [10] было показано, что изменение второго момента спектральной плотности приводит к сдвигу локального уровня на  $\pm(1-3)\%$ . Такие смещенные уровни изображены на рис. 2, 3 штриховыми линиями, вблизи  $\nu_0$ . Изменение первого момента приводит к смещению локального уровня на величину около  $\pm(10-20)\%$ . Эти уровни ( $l^{(\mp)}$ ,  $\tau^{(\mp)}$ ,  $n^{(\mp)}$ ) изображены на рисунках тонкими штриховыми линиями. При  $\nu < \nu_m^{(\text{Ag})}$  фононная плотность состояний твердого раствора начинает заметно отличаться от соответствующей характеристики чистого серебра (штриховые кривые на фрагментах *a*).

Уровни  $l^{(\mp)}$  возникают при соответственно син- и противофазном смещении двух рядом расположенных примесных атомов вдоль соединяющей их прямой [10]. Уровни  $\tau^{(\mp)}$  и  $n^{(\mp)}$  соответствуют смещениям двух рядом расположенных примесей перпендикулярно к этой линии.

Образование троек рядом расположенных атомов приводит к появлению дополнительных резонансных пиков. На рис. 4 ( $p = 15$  и  $25\%$ ) дополнительными тонкими штриховыми линиями изображены рассчитанные в приближении, предложенном в [10], локальные частоты, обозначенные на рисунке как  $\text{rot}$ ,  $3^{(\mp)}$  и  $4^{(\mp)}$ . Частота  $\text{rot}$  отвечает малым вращательным смещениям правильного треугольника (или тетраэдра) вокруг оси третьего порядка, частоты  $3^{(\mp)}$  и  $4^{(\mp)}$  — соответственно смещению треугольника или тетраэдра как целого и их востороннему сжатию. При  $p = 25\%$  примесные пары начинают взаимодействовать как с одиночными примесями, так и между собой. При соотношении масс и силовых постоянных, описывающих межатомное взаимодействие в растворах  $\text{Ag}_{1-p}\text{Al}_p$  это приводит при данных концентрациях к образованию единой полосы квазинепрерывного спектра. Однако фононная плотность состояний раствора при  $\nu \gtrsim \nu_0$  имеет не аналитический вид. Соответствующие колебания квазилокализованы.

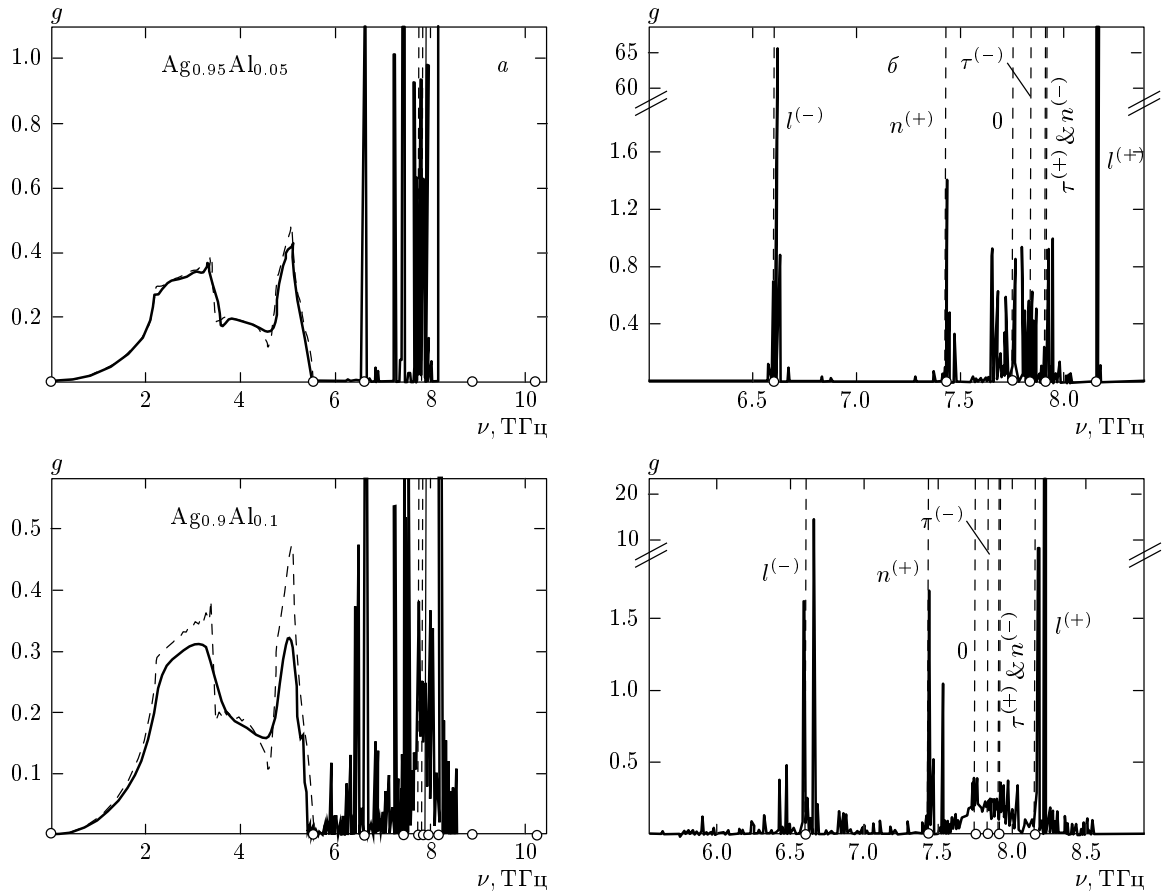


Рис. 3. Фононные плотности состояний твердых растворов  $Ag_{1-p}Al_p$  при  $p = 0.05$  и  $0.1$ : *a* — на всем частотном интервале, *б* — вне полосы квазинепрерывного спектра чистого Ag. Сплошные линии соответствуют функциям  $\langle g(\omega) \rangle_p$ , а тонкие штриховые вертикальные прямые — локальным частотам, рассчитанным в приближении [10]. Штриховые кривые на рис. *a* — фононная плотность состояний чистого Ag

Делокализация этих колебаний наступает при дальнейшем возрастании концентрации примеси. Так, фононная плотность состояний раствора  $Ag_{0.5}Al_{0.5}$  (рис. 5) уже не содержит при  $\nu > \nu_m^{(Ag)}$  резонансных пиков, а имеющаяся на ней в этом частотном интервале особенность согласуется с особенностями Ван Хова для чистых серебра и алюминия. Это свидетельствует о наличии в таком растворе достаточно больших кластеров каждой из его компонентов, что при данной концентрации является совершенно естественным.

Напомним, что нами рассмотрена модель, в которой межатомные взаимодействия Ag–Ag и Ag–Al считаются одинаковыми, а взаимодействие Al–Al таким же, как и в чистом алюминии. Возникновение при концентрациях примеси алюминия  $p \sim 1\text{--}5\%$  острых резонансных максимумов, соответствующих

локальным частотам, обусловленным смещением одного или нескольких примесных атомов, позволяет уточнить величины межатомных взаимодействий по измерениям частоты данных пиков. Действительно, как мы видим, частоты этих пиков хорошо описываются в рамках предложенного в [10] приближения. В данной работе они были выписаны через параметры  $\eta$  и  $\beta$ , характеризующие отклонения значений первых диагонального и недиагонального элементов матрицы Якоби оператора  $\hat{\mathcal{L}}$ ,  $a_0$  и  $b_0$ , от предельных значений (3), т. е. соответственно величин  $2(\pi\nu_m)^2$  и  $(\pi\nu_m)^2$ :

$$a_0 = \frac{2(\pi\nu_m)^2}{1 + \eta}, \quad b_0 = \frac{(\pi\nu_m)^2}{\sqrt{1 + \beta}}, \quad (14)$$

в виде несложного алгебраического выражения

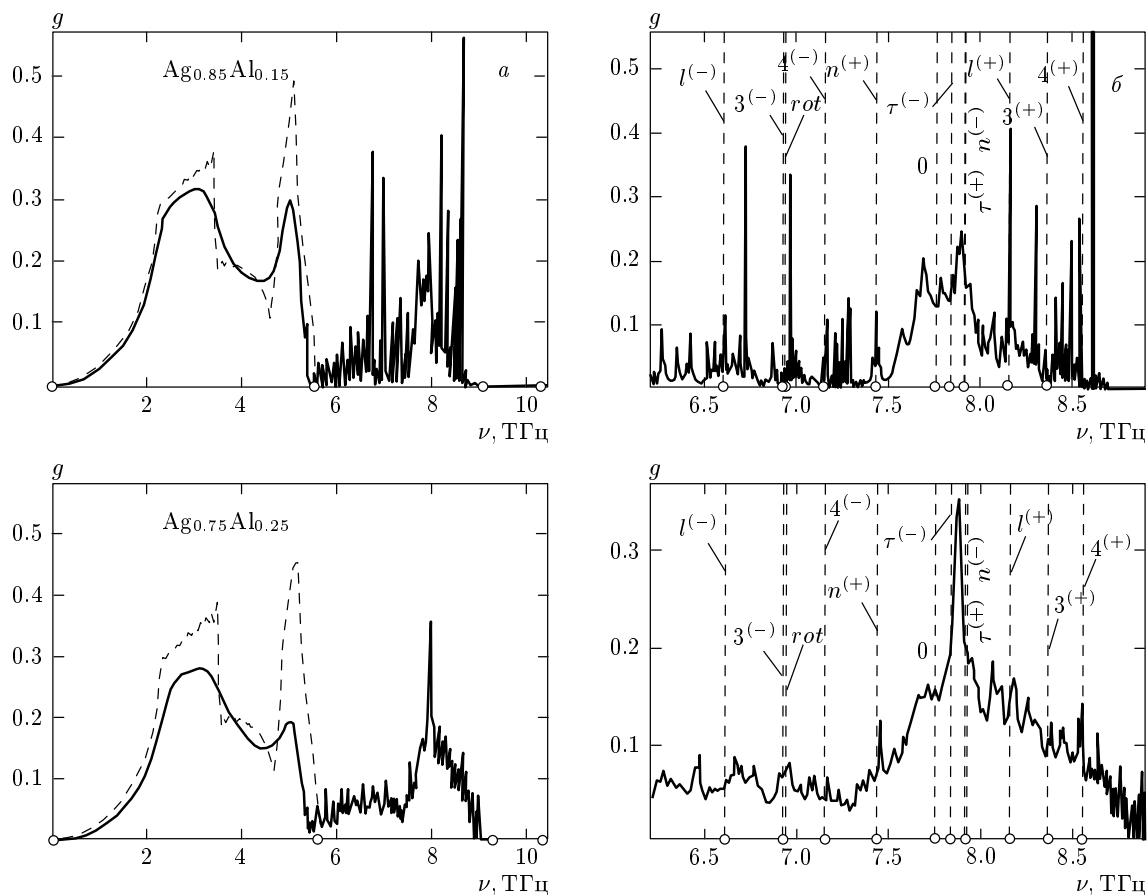


Рис. 4. Фоновые плотности состояний твердых растворов  $Ag_{1-p}Al_p$  при  $p = 0.15$  и  $0.25$

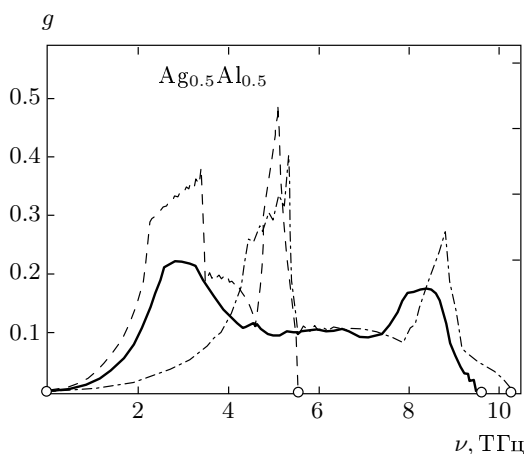


Рис. 5. Фоновая плотность состояний твердого раствора  $Ag_{0.5}Al_{0.5}$  — сплошная кривая; штриховая и штрихпунктирная кривые — фоновые плотности состояний соответственно чистых серебра и алюминия

$$\begin{aligned}
 \nu_l^2(\eta, \beta) = & \frac{\nu_m^2}{4\beta(1+\eta)} \times \\
 & \times \left\{ 2\beta - \eta - \sqrt{-\beta + \frac{(\eta - \beta)^2}{1 + \beta}} \right\} \times \\
 & \times \left\{ \theta \left( -\frac{3}{4} - \beta \right) + \theta \left( \beta + \frac{3}{4} \right) \theta \left( -\frac{1+2\beta}{3+4\beta} - \eta \right) \right\}. \quad (15)
 \end{aligned}$$

В каждом из подпространств  $H^{(i)}$ , порожденных (2) соответствующими смещениями одного или нескольких примесных атомов  $\vec{h}_0^{(i)}$ , элемент

$$a_0^{(i)} = \left( \vec{h}_0^{(i)}, \hat{\mathcal{L}} \vec{h}_0^{(i)} \right),$$

а элемент

$$b_0^{(i)} = \left| \hat{\mathcal{L}} \vec{h}_0^{(i)} - a_0^{(i)} \vec{h}_0^{(i)} \right|.$$

Таким образом, данные элементы являются простыми алгебраическими функциями силовых констант, описывающих взаимодействие примесных атомов между собой и с атомами основной решетки. Поэтому величины локальных частот, полученные с помо-

щью соотношений (14) также будут алгебраическими функциями этих силовых постоянных. Несмотря на громоздкость получаемых при этом выражений (из-за чего выписывать их явный вид в статье нецелесообразно), с их помощью несложно численно определить неизвестные силовые константы по измеренным экспериментально частотам соответствующих резонансных пиков.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные в настоящей работе плотности состояний неупорядоченных твердых растворов в кристаллической ГЦК-решетке со взаимодействием ближайших соседей дают, как минимум, качественную картину трансформации дискретных колебательных уровней, локализованных на примесных атомах, в примесную зону, формируемую делокализованными состояниями. Основной отличительной особенностью такой трансформации является возникновение по мере увеличения концентрации примеси дополнительных резонансных примесных уровней, связанных с колебаниями примесных пар, а также примесных кластеров, состоящих из большего числа атомов.

В структурах, в которых для описания межатомного взаимодействия необходимо учитывать взаимодействие более далеких соседей, трансформация локальных колебаний в примесные зоны также будет происходить с возникновением дополнительных резонансных пиков. При этом их число может возрасти из-за увеличения числа примесных конфигураций, где меняется первый момент спектральных плотностей примесных атомов.

Возможность вполне адекватного описания таких колебаний в рамках предложенного в [10] приближения дает возможность сравнительно несложно восстанавливать параметры дефектной решетки по измеренным частотам резонансных пиков в твердых растворах.

#### ЛИТЕРАТУРА

- И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **12**, 156 (1942) [см. также в кн: И. М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва, т. 1 (1987), с. 39].
- И. М. Лифшиц, ДАН СССР **48**, 83 (1945) [см. также в кн: И. М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва, т. 1 (1987), с. 62].
- И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **17**, 1076 (1948) [см. также в кн: И. М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва, т. 1 (1987), с. 73].
- I. M. Lifshitz, Nuovo Cim. Suppl. **3**, 716 (1956) [пер. в кн: И. М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва, т. 1 (1987), с. 106].
- А. М. Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристалла)*, Вища школа, Харьков (1988).
- А. Марадудин, *Дефекты и колебательный спектр кристаллов*, Мир, Москва (1968).
- Г. Лейбфрид, Н. Бройер, *Точечные дефекты в металлах*, Мир, Москва (1981).
- Ю. Г. Найдюк, Н. А. Черноплеков, Ю. Л. Шитиков, О. И. Шкляревский, И. К. Янсон, ЖЭТФ **83**, 1177 (1982).
- Ю. Г. Найдюк, И. К. Янсон, А. А. Лысых, Ю. Л. Шитиков, ФТТ **26**, 2734 (1984).
- А. В. Котляр, С. Б. Феодосьев, ФНТ **32**, 343 (2006).
- I. M. Lifshitz and A. M. Kosevich, Rep. Progr. Phys. **29**, 217 (1966) [пер. в кн: И. М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва, т. 1 (1987), с. 142].
- И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **44**, 1723 (1963).
- И. М. Лифшиц, УФН **83**, 617 (1964) [см. также в кн: И. М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва, т. 1 (1987), с. 197].
- I. M. Lifshitz, S. A. Grdedskul, and L. A. Pastur, J. Stat. Phys. **38**, 37 (1985) [пер. в кн: И. М. Лифшиц, *Избранные труды*, Наука, Москва, т. 1 (1987), с. 177].
- И. М. Лифшиц, С. А. Гредескул, Л. А. Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1982).
- Л. А. Фальковский, Письма в ЖЭТФ **71**, 225 (2000).
- Л. А. Фальковский, ЖЭТФ **117**, 735 (2000).
- В. И. Пересада, Дисс. ... докт. физ.-мат. наук, ФТИНТ АН УССР, Харьков (1972).
- В. И. Пересада, в сб.: *Физика конденсированного состояния*, ФТИНТ АН УССР, Харьков (1968), с. 172.
- В. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, В. С. Боровиков, ФНТ **1**, 461 (1975).
- R. Haydock, Sol. St. Phys. **35**, 129 (1980).
- S. B. Feodosyev, I. A. Gospodarev, V. O. Kruglov, and E. V. Manzhelii, J. Low Temp. Phys. **139**, 651 (2005).
- P. Lécuycr, CACM **31**, № 6 (1988).