

## ВЛИЯНИЕ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ ИСКАЖЕНИЙ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛЕБАНИЙ В ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЕ

© М.А.Мамалуй, Е.С.Сыркин, С.Б.Феодосьев

Физико-технический институт низких температур Академии наук Украины,  
310164 Харьков, Украина  
(Поступила в Редакцию 9 января 1996 г.  
В окончательной редакции 20 мая 1996 г.)

Получены точные аналитические выражения для локальных плотностей состояний и функции спектрального сдвига в модели одномерного кристалла при наличии локального дефекта, учитывающего изменение силового взаимодействия между двумя произвольно выбранными соседними атомами. Отдельно рассмотрен случай, когда данное взаимодействие равно нулю, что соответствует полуограниченной линейной цепочке. Вычисления проведены с помощью аппарата цепных дробей. Проанализирован вклад такого дефекта в аддитивные термодинамические характеристики.

Наличие дефектов в кристаллической решетке существенно влияет на термодинамические, кинетические и резонансные свойства кристаллов (см., например, [1-4]). Причем это влияние зависит и от размерности дефекта и от размерности решетки, в которой эти дефекты находятся. Так, локальные дефекты [5,6] (примесные атомы замещения и внедрения) а также двумерные дефекты [7,8] (свободная поверхность, граница раздела сред, дефекты упаковки) обуславливают целый ряд отличий по сравнению с обычными трехмерными соединениями.

При теоретическом анализе воздействия дефектов на колебательный спектр кристалла можно выделить два взаимно дополняющих друг друга подхода: 1) использование моделей, по возможности близких к реальной ситуации, что требует разработки довольно громоздких (как правило численных) методов, дающих приближенные результаты; 2) использование простых моделей, например одномерных систем, на первый взгляд далеких от реальности, но позволяющих получить точные результаты. Возможность получения точных результатов позволяет, с одной стороны, выяснить те особенности, которые могут остаться незамеченными при численном анализе, а с другой стороны, оценить степень приближения расчетов, используемых для рассмотрения более сложных моделей. Кроме того, одномерные системы являются предельной ситуацией при рассмотрении квазинизкоразмерных структур, активно изучаемых в последнее время.

В качестве модели поверхности в трехмерных системах обычно используется модель И.М. Лифшица и Л.Н. Розенцвейга [9], соответствующая обрыву связей по одну сторону от выбранной плоскости в бесконечном кристалле. Аналогом такой модели «поверхности» в одномерном случае является линейная цепочка с отсутствием взаимодействия по одну сторону от выделенного атома [10,11]. Влияние границы раздела сред в такой модели может быть учтено изменением одной из силовых связей в бесконечной линейной цепочке.

Рассмотрим линейную цепочку, состоящую из атомов массы  $m$ , каждый из которых взаимодействует со своими ближайшими соседями. Цепочка содержит дефект, состоящий из двух расположенных рядом атомов такой же массы, взаимодействие между которыми  $\alpha'$  отличается от взаимодействия между остальными атомами  $\alpha$ . Координаты дефектных атомов будем нумеровать I и II, остальных — по расстоянию от дефекта (см. рис. 1, а).

Оператор  $L_0$ , описывающий колебания атомов идеальной цепочки, можно представить в виде

$$L_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = L_0(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{\lambda_m}{4} \begin{cases} -1, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = a, \\ 2, & \mathbf{r} = \mathbf{r}', \\ 0, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| > a, \end{cases} \quad (1)$$

где  $\lambda_m = \frac{2\alpha}{m}$  — квадрат максимальной частоты колебаний линейной цепочки. Введем безразмерную переменную  $\eta = (\alpha' - \alpha)/\alpha$  ( $\eta \in [-1, \infty]$ ,  $\eta > 0$ ) соответствует усилению связи по сравнению с идеальной цепочкой;  $\eta < 0$  — ослабление;  $\eta = -1$  — полному обрыву связи между атомами I и II). Тогда в координатном представлении оператор, описывающий возмущение данным дефектом колебаний цепочки, может быть записан в следующем образом:

$$\Lambda(r, r') = \eta \frac{\lambda_m}{4} \left\{ \delta_{rI} \delta_{r'I} + \delta_{rII} \delta_{r'II} + [\delta_{rI} \delta_{r'II} + \delta_{rII} \delta_{r'I}] \right\}. \quad (2)$$

Дальнейшие вычисления удобно произвести, пользуясь методом якобиевых матриц [12,13], а именно той его версией, которая опирается на аппарат цепных дробей (см., например, [14]). Подробное изложение этого метода можно найти в книге [15]. Применительно к точно решаемым задачам о колебаниях линейных цепочек с дефектами метод достаточно подробно изложен нами в [16]. Этот метод позволяет достаточно просто получить локальные плотности состояний на дефектных атомах, а также функцию спектрального сдвига и полное изменение фоновой плотности, обусловленное дефектом.

Пространство  $H$ , образуемое всеми колебаниями атомов линейной цепочки, можно разбить на два взаимно ортогональных подпространства  $H^{(+)}$  и  $H^{(-)}$ , выбрав в каждом из них в качестве базиса наборы векторов в каждом из них в качестве базиса наборы векторов  $\{h_n^{(+)}\}_{n=0}^{\infty}$

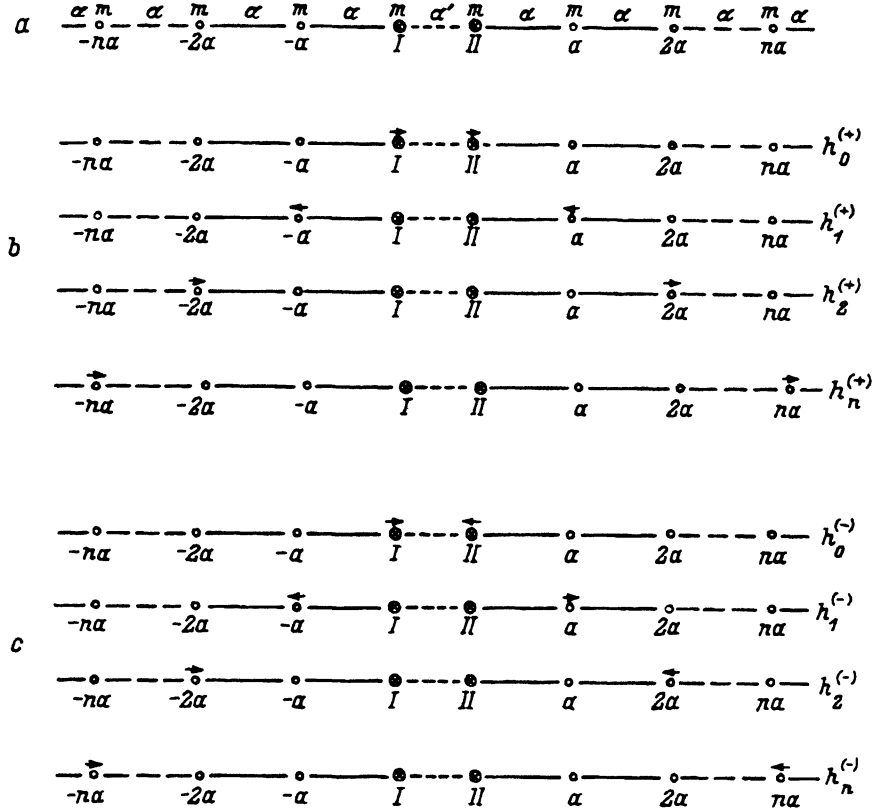


Рис. 1. Рассматриваемая система (координаты дефектных атомов пронумерованы I и II, координаты остальных — по расстоянию от дефекта) (а) и базисные векторы в инвариантном подпространстве  $H^{(+)}$  (b) и  $H^{(-)}$  (c).

и  $\{h_n^{(-)}\}_{n=0}^{\infty}$  соответственно (см. рис. 1, b, c

$$h_0^{(\pm)} = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2}} \left| \begin{array}{c} I \\ II \\ \pm 1 \end{array} \right\}, \quad h_{n>0}^{(\pm)} = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2}} \left| \begin{array}{c} -n\alpha \\ n\alpha \\ \pm 1 \end{array} \right\}, \quad (3)$$

Несложно убедиться, что каждое из подпространств  $H^{(\pm)}$  инвариантно относительно оператора  $L_0 + \Lambda$ .

Операторы  $L^{(\pm)}$ , индуцированные оператором  $L_0 + \Lambda$  в подпространствах  $H^{(\pm)}$ , представляется в виде якобиевых (т. е. трехдиагональных) симметричных матриц. Диагональные и недиагональные элементы этих матриц мы будем обозначать  $a_n^{(\pm)}$  и  $b_n^{(\pm)}$  соответственно.

Все элементы этих матриц кроме  $a_0^{(\pm)}$  равны своим предельным значениям для бесщелевого спектра [12-15]: диагональные  $\frac{\lambda_m}{2}$ , а недиагональные  $\frac{\lambda_m}{4}$ , т. е. в обоих этих подпространствах мы получаем немедленный выход в волновую зону. Первые диагональные элементы этих матриц равны

$$a_0^{(+)} = \frac{\lambda_m}{4}, \quad (4)$$

$$a_0^{(-)} = \frac{3}{4}\lambda_m + \eta \frac{\lambda_m}{2}, \quad (5)$$

В подпространстве  $H^{(+)}$  дефект (2) никак не сказывается на спектральных характеристиках, что очевидно из самого построения данного подпространства.

Определим спектральные плотности  $\rho^{(\pm)}(\lambda)$  ( $\lambda$  — квадрат частоты колебаний) как

$$\rho^{(\pm)}(\lambda, \eta) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_{00}^{(\pm)}(\lambda, \eta) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[ h_0^{(\pm)}, G(\lambda, \eta) h_0^{(\pm)} \right], \quad (6)$$

где  $G(\lambda, \eta)$  и  $G^{(\pm)}(\lambda, \eta) = (\lambda I - L^{(\pm)})^{-1}$  соответственно гриновский оператор системы и операторы, индуцируемые им в подпространствах  $H^{(\pm)}$ . Так как в инвариантных подпространствах  $H^{(\pm)}$  оператор  $L^{(\pm)}$ , а следовательно и  $\lambda I - L^{(\pm)}$  представляются якобиевыми матрицами, то, как нетрудно убедиться, для  $G_{00}^{(\pm)}(\lambda)$ , как первого диагонального элемента матрицы, обратной якобиевой матрице  $\lambda I - L^{(\pm)}$  (с учетом равенства всех элементов кроме  $a_0^{(\pm)}$  своим предельным значениям) можно записать в виде непрерывной (цепной) дроби [14,15]

$$G_{00}^{\pm}(\lambda, \eta) = \left\{ \lambda - a_0^{(\pm)} - \frac{\lambda_m^2 K_{\infty}(\lambda)}{16} \right\}^{-1} \quad (7)$$

Здесь

$$K_{\infty}(\lambda) = 4\lambda_m^{-2} \left\{ 2\lambda - \lambda_m + 2i\sqrt{\lambda(\lambda_m - \lambda)}\theta(\lambda_m - \lambda) - \right. \\ \left. - 2\sqrt{\lambda(\lambda - \lambda_m)}\theta(\lambda - \lambda_m) \right\} -$$

непрерывная дробь, соответствующая якобиевой матрице, все элементы которой равны своим предельным значениям для бесщелевого спектра ( $\theta(x)$  — функция Хевисайда). Следовательно,

$$G_{00}^{(+)}(\lambda) = \frac{2}{\lambda_m} \left\{ 1 + i\sqrt{\frac{\lambda_m - \lambda}{\lambda}}\theta(\lambda_m - \lambda) - \sqrt{\frac{\lambda_m - \lambda}{\lambda}}\theta(\lambda - \lambda_m) \right\}, \quad (8)$$

$$G_{00}^{(-)}(\lambda, \eta) = \frac{2}{\lambda_m} \times$$

$$\times \frac{\lambda - (1 + \eta)\lambda_m + \left[ i\sqrt{\lambda(\lambda_m - \lambda)}\theta(\lambda_m - \lambda) - \sqrt{\lambda(\lambda - \lambda_m)}\theta(\lambda - \lambda_m) \right]}{-(1 + 2\eta)\lambda + \lambda_m(1 + \eta)^2}. \quad (9)$$

Спектральные плотности  $\rho^{(\pm)}(\lambda, \eta)$  определены на интервале  $[0, \lambda_m]$  и равны

$$\rho^{(+)}(\lambda) = \frac{2}{\pi\lambda_m} \sqrt{\frac{\lambda_m - \lambda}{\lambda}}, \quad (10)$$

$$\rho^{(-)}(\lambda, \eta) = \frac{2}{\pi \lambda_m} \frac{\sqrt{\lambda(\lambda_m - \lambda)}}{-(1 + 2\eta)\lambda + \lambda_m(1 + \eta)^2}. \quad (11)$$

Полусумма  $(1/2)[\rho^{(+)}(\lambda) + \rho^{(-)}(\lambda, 0)] = 1/\pi \sqrt{\lambda(\lambda - \lambda_m)} = g(\lambda)$  — плотности состояний идеальной цепочки, что является следствием полноты выбранного базиса (пространство смещений атомов цепочки  $H$  является прямой суммой подпространств  $H^{(+)}$  и  $H^{(-)}$ ).

Знаменатель функции  $G_{00}^{(-)}(\lambda, \eta)$  обращается в нуль при

$$\lambda = \lambda_l(\eta) = \lambda_m \frac{(1 + \eta)^2}{1 + 2\eta}. \quad (12)$$

Для вычета в данном полюсе (отметим, что  $\lambda_l > \lambda_m$ ) получается выражение

$$\mu_l(\eta) = \frac{2(1 + \eta)}{(1 + 2\eta)} (|\eta| + \eta). \quad (13)$$

При  $\eta \leq 0$  вычет обращается в нуль, а при положительном  $\eta$  при усилении связи, в том числе сколь угодно малом)  $\mu_l = 4\eta(1 + \eta)/(1 + 2\eta)^2$ .

Обозначим

$$I^{(\pm)} \equiv \int_0^{\lambda_m} \rho^{(\pm)}(\lambda, \eta) d\lambda.$$

Поскольку спектральная плотность нормирована на единицу, равенство  $I^{(\pm)}(\eta) \equiv 1$  означает отсутствие колебаний за пределами полосы непрерывного спектра идеальной цепочки, а  $I^{(\pm)}(\eta) < 1$  означает наличие локального колебания. Легко убедиться, что  $I^{(+)} \equiv 1$ , а  $I^{(-)}(\eta) = 1 - \mu_l(\eta)\theta(\eta)$ , т. е. частота локального колебания равна  $\sqrt{\lambda_l(\eta)}$ , а интенсивность  $\mu_l(\eta)$ . Из симметрии задачи очевидно, что локальные плотности на дефектных атомах I и II равны между собой,  $g^{(I)}(\lambda, \eta) = g^{(II)}(\lambda, \eta) = (1/2)[\rho^{(+)}(\lambda) + \rho^{(-)}(\lambda, \eta)]$ , где  $\tilde{\rho}^{(-)}(\lambda, \eta)$  — полная (с учетом локальных колебаний) спектральная плотность в подпространстве  $H^{(-)}$ . Итак,

$$g^{(I, II)}(\lambda, \eta) = \frac{1}{\pi \lambda_m} \sqrt{\frac{\lambda_m - \lambda}{\lambda}} \frac{-2\lambda\eta + \lambda_m(1 + \eta)^2}{-(1 + 2\eta)\lambda + \lambda_m(1 + \eta)^2} + \frac{4\eta(1 + \eta)}{(1 + 2\eta)^2} \theta(\eta) \delta(\lambda - \lambda_l). \quad (14)$$

Для вычисления полного изменения фононного спектра дефектом типа (2) воспользуемся функцией спектрального сдвига  $\xi(\lambda)$ . Согласно [17, 18], изменение за счет наличия дефектов полной фононной плотности в линейном по концентрации дефектов  $p$  приближении равно

$$\Delta g(\lambda) = -p \frac{d\xi(\lambda)}{d\lambda}. \quad (15)$$

Метод якобиевых матриц позволяет сравнительно легко найти функцию  $\xi(\lambda)$ . Согласно [12,13],  $\xi(\lambda) = \sum_i \xi^{(i)}(\lambda)$ , где индекс  $i$  нумерует инвариантные подпространства  $H^{(i)}$ , образующие полный базис. Для функций  $\xi^{(i)}(\lambda)$  справедливо соотношение

$$\pi \operatorname{ctg} \pi \xi(\lambda) = \frac{S^{(i)}(\lambda) + \Psi^{(i)}(\lambda)}{\rho_0^{(i)}(\lambda)}, \quad (16)$$

где  $\rho_0^{(i)}(\lambda)$  — спектральная плотность идеального кристалла в данном подпространстве и функция  $\Psi^{(i)}(\lambda) = \int_0^{\lambda_m} \frac{\rho_0^{(i)}(\mu)}{\mu - \lambda} d\mu$  не зависят от параметров дефекта, а функция  $S^{(i)}(\lambda)$  содержит всю информацию о дефекте, выраженную оператором  $\Lambda^{(i)}$ , индуцированным оператором  $\Lambda$  в подпространстве  $H^{(i)}$ . В рассматриваемом нами случае  $\Lambda^{(+)} \equiv 0$ , поэтому  $\xi(\lambda) \equiv \xi^{(-)}(\lambda, \eta)$ . В подпространстве  $H^{(-)}$  функция  $\Psi^{(-)}(\lambda) = 2\lambda_m^{-1}$ , а оператор возмущения (2) представляется матрицей первого ранга,

$$\Lambda_{ik}^{(-)} = \eta \frac{\lambda_m}{2} \delta_{i0} \delta_{k0}. \quad (17)$$

В этом случае  $S^{(-)}(\lambda, \eta) = 2(\eta\lambda_m)^{-1}$ , откуда

$$\xi(\lambda) \equiv \xi^{(-)}(\lambda, \eta) = \frac{1}{\pi} \operatorname{arccctg} \left\{ \sqrt{\frac{\lambda_m - \lambda}{\lambda}} \frac{1 + \eta}{\eta} \right\}. \quad (18)$$

Для изменения полной плотности состояний получим

$$\Delta g(\lambda, \eta) = \frac{d}{d\lambda} \xi(\lambda) = -\frac{g(\lambda)}{2} \frac{\eta(1 + \eta)}{-1(1 + 2\eta)\lambda + \lambda_m(1 + \eta)^2}, \quad (19)$$

и выражение для относительного изменения теплоемкости при  $T \rightarrow 0$  имеет вид

$$\frac{\Delta C}{C} = -\frac{p}{2} \frac{\eta}{1 + \eta}. \quad (20)$$

Это изменение оказывается вдвое меньше аналогичного изменения, обусловленного примесью замещения с измененными связями [16], что очевидно, так как в данном случае изменена одна связь, а не две.

Рассмотрим более подробно случай  $\eta = -1$ , что соответствует полному обрыву связей между атомами I и II и может служить одномерным аналогом свободной поверхности. В этом случае  $\rho^{(-)}(\lambda, \eta) = \rho^{(+)}(\lambda)$ , а полное изменение фононного спектра (19) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Delta g(\lambda, -1) &= \lim_{\eta \rightarrow -1} \Delta g(\lambda, \eta) = \\ &= \frac{g(\lambda)}{2} \lim_{\eta \rightarrow -1} \frac{(1 + \eta)}{-(1 + 2\eta)\lambda + \lambda(1 + \eta)^2} = \frac{g(\lambda)}{2} \delta[(1 + 2\eta)\lambda]. \end{aligned} \quad (21)$$

Расчет изменения термодинамических характеристик с использованием (21) приводит к неопределенности типа  $0/0$  (так как концентрация поверхностных атомов  $p_m \rightarrow 0$  (см., например, формулу (19) при  $\eta \rightarrow -1$ ).

Для расчета изменения поверхностью полного фонового спектра и аддитивных термодинамических величин удобнее пользоваться соотношением

$$g^{(s)}(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} [g_n(\lambda) - g(\lambda)], \quad (22)$$

где  $g_n(\lambda)$  — локальная плотность на атоме, находящемся на расстоянии  $na$  от поверхности. Пусть  $H^{(n)}$  — инвариантное подпространство, порожденное смещением такого атома ( $\mathbf{h}_0^{(n)} = |na|1\rangle$ ). Тогда, как нетрудно убедиться, количество ненулевых компонент вектора  $\mathbf{h}_k^n$  при  $k \geq n$  начинает возрастать с ростом  $k$ . Соответствующие элементы якобиевой матрицы перестанут равняться предельным значениям, а будут осциллировать вокруг этих значений с убывающей с ростом  $k$  амплитудой. В этом случае точное выражение для спектральной плотности найти сложно. Исключение, естественно, составляет случай  $n = 0$ . Если  $\mathbf{h}_0^{(0)} = |0|1\rangle$ , то, как легко доказать, пользуясь, например, методом математической индукции, что  $\mathbf{h}_n^{(0)} = (-1)^n |na|1\rangle$ . Якобиева матрица в подпространстве  $H^{(0)}$  совпадает с якобиевой матрицей в подпространстве  $H^{(+)}$  (или  $H^{(-)}$  при  $\eta = -1$ ). Локальная плотность на поверхностном атоме равна

$$g_0(\lambda) = \rho^{(+)}(\lambda) = \rho^{(-)}(\lambda, -1) = \frac{2}{\pi \lambda_m} \sqrt{\frac{\lambda_m - \lambda}{\lambda}}. \quad (23)$$

Заметим, что  $\mathbf{h}_n^{(0)} = (-1)^n \mathbf{h}_0^{(0)}$ , откуда следует, что

$$g_n(\lambda) = \frac{1}{\pi} \text{Im } G_{nn}^{(0)}(\lambda) = \frac{1}{\pi} \text{Im}(\mathbf{h}_n^{(0)}, G(\lambda) \mathbf{h}_n^{(0)}), \quad (24)$$

где  $G_{nn}^{(0)}(\lambda)$  — диагональный элемент с номером  $n$  матрицы гриновского оператора в подпространстве  $H^{(0)}$ . Поэтому для функции  $g_n(\lambda)$  легко получить выражение

$$g_n(\lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{[P_n^{(0)}(\lambda)]^2 \text{Im } K_{n+1}^{(0)}(\lambda)}{\left| P_{n+1}^{(0)}(\lambda) - b_n P_n^{(0)}(\lambda) K_{n+1}^{(0)}(\lambda) \right|^2}, \quad (25)$$

где  $P_n(\lambda)$  — полиномы  $n$ -ой степени от  $\lambda$ , удовлетворяющие рекуррентным соотношениям  $b_n P_{n+1}(\lambda) = (\lambda - a_n) P_n(\lambda) - b_{n-1} P_{n-1}(\lambda)$  при начальных условиях  $P_{-1}(\lambda) = 0$ ,  $P_0(\lambda) = 1$ , а

$$K_{n+1}^{(0)}(\lambda) = \frac{1}{\lambda - a_{n+1}^{(0)} - \frac{[b_{n+1}^{(0)}]^2}{\lambda - a_{n+1}^{(0)}}}.$$

При выводе (25) использовано то обстоятельство, что определитель якобиевой матрицы  $(\lambda I - L)^{-1}$  ранга  $n$  равен  $P_n(\lambda) \prod_{i=0}^{n-1} b_i$ . Если  $K_{n+1}^{(0)}(\lambda) = K_\infty(\lambda)$ , что и имеет место в нашем случае, то

$$g_n(\lambda) = \frac{1}{\pi} [P_n^{(0)}(\lambda)]^2 \operatorname{Im} G_{00}^{(0)}(\lambda),$$

и для локальной плотности на атоме, находящемся на расстоянии  $na$  от поверхности окончательно получаем

$$g_n(\lambda) = \frac{2[P_n^{(0)}(\lambda)]^2}{\pi \lambda_m} \sqrt{\frac{\lambda_m - \lambda}{\lambda}}. \quad (26)$$

Известно [19], что все корни полиномов  $P_n(\lambda)$  простые и вещественные, причем корни полиномов  $P_n(\lambda)$  и  $P_{n+1}(\lambda)$  перемежаются. Из первого указанного свойства следует, что для атома, находящегося на расстоянии  $na$  от поверхности, локальная плотность  $g_n(\lambda)$  будет иметь  $n$  запрещенных частот, для которых  $g_n(\lambda) = 0$ . Это легко понять, поскольку среди возбужденных в полуограниченной цепочке стоячих волн обязательно найдется  $n$  таких, которые будут иметь узлы в точках  $na$ , т. е. для колебаний этого атома возникает  $n$  запрещенных значений волнового вектора. Поскольку в линейной цепочке модуль волнового вектора однозначно соответствует частоте, то для колебаний атома, находящегося на расстоянии  $na$  от конца полуограниченной линейной цепочки возникает ровно  $n$  запрещенных частот. Из перемежаемости корней полиномов разных степеней вытекает, что сумма любого числа функций  $g_n(\lambda)$  не обращается в нуль внутри полосы сплошного спектра линейной цепочки. Зависимости  $g_n(\lambda)$  для некоторых небольших значений  $n$  приведены на рис. 2. На этом же рисунке штриховой линией изображено среднее значение функций  $g_n(\lambda)$  при  $n$ , изменяющихся через единицу от 92 до 101. Видно совпадение данной функции с фоновой плотностью идеальной линейной цепочки для большинства частот. Число и протяженность частотных интервалов, на которых заметно отличие  $\langle g_n(\lambda) \rangle$  и  $g(\lambda)$  сокращается с ростом  $n$ .

Аналогично можно записать выражение для локальной плотности колебаний атома, находящегося на расстоянии  $na$  от атомов I или II при  $n \neq 0$

$$g_n(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} \left\{ (\mathbf{h}_n^{(+)}, G(\lambda) \mathbf{h}_n^{(+)}) + (\mathbf{h}_n^{(-)}, G(\lambda) \mathbf{h}_n^{(-)}) \right\}, \quad (27)$$

или, в явном виде

$$g_n(\lambda) = \frac{[P_n^{(+)}(\lambda)]^2}{\pi \lambda_m} \sqrt{\frac{\lambda_m - \lambda}{\lambda}} + \frac{[P_n^{(-)}(\lambda, \eta)]^2}{\pi \lambda_m} \frac{\sqrt{\lambda(\lambda_m - \lambda)}}{-(1 + 2\eta)\lambda + \lambda_m(1 + \eta)^2},$$

где полиномы  $P_n^{(\pm)}(\lambda, \eta)$  строятся по элементам якобиевых матриц операторов  $L^{(\pm)}$ . Поскольку корни полиномов  $P_n^{(-)}(\lambda)$  и  $P_n^{(+)}(\lambda)$  при  $\eta \neq 0$



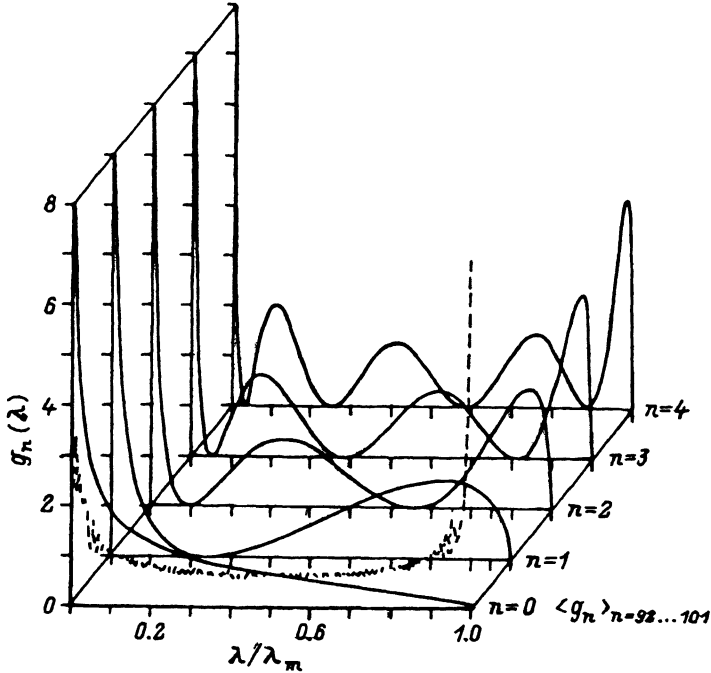


Рис. 2. Локальные плотности для «поверхностного» и первых четырех подповерхностных атомов (сплошные кривые), а также среднее значение локальной плотности ( $g_n(\lambda)$ ) при  $n$ , изменяющихся через единицу от 92 до 101 (штриховая линия).

не могут совпадать, локальная плотность  $g_n(\lambda)$  в этом случае запрещенных частот не имеет.

Вклад поверхности в плотность колебаний рассматриваемой цепочки можно получить, подставляя (26) в (22)

$$g^{(s)}(\lambda) = g_0(\lambda) \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} [2P_n^2(\lambda)(\lambda_m - \lambda) - \lambda_m] \right\}. \quad (28)$$

В частности, при  $n = 0$

$$g_0^{(s)}(\lambda) = \frac{\lambda_m - 2\lambda}{\pi \lambda_m \sqrt{\lambda(\lambda_m - \lambda)}}. \quad (29)$$

Видно, что функция  $g_0^{(s)}(\lambda)$  положительна при  $\lambda \gg \lambda_m/2$  и отрицательна при  $\lambda < \lambda_m/2$ . Подобным же образом ведет себя функция  $g^{(s)}(\lambda)$  для трехмерных скалярных моделей [20]. В трехмерных векторных моделях, где имеются продольные и поперечные ветви колебаний, функция  $g^{(s)}(\lambda)$  может быть положительной как в низко- так и высокочастотной областях фонованого спектра [21,22].

Из (30) следует, что для предельно низких температур  $\Delta C/C = 1$ , т. е. угловой коэффициент температурной зависимости удельной теплоемкости при  $T \rightarrow 0$  (напомним, что для одномерной цепочки это

линейная зависимость) у полуограниченной цепочки вдвое выше, чем у бесконечной. Полная теплоемкость полуограниченной и бесконечной цепочек в случае предельно низких температур будут вести себя одинаково (так как число атомов в полуограниченной цепочке вдвое меньше). В области высоких температур удельная теплоемкость как бесконечной так и полуограниченной цепочек выходят на одно предельное значение, определяемое законом Дюлонга-Пти, а полная теплоемкость полуограниченной цепочки будет вдвое меньше, чем бесконечной.

Температурная зависимость относительного изменения поверхностью теплоемкости трехмерного кристалла имеет максимум, который с ростом анизотропии межатомного взаимодействия смещается в сторону низких температур [23]. Естественно, что для одномерной цепочки данный максимум имеет место строго при  $T = 0$ .

Работа выполнена при поддержке Международного научного фонда (гранты U21000 и U21200) и Государственного фонда фундаментальных исследований Украины (гранты 2.3/624 «Двойник» и 4.2/88 «Струм»).

### Список литературы

- [1] I.M. Lifshitz. *Nuovo Cim. Suppl.* **3**, 716 (1956).
- [2] А.А. Марадулин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс. *Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении*. Мир..М. (1965). 383 с.
- [3] И.М. Лифшиц, А.М. Косевич. *Rep. Progr. Phys.* **29**, 217 (1966).
- [4] А.М. Косевич. *Теория кристаллической решетки*. Вища шк. Харьков (1988). 304 с.
- [5] М.А. Кривоглаз. *ЖЭТФ* **81**, 7, 277 (1981).
- [6] Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев. *ФНТ* **5**, 9, 1069 (1979).
- [7] И.М. Гельфгат, Е.С. Сыркин. *ФНТ* **4**, 2, 672 (1978).
- [8] А.М. Косевич, Ю.А. Косевич, Е.С. Сыркин. *ЖЭТФ* **88**, 3, 1080 (1985).
- [9] И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг. *ЖЭТФ* **18**, 11, 1012 (1948).
- [10] Н. Kaplan. *Bull. Am. Phys. Soc.* **2**, 1, 147 (1957).
- [11] Н. Kaplan. *Phys. Rev.* **125**, 4, 1271 (1962).
- [12] В.И. Пересада. *ЖЭТФ* **53**, 8, 605 (1967).
- [13] В.И. Пересада. В кн.: *Физика конденсированного состояния*. Харьков (1968). Т. 2. С. 172.
- [14] В.И. Пересада, В.Н. Афанасьев, В.С. Боровиков. *ФНТ* **1**, 4, 461 (1975).
- [15] R. Haydock. In: *Solid State Physics* / Ed. H. Ehrenreich et al. Academic Press. N. Y. (1980). V. 35. P. 129.
- [16] Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев. *ФНТ* **20**, 6, 586 (1994).
- [17] И.М. Лифшиц. *ЖЭТФ* **18**, 3, 293 (1948).
- [18] И.М. Лифшиц. *УМН* **7**, 1, 171 (1952).
- [19] Г. Сеге. *Ортогональные многочлены*. ФМЛ. М. (1962). 500 с.
- [20] Т.Г. Петрова, Е.С. Сыркин. *ФНТ* **17**, 4, 411 (1991).
- [21] В.И. Пересада, Е.С. Сыркин. *ФТТ* **16**, 3, 687 (1974).
- [22] И.А. Господарев, Е.С. Сыркин. *ФНТ* **7**, 11, 1468 (1981).
- [23] Ю.А. Косевич, Е.С. Сыркин. *ФНТ* **9**, 6, 624 (1983).