

НИЗКОЧАСТОТНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ФОНОННЫХ СПЕКТРОВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ

И.А. Господарев, В.И. Гришаев, А.В. Котляр, К.В. Кравченко, Е.В. Манжелий, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, И.К. Галетич

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
61103, Харьков, пр. Ленина, 47

На микроскопическом уровне проанализированы фононные спектры твердых растворов замещения с конечными концентрациями примесных атомов. Рассчитаны фононные плотности состояний и локальные фононные плотности примесных атомов. Исследовано формирование квазилокальных колебаний и их эволюция с ростом концентрации примеси.

Ключевые слова: квазичастичный спектр, фонон, квазилокальное колебание, примесь.

1. Введение

Хорошо известно, что тяжелые или слабо связанные с атомами основной решетки примеси обогащают низкочастотную область фононного спектра и приводят к существенному изменению низкотемпературных термодинамических и кинетических характеристик (см., например, [1-7]). В линейном по концентрации приближении изменения фононного спектра как тяжелыми, так и легкими примесными атомами хорошо описываются в рамках теории регулярных возмущений И.М. Лифшица [8-10], в частности было предсказано [11] и достаточно подробно проанализировано и теоретически (см., например, [12, 13]), и экспериментально (см., например, [14-16]) формирование тяжелыми или слабо связанными примесями так называемых *квазилокальных колебаний* (КЛК) - резонансных максимумов в низкочастотной области фононного спектра и их вклад в низкотемпературные колебательные характеристики. Отметим, что наличие КЛК в фононном спектре кристалла существенно повышает эффективность восстановления низкочастотной части фононного спектра по температурным зависимостям колебательных термодинамических характеристик (см., например, [17]).

КЛК локализованы вблизи примесных атомов и их формирование во многом аналогично возникновению при наличии в

кристалле легких или сильно связанных примесей дискретных колебательных уровней (*локальных колебаний*) за пределами полосы сплошного спектра основной решетки. Вместе с тем между локальными и квазилокальными колебаниями существует важное принципиальное отличие, которое проявляется с ростом концентрации примесных атомов. Локальные колебания являются полюсами функции Грина возмущенного кристалла, их амплитуды экспоненциально затухают по мере удаления от примеси и, будучи расположены за пределами полосы квазинепрерывного спектра, не взаимодействуют с фононными модами основной решетки. С ростом концентрации легких или сильно связанных примесей изменения, вносимые ими в фононный спектр, могут быть определены в виде разложения по концентрации (см., например, [18-19]). Так, с ростом концентрации легких примесей в фононном спектре раствора начинают возникать острые резонансные пики, частоты которых совпадают с частотами локальных колебаний, обусловленных колебаниями изолированных пар примесных атомов, а затем и состоящих из примесей правильных треугольников и тетраэдров [20, 21]. КЛК не являются полюсами функции Грина – это обычные максимумы на фононной плотности состояний, не нарушающие ее аналитичности. Хотя, как мы покажем в следующем разделе, данные максимумы формируются колебаниями

именно примесных атомов, эти колебания взаимодействуют с фононными модами основной решетки. Поэтому при конечных (даже весьма небольших, порядка нескольких процентов) концентрациях тяжелых или слабо связанных примесных атомов происходит существенная перестройка всего фононного спектра кристалла, которая не описывается разложением по концентрации примеси. Так, ослабление связей между примесями аргона в матрице криптона приводит к характерному «двуэкстремальному» поведению температурной зависимости относительного изменения низкотемпературной теплоемкости, которое не может быть объяснено суперпозицией вкладов изолированных примесей, примесных пар, троек и т. д., а требует учета перестройки всего спектра [22].

Перестройка фононного спектра кристалла и делокализация КЛК при конечных концентрациях примеси в рамках приближения когерентного потенциала рассматривалась в работах [23-25].

Как правило, КЛК, возникают в интервале частот, соответствующие которым длины волн акустических фононов основной решетки уже при малых концентрациях примесных атомов становятся сравнимыми со средним расстоянием между дефектами (так называемым *параметром разупорядочения*). Поэтому взаимодействие КЛК с быстро распространяющимися акустическими фононами основной решетки (так называемыми *пропагонами*), как было показано в [27-28], носит характер *кроссовера Иоффе-Регеля* и может приводить к образованию бозонных пиков - аномального превышения низкочастотной фононной плотности над дебаевской [29-31].

Однако на микроскопическом уровне условия образования КЛК и, в особенности, их поведения при конечной концентрации примесных атомов и трансформации с ее ростом пока не изучено.

Настоящая работа посвящена анализу на микроскопическом уровне условий образования и характеристик КЛК. Исследована эволюция КЛК с ростом концентрации примесных атомов. Такой анализ

позволяет с единой точки зрения описать все низкочастотные особенности фононных спектров реальных кристаллов и твердых растворов.

2. Квазилокальные колебания. Формирование и эволюция с ростом концентрации примесных атомов

Для кристаллов с простой и высокосимметричной решеткой закон дисперсии низкочастотных фононов, то есть фононов с частотами, лежащими ниже первой особенности ван Хова, близок к звуковому $\omega_i \approx s_i k_i$, и колебательные характеристики идеальных систем могут быть достаточно удовлетворительно описаны в рамках дебаевского приближения. В области низких частот фононная плотность состояний совпадает с дебаевской, то есть при $\omega \rightarrow 0$ функция $\nu(\omega)$ спадает как ω^2 . Поэтому внедрение в кристалл разного рода дефектов может существенно обогащать низкочастотную область фононного спектра и приводить не только к количественным, но и к качественным изменениям в поведении низкотемпературных колебательных характеристик.

При малых концентрациях примесных атомов $p \ll 1$ колебательные характеристики твердого раствора можно описывать в линейном по p приближении:

$$\tilde{\nu}(\omega) = \nu(\omega) + p \sum_i \Delta\rho^{(i)}(\omega). \quad (1)$$

Суммирование ведется по всем циклическим подпространствам, в которых оператор $\hat{\Lambda}$, описывающий возмущение колебаний решетки изолированной тяжелой или слабо связанной примесью замещения, отличен от нуля; $\Delta\rho^{(i)}(\omega)$ - изменение спектральной плотности в каждом из таких подпространств; $\tilde{\nu}(\omega)$ и $\nu(\omega)$ фононные плотности состояний твердого раствора и идеального кристалла, соответственно. Если в каждом из циклических подпространств оператор $\hat{\Lambda}$ индуцирует регулярный вырожденный оператор, величину $\Delta\rho^{(i)}(\omega)$ можно вычислить, используя функцию спектраль-

ного сдвига [9, 10]. Используя выражения, полученные для этой функции в методе J -матриц [32-35], получим:

$$\begin{aligned} \Delta\rho(\omega) &= -\frac{d\xi(\omega)}{d\omega} = \\ &= \frac{\rho^2(\omega)}{\pi^2\rho^2(\omega) + [S(\omega) - \text{Re}G(\omega)]^2} \times \\ &\times \frac{d}{d\omega} \left[\frac{S(\omega) - \text{Re}G(\omega)}{\rho(\omega)} \right] \end{aligned} \quad (2)$$

где $\xi(\omega)$ - функция спектрального сдвига [10]; функция $S(\omega)$ описывает вносимое дефектом возмущение и зависит от параметров дефекта, $G(\omega)$ - локальная функция Грина идеального кристалла.

Если в каком-либо циклическом подпространстве уравнение

$$S(\omega) - \text{Re}G(\omega) = 0 \quad (3)$$

имеет решение $\omega = \omega_k$, то в окрестности этой точки (2) имеет резонансный характер.

$$\begin{aligned} -\frac{d\xi}{d\omega} &= \frac{2}{\pi} \frac{\Gamma}{4(\omega - \omega_k)^2 + \Gamma^2}; \\ \Gamma &\equiv \frac{\pi\rho(\omega)}{\frac{d}{d\omega} [S(\omega) - \text{Re}G(\omega)]_{\omega=\omega_k}} \end{aligned} \quad (4)$$

Уравнение (3) формально совпадает с уравнением Лифшица, которое определяет (разумеется при других значениях функции $S(\omega)$) частоты дискретных колебательных уровней, лежащих вне полосы квазинепрерывного спектра кристалла [9, 10]. Однако данные дискретные уровни, в отличие от величин ω_k , являются полюсами возмущенной локальной функции Грина. Функция Грина не может иметь полюса в полосе квазинепрерывного спектра. Возможность определения частот КЛК с помощью уравнения (3) обусловлена тем, что при низких частотах $|\text{Re}G_{00}(\omega)| \gg \text{Im}G_{00}(\omega)$, хотя для многих реальных значений параметров дефекта при $\omega = \omega_k$, величину спектральной плотности идеального кристалла нельзя счи-

тать пренебрежимо малой.

Проанализируем квазилокальные колебания, обусловленные примесью замещения в ГЦК кристалле с центральным взаимодействием ближайших соседей. Взаимодействие примеси с основной решеткой будем также считать чисто центральным, поэтому, как отмечалось в предыдущем разделе, обусловленное ею возмущение будет регулярным и вырожденным. Рассмотрим два случая: изотопическую примесь с массой в четыре раза превышающей массу основной решетки (то есть дефект массы $\varepsilon \equiv \frac{\Delta m}{m} = 3$) и примесный атом с массой равной массе атома основной решетки $\varepsilon = 0$, но связанный с основной решеткой в четыре раза слабее, чем атомы основной решетки связаны между собой (дефект связи $\nu \equiv \frac{\Delta\alpha}{\alpha} = -\frac{3}{4}$). В первом случае оператор $\hat{\Lambda}$ индуцирует ненулевой оператор только в циклическом подпространстве, порожденном смещением самого примесного атома.

Принадлежащие этому подпространству векторы преобразуются по неприводимому представлению τ_5^5 группы симметрии рассматриваемой решетки O_h (обозначения из [36]). В данном подпространстве спектральная плотность идеальной решетки совпадает с ее плотностью состояний. Функция $S(\omega)$ для изотопической примеси имеет вид [32, 33]:

$$S_{is}(\omega) = -\frac{2}{\omega\varepsilon} \quad (5)$$

Во втором случае, кроме подпространства $H^{(\tau_5^5)}$, в котором функция $S(\omega)$ имеет вид

$$S_w^{(\tau_5^5)}(\omega) = \frac{2}{\omega} + \frac{\omega_m^2(1+\nu)}{\omega^3\nu}, \quad (6)$$

отличными от нуля будут операторы, индуцированные оператором $\hat{\Lambda}$ в циклических подпространствах, преобразующихся по неприводимым представле-

ниями $\tau_+^1, \tau_+^3, \tau_+^4$ и τ_-^4 той же группы O_h .
Во всех этих четырех подпространствах функции S совпадают

$$\begin{aligned} S_w^{(\tau_+^1)}(\omega) &= S_w^{(\tau_+^3)}(\omega) = S_w^{(\tau_+^4)}(\omega) = \\ &= S_w^{(\tau_-^4)}(\omega) = S'_w(\omega) = \frac{16\omega}{\omega_m^2 \nu}. \end{aligned} \quad (7)$$

Для слабо связанной примеси функция $S'_w \leq S_{lim} = \frac{16\omega}{\omega_m}$ и, как видно из рис. 1, уравнение (3) не может иметь решений в циклических подпространствах $H^{(\tau_+^1)}, H^{(\tau_+^3)}$, и $H^{(\tau_+^4)}$.

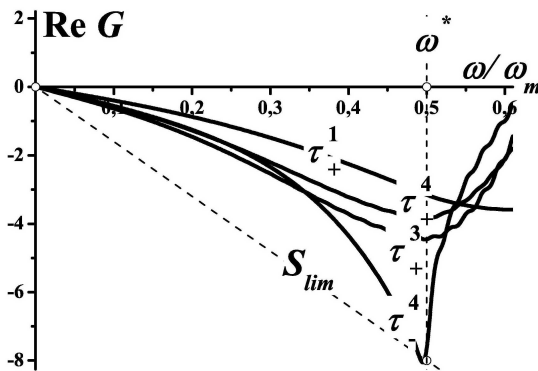


Рис. 1. Вещественные части функций Грина в циклических подпространствах, где примесный атом покоится.

В подпространстве $H^{(\tau_-^4)}$ решение возможно для примеси, силовое взаимодействие которой с атомами основной решетки слабее взаимодействия атомов основной решетки между собой не менее чем в 50 раз и при этом значение ω_k будет практически совпадать с первой особенностью ван Хова (частоту этой особенности будем обозначать ω^*). Поэтому для реальных значений параметра ν уравнение (3) может иметь решение только в подпространстве $H^{(\tau_-^4)}$. Это решение для обоих рассматриваемых случаев приведено на рис. 2.

Вещественная часть функции Грина (кривые 2 на обоих фрагментах) пересекает штриховые кривые 3, которыми представлены зависимости (5) – верхний фрагмент и (6) – нижний фрагмент, в соответствующих точках ω_k .

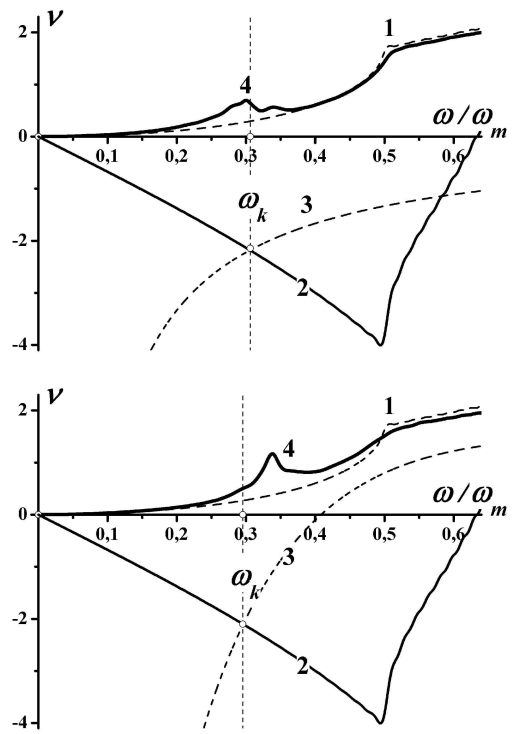


Рис. 2. Графические решения уравнения (3) в циклическом подпространстве, порожденном смещением примесного атома: верхний фрагмент – для тяжелой изотопической примеси; нижний – для слабо связанной примеси.

На этом же рисунке приведены спектральные плотности $\rho^{(\tau_-^4)}$ идеального кристалла, совпадающие с его фоновой плотностью состояний $\nu(\omega)$ – кривые 1 (штриховые) и фоновые плотности состояний соответствующих твердых растворов концентрации $p = 5\%$.

Значение фоновой плотности состояний $\nu(\omega_k)$ нельзя считать пренебрежимо малым ($\nu(\omega_k) \sim 0.1 \text{Re} G(\omega_k)$). Поэтому, как видно из рис. 2, частоты максимумов на кривых 4, хотя и находятся вблизи частоты ω_k , но отнюдь с ней не совпадают (особенно для случая примеси слабо связанной – нижний фрагмент). Вместе с тем для слабо связанной примеси следует ожидать большей степени локализации КЛК на примесных атомах.

На рис. 3 изменение низкочастотной плотности состояний, обусловленных введением в кристалл $p = 5\%$ тяжелых (верхний фрагмент) и слабо связанных (нижний фрагмент) примесных атомов ($\Delta\nu(\omega) = \tilde{\nu}(\omega) - \nu(\omega)$ – кривая 1) сопостав-

лено со спектральною щільністю ізолированого примесного атома $\tilde{\rho}(\omega)$ (кривая 2 - $0.05 \cdot \tilde{\rho}(\omega)$)

$$\tilde{\rho}(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \left(\tilde{h}_0^{(\tau)} \left[\omega^2 \hat{I} - \hat{L} - \hat{\Lambda} \right]^{-1} \tilde{h}_0^{(\tau)} \right). \quad (8)$$

Отметим, что данная спектральная плотность имеет характерный резонансный лоренцевский вид, аналогичный (4) и на ней отсутствуют какие-либо сингулярности типа ван хововских. Частоты максимумов на спектральных плотностях $\tilde{\rho}(\omega)$ (точки ω_{ql}) и на кривых $\Delta v(\omega)$ совпадают с достаточно высокой точностью, особенно для случая слабо связанной примеси. Это свидетельствует о сильной локализации КЛК на примесных атомах. Поэтому частоту ω_{ql} можно с большим основанием, чем ω_k определить как квазилокальную частоту. На данном рисунке представлены также (кривые 3) функции $\rho_{01}^{(\tau)}(\omega)$ спектральные корреляторы смещений примесных атомов с их первой координационной сферой.

$$\rho_{01}^{(\tau)}(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \tilde{G}_{01}^{(\tau)}(\omega^2) = P_1(\omega^2) \rho^{(\tau)}(\omega),$$

где $\tilde{G}^{(\tau)}(\omega^2) = \left(\tilde{h}_1^{(\tau)} \left[\omega^2 \hat{I} - \hat{L} - \hat{\Lambda} \right]^{-1} \tilde{h}_0^{(\tau)} \right);$

$P_1(\omega^2)$ - полином, определенный рекуррентными соотношениями [31-33] для J -матрицы возмущенного оператора $\hat{L} + \hat{\Lambda}$. Спектральный коррелятор $\rho_{01}(\omega)$ обращается в нуль при $\omega = \omega_E$ - эйнштейновской частоте соответствующего подпространства ($\omega_E^2 = \int_0^{\omega_m} \omega^2 v(\omega) d\omega$). То есть при $\omega = \omega_E$ корреляция с первой координационной сферой отсутствует и чем ближе частота ω_{ql} к ω_E , тем сильнее степень локализации КЛК. Как видно из рис. 3 частота КЛК для слабо связанной примеси примерно втрое ближе к ω_E , чем для изотопической и квазилокальный максимум имеет для слабо связанной примеси более острый резонансный вид, чем для тяжелого изотоп-дефекта.

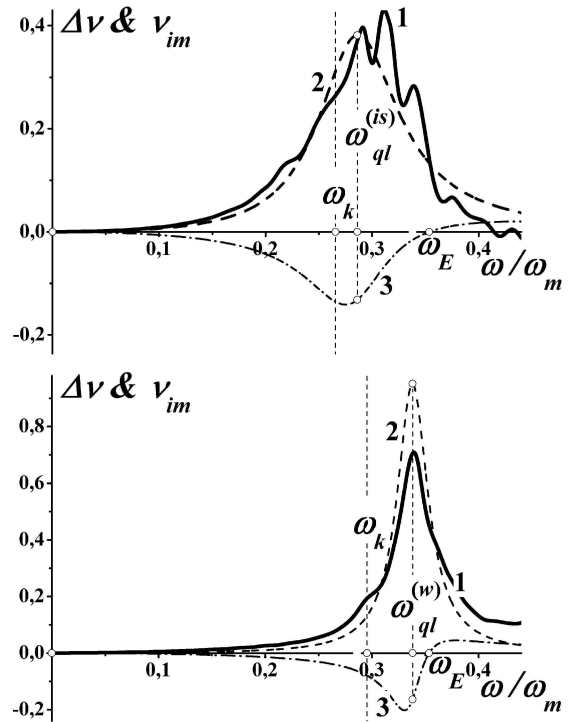


Рис. 3. Фононная плотность для концентрации примеси 5% (кривые 1); спектральные плотности изолированных примесных атомов (кривые 2); спектральные корреляторы примеси с ее ближайшим окружением (кривые 3). Верхний фрагмент - изотопическая примесь, нижний - слабо связанная примесь.

На рис. 4 представлена эволюция фононных плотностей состояний неупорядоченных твердых растворов с ростом концентрации тяжелой изотопической примеси. Приведены фононные плотности состояний $v(\omega)$ для концентраций $p = 0.05; 0.10; 0.25$ и 0.5 (сплошные линии на соответствующих фрагментах рисунка). Наряду с этими кривыми на каждом из фрагментов, в качестве некоторого репера, изображены зависимости $v(\omega, p)$ идеального кристалла-матрицы и также идеальной решетки, состоящей из тяжелых ($\epsilon = 3$) атомов, которые при описании раствора считаются изотоп-дефектами (тонкие штриховые линии). Спектральная плотность системы $\rho(\omega)$ является, как известно (см., например, [17, 18]), самоусредняемой величиной и может быть получена усреднением по всем положениям \mathbf{r} и направлениям смещений i функций $\rho_i(\omega, \mathbf{r})$ - спектральных плотностей в циклических под-

пространствах, порожденных смещениями атомов с радиус-вектором \mathbf{r} в кристаллографическом направлении i . Нами были вычислены спектральные плотности $v(\omega, p) \equiv \langle \rho_i(\omega, \mathbf{r}) \rangle_p$ для различных концентраций случайно расположенных 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. Сразу отметим, что уже при $p = 0.05$ кристаллическая регулярность расположения атомов существенно нарушена. Поэтому при описании квазичастичных спектров такого раствора оперировать понятием *первая зона Бриллюена* нельзя. Вместе с тем функция $v(\omega, p)$ вблизи частоты ω^* не только при $p = 0.05$, но и при $p = 0.10$ качественно меняет свое поведение и это изменение полностью аналогично изменению поведения фоновой плотности состояний вблизи первой особенности ван Хова. Напомним, что первая особенность ван Хова (см., например, [1, 2]) соответствует перестройке топологии изочастотных поверхностей - переходу от замкнутых (при $\omega < \omega^*$) к открытым вдоль некоторого направления в обратном пространстве (при $\omega > \omega^*$). Такой переход обусловлен касанием изочастотной поверхности границы первой зоны Бриллюена и в отсутствие кристаллической трансляционной симметрии говорить о таком переходе нельзя. Отметим, что наступающая при определенных частотах локализация фононов некоторой поляризации вдоль каких-либо направлений не связана напрямую с трансляционной симметрией кристалла, а будет присуща и разупорядоченным системам. В случае идеального кристалла частоты, при которых происходит «торможение» очередной фононной моды одинаковы для всего образца и проявляются в поведении

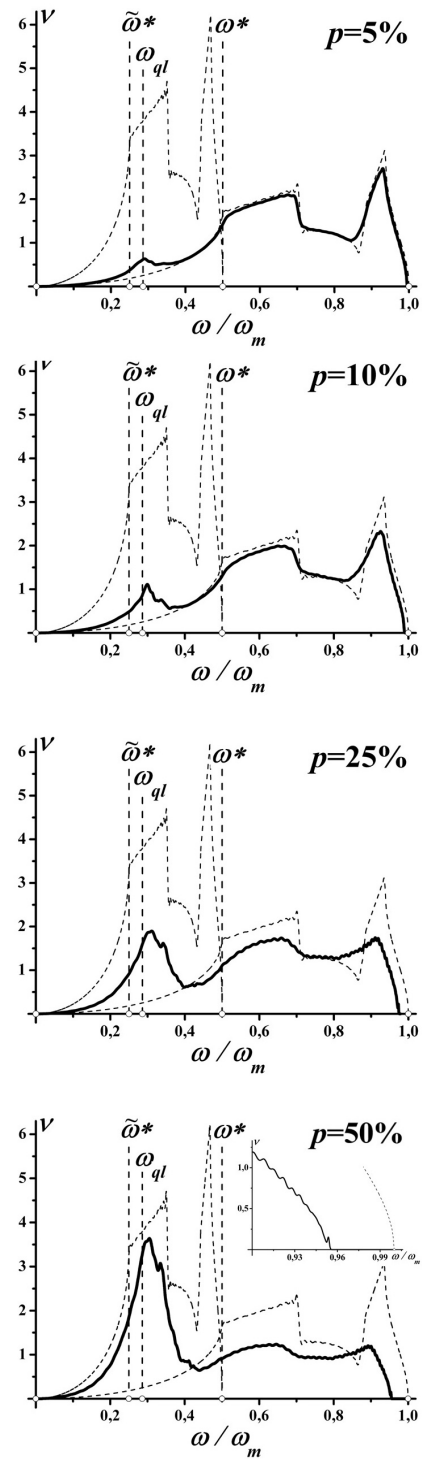


Рис. 4. Эволюция фоновой плотности состояний неупорядоченного твердого раствора с ростом концентрации тяжелой изотопической примеси.

фононной плотности как сингулярности, вид которых определяется размерностью решетки. Для структуры с нарушенной трансляционной симметрией каждое такое «торможение» имеет место на некотором частотном интервале, и соответствующие сингулярности будут сглажены.

Уже при $p = 0.10$ квазилокальный пик обладает некоторой структурой, отдаленно напоминающей фононную плотность состояний ГЦК-кристалла, определенную по малому числу моментов - J -матрице ранга $3 \div 5$ [32], что обусловлено формированием примесных кластеров соответствующего размера. Левый склон пика приобретает параболическую форму, и квазилокальная частота становится новой границей пропaгонной зоны. При этом на фононной плотности еще можно идентифицировать высокочастотные особенности ван Хова основной решетки. С ростом концентрации размер примесных кластеров растет, и граница пропaгонной зоны становится более отчетливой. При $p = 0.25$ эта граница уже имеет вид излома, аналогичного первой особенности ван Хова в регулярном кристалле.

При $p = 0.5$ в основном завершена трансформация квазилокального максимума в спектр решетки тяжелых атомов. Отчетливо видны две особенности ван Хова: первая, отделяющая пропaгоны от диффузонов и еще одна, выше которой фононы распространяются крайне медленно (локонная область). В этой области вид кривой $\nu(\omega, 0.5)$ напоминает фрактальный (аналогично полученному в [36] для одномерного твердого раствора). Отчетливо видно (см. врезку на фрагменте $p = 0.5$), что спектр оканчивается характерным для неупорядоченных систем экспоненциальным затуханием колебаний [17, 18]. Тот факт, что максимальная частота в приведенных на рис. 4 спектрах отлична от так называемой *естественной границы* (в рассматриваемом случае – максимальной частоты основной решетки), объясняется тем, что ранг рассчитанных нами J -матриц конечен ($n = 76$) и не допускает сколь угодно больших размеров кластера, как атомов основной решетки, так и примеси.

С дальнейшим ростом концентрации в твердом растворе образуются примесные кластеры достаточно большого размера, в которых можно идентифицировать различные кристаллографические направления. Частота $\tilde{\omega}^*$ соответствует обраче

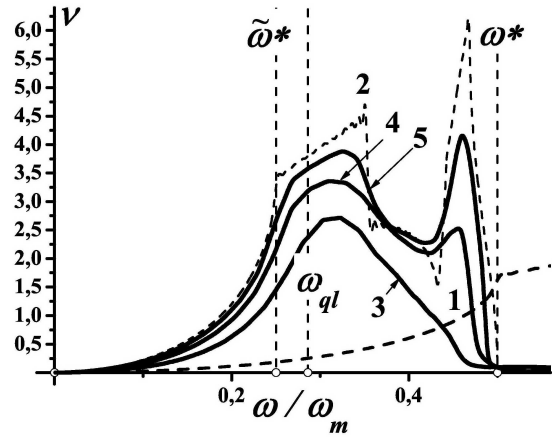


Рис. 5. Вклады тяжелых примесных атомов в фононные плотности состояний твердых растворов с высокой концентрацией примеси. Кривая 1 (штриховая) фононная плотность состояний идеальной решетки ($p=0$); кривая 2 (штриховая) - идеальной решетки состоящей из тяжелых атомов ($p=100\%$); кривая 3 (сплошная) - $p=50\%$; кривая 4 (сплошная) - $p=75\%$; кривая 5 (сплошная) - $p=90\%$.

нию в нуль групповой скорости поперечно поляризованных фононов в данных кластерах вдоль кристаллографического направления ГЛ (то есть нормально к плотноупакованным плоскостям ГЦК-решетки). Эволюция с изменением концентрации p от 50% до 100% низкочастотных частей вкладов в фононные плотности состояний от примесных атомов представлена на рис. 5.

3. Выводы

Таким образом, условием существования КЛК в пропaгонной зоне является существование в этом частотном интервале решения уравнения (3). Их частоты определяется частотой максимума на мнимой части локальной функции Грина примесного атома. Распространение квазилокальных колебаний происходит с очень малыми скоростями и может быть представлено в виде расходящихся волн. При конечных концентрациях примеси p на этих волнах происходит рассеяние квазиплоских акустических волн и уже при $p \sim 10\%$ квазилокальная частота становится границей пропaгонной области фононного спектра раствора.

Авторы выражают благодарность В.М. Ризаку за интерес к работе и полезные обсуждения.

Работа поддержана Грантом # 4/10-Н НАН Украины.

Литература

1. Косевич А.М. Теория кристаллической решетки. – Харьков: Вища школа, 1988. – 280 с.
2. Kossevich A.M. The Crystal Lattice (Phonons, Solitons, Dislocations). – Berlin: WILEY-VCH Verlag Berlin GmbH, 1999. – 326 с.
3. Марадудин А. Дефекты и колебательный спектр кристаллов. – Москва: Мир, 1968. – 432 с.
4. Maradudin A.A., Montroll E.W., Weiss G.N., Ipatova I.P. Lattice Dynamics and Models of Interatomic Forces Springer Series in Solid State Sciences. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1982. – 326 с.
5. Лейбфрид Г., Бройер П. Точечные дефекты в металлах. – Москва: Мир, 1981. – 439 с.
6. Бётгер Х. Принципы динамической теории решетки. – Москва: Мир, 1986. – 392 с.
7. Жернов А.П., Черноплеков Н.А., Мрозан Э. Металлы с немагнитными примесными атомами. – Москва: Энергоатомиздат, 1992. – 368 с.
8. Лифшиц И.М. К теории регулярных возмущений // ДАН СССР. – 1945. – Т.48. – №2. – С. 83 - 86.
9. Лифшиц И.М. О вырожденных регулярных возмущениях. II. Квазинепрерывный и непрерывный спектры // ЖЭТФ. – 1948. – Т.17. – №12. – С. 1076 - 1089.
10. Лифшиц И.М. Об одной задаче теории возмущений, связанной с квантовой статистикой // УМН. – 1952. – Т.7. – №1. – С. 171 - 180.
11. Каган Ю., Иосилевский Я. Эффект Моссбауэра для примесного ядра в кристалле I // ЖЭТФ. – 1962. – Т.44. – №1. – С. 259 - 272.
12. Пересада В.И., Толстолужский В.П. О влиянии примесных атомов на термодинамические свойства ГЦК-решетки. – Харьков: препринт ФТИНТ АН УССР. – 1970. – 30 с.
13. Пересада В.И., Толстолужский В.П. Низкотемпературная теплоемкость ГЦК-решетки, содержащей примеси замещения // ФНТ. – 1977. – Т.3. – №6. – С. 788 - 800.
14. Панова Г.Х., Самойлов Б.М. Экспериментальное обнаружение аномалии в теплоемкости металла с тяжелыми примесными атомами // ЖЭТФ. – 1965. – Т.49. – №2. – С. 456 - 458.
15. Cape J.A., Lehman G.M., Johnston W.V., de Wames R.E. Calorimetric observation of virtual bound-mode phonon states in dilute Mg-Pb and Mg-Cd alloys // Phys. Rev. Lett. – 1966. – Т.16. – №20. – С. 892- 895.
16. Манжелий В.Г., Чаусов В.П., Коваленко С.И., Теплоемкость твердых растворов Ar--Xe при низких температурах // ФТТ. – 1970. – Т.12. – №9. – С. 2764 – 2766.
17. Сабодош В.М., Різак І.М., Різак В.М., Обчислення густини фононних станів для кристалів з $C_V(T)$ методом регуляризації Тіхонова: на прикладі $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{Se}_6$ // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. – 2008. – №23. – С. 134 – 140.
18. Лифшиц И.М., Пастур Л.А., Гредескул С.А. Введение в теорию неупорядоченных систем. – Москва: Наука, 1982. – 358 с.
19. Lifshitz I.M., Gredeskul S.A., Pastur L.A. Introduction to the Theory of Disordered Systems - New York: Wiley, 1988. – 462 с.
20. Господарев И.А., Гришаев В.И., Котляр А.В., Круглов О. Манжелий Е.В.

- Сыркин Е.С., Феодосьев С.Б. Особенности трансформации локальных уровней в примесную зону на примере неупорядоченных твердых растворов $Ag_{1-p}Al_p$ // ЖЭТФ. – 2007. – Т.132. – №1(7). – С. 11 - 18.
21. Косевич А.М., Feodosyev S.B., Gospodarev I.A., Grishaev V.I., Kotlyar O.V., Kruglov V.O., Manzhelii E.V., Syrkin E.S. Evolution of discrete local levels into an impurity band in solidified inert gas solution // ФНТ. – 2007. – Т.33. – №6/7. – С. 735 - 740.
 22. Bagatskii M.I., Feodosyev S.B., Gospodarev I.A., Kotlyar O.V., Manzhelii E.V., Nedzvetskiy A.V., Syrkin E.S. // ФНТ. – 2007. – Т.33. – №6/7. – С. 741 - 746.
 23. Иванов М.А. Динамика квазилокальных колебаний при высокой концентрации примесных центров // ФТТ. – 1970. – Т.12. – №7. – с. 1895 – 1905.
 24. Иванов М.А., Скрипник Ю.В. Возникновение примесной зоны состояний квазиблоховского типа в маломерных системах // ФТТ. - 1992. - Т.34, № 2. - С. 641 - 649.
 25. Иванов М.А., Скрипник Ю.В. К вопросу о сходимости и парных поправках к когерентному потенциалу // ФТТ. - 1994. - Т.36, № 1. - С. 94 – 105.
 26. Elliott S.R., A Unified Model for the Low-Energy Vibrational Behaviour of Amorphous Solids // Europhys.Lett. – 1992. – Т.19. – №3. – С. 201 – 206.
 27. Klinger M.I., Kosevich A.M. Soft-mode-dynamics model of acoustic-like high-frequency excitations in boson-peak spectra of glasses // Phys. Lett. A. – 2001. – Т.280. – №5-6. – С. 365-370.
 28. Klinger M.I., Kosevich A.M. Soft-mode dynamics model of boson peak and high frequency sound in glasses: “inelastic” Ioffe-Regel crossover and strong hybridization of excitations // Phys.Lett. A. – 2002. – Т.295. – №5-6. – С. 311 - 317.
 29. Leonforte F., Tanguy A., Wittmer J.P., Barrat J.-L., Inhomogeneous Elastic Response of Silica Glass // Phys.Rev. Lett. – 2006. - Т.97. – С. 055501-1 - 055501-4.
 30. Gurevich V.L., Parshin D.A., Schrober H.R. Anharmonicity, vibrational instability, and the Boson peak in glasses // Phys.Rev. B. – 2003. – Т.67. – С. 094203-01 - 094203-10.
 31. Rufflé B., Foret M., Courtens E., Vacher R., Monaco G. Observation of the Onset of Strong Scattering on High Frequency Acoustic Phonons in Densified Silica Glass // Phys.Rev.Lett. – 2003. - Т.90. – С. 095502-1 - 095502-4
 32. Пересада В.И. Новый вычислительный метод в теории гармонических колебаний кристаллической решетки, диссертация на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук. – Харьков: ФТИНТ АН УССР, 1972. – 224 с.
 33. Пересада В.И. Новый вычислительный метод в теории кристаллической решетки. // Физика конденсированного состояния. - Харьков, ФТИНТ АН УССР - 1968. - Вып.2. -- С. 172-210.
 34. Пересада В.И., Афанасьев В.Н., Боровиков В.С. О вычислении функции распределения одномагнитных возбуждений в ферромагнетиках // ФНТ. – 1975. - Т.1. – № 4. – С. 461 - 472.
 35. Haydock R., Heine V. Kelly M.J. Electronic structure based on the local atomic environment for tight-binding bands // Journ. of Phys. C. - 1972. - Т.5. - №20. – С. 2845-2858.
 36. Ковалев О.В. Неприводимые представления пространственных групп. – Киев: Издательство АН УССР, 1961. – 138 с.
 37. Иванов М.А., Скрипник Ю.В., Молодид В.С. Колебательный спектр в окрестности локальной моды в линейных цепочках с изотопическими примесями // ФНТ. - 1997. - Т. 30. - №2. - С. 217 - 225.

LOW FREQUENCY PECULIARITIES OF PHONON SPECTRA OF SOLID SUBSTITUTIONAL SOLUTION. INTERACTION BETWEEN FAST ACOUSTIC PHONONS WITH QUASI LOCAL VIBRATIONS

I.A. Gospodarev, V.I. Grishaev, O.V. Kotlyar, K.V. Kravchenko, E.V. Manzhelii, E.S. Syrkin, S.B. Feodosyev, I.K. Galetich

B.I. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering NAS of Ukraine
61103, 47 Lenin ave., Kharkov, Ukraine

Phonon spectra of solid substitutional solution with finite concentration of impurities have been analyzed on the microscopical level. The phonon densities of states and local phonon densities of impurity atoms are calculated. The formation of quasilocal vibrations and their evolution with increasing of the concentration of impurities are investigated.

Key words: quasi-particle spectra, phonon, quasi-local vibration, impurity.

НИЗЬКОЧАСТОТНІ ОСОБЛИВОСТІ ФОНОННИХ СПЕКТРІВ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ ЗАМІЩЕННЯ

І.О. Господарьов, В.І. Гришаєв, О.В. Котляр, К.В. Кравченко, О.В. Манжелій, Є.С. Сиркін, С.Б. Феодосьєв, І.К. Галетич

Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України
61103, Харків, пр. Леніна, 47

На мікроскопічному рівні проаналізовані фонові спектри твердих розчинів заміщення з кінцевими концентраціями домішкових атомів. Розраховані фонові густини станів та локальні фонові густини домішкових атомів. Досліджено формування квазілокальних коливань та їхня еволюція зі зростанням концентрації домішок.

Ключові слова: квазічастинний спектр, фонон, квазілокальне коливання, домішок.