

Бифононы в квазикристаллах

© О.А. Дубовский, А.В. Орлов

Физико-энергетический институт,
249020 Обнинск, Калужская обл., Россия

(Поступила в Редакцию 9 августа 1996 г.)

Исследован спектр связанных бифононных оптических колебаний в квазикристаллах с варьированием атом-атомного взаимодействия в соответствии с последовательностью чисел Фибоначчи. Для двухфононных состояний с сильным ангармонизмом колебаний получена система рекурсионных уравнений, существенно более сложная, чем используемая ранее для однофононных состояний. Расчеты с применением этой системы позволили определить спектр бифононных колебаний в квазикристалле. Показано, что на низкочастотном крае бифононной зоны в плотности состояний существует тонкая структура скейлинг-типа того же вида, что и в бифононных спектрах фрактальных решеток. Установлен периодический характер зависимости плотности состояний от энергии в логарифмической шкале. Определен период этой зависимости. Отмечен нестандартный вид резонансной структуры в плотности состояний в высокочастотной области бифононной зоны.

В настоящее время ведутся исследования электронных и фононных спектров квазикристаллов, стимулированные открытием фазы AlMn с икосаэдральной симметрией [1]. Такие квазикристаллы, имеющие упорядочение на больших расстояниях, дальний порядок, но не обладающие точной трансляционной инвариантностью кристалла, представляют собой фазу твердого тела, промежуточную между кристаллами и разупорядоченными аморфными веществами. Установлено, что спектр одночастичных возбуждений (фононов, электронов) в квазикристаллах является канторовским набором спектральных линий, образующих самоподобные структуры фрактального типа с плотным распределением щелей [2]. Ренорм-групповой подход к этой проблеме развит в [3]. Разработана рекуррентная процедура определения плотности одночастичных состояний в квазикристаллах методом последовательного исключения (decimation) некоторых переменных в системе соответствующих динамических уравнений [4]. Реальные квазикристаллические системы создаются при выращивании сверхрешеток, исследуются экспериментально методами рентгеновского анализа и рамановской спектроскопии [5].

Наряду с другими исследованиями однофононных спектров в квазикристаллах, использующими стандартное приближение гармонического потенциала межатомного взаимодействия, уже началось изучение влияния ангармонизма колебаний на спектры однофононных возбуждений. При этом, однако, обращалось внимание на исследование влияния на однофононные спектры слабого ангармонизма колебаний, слабого фонon-фононного взаимодействия, определяющего эффекты теплового расширения, отклонение от закона Дюлонга и Пти при высоких температурах и т.д. [6]. Учет этого слабого ангармонизма может быть проведен в рамках стандартной теории возмущений. Представляет интерес исследование спектров квазикристаллов с сильным ангармонизмом колеба-

ний, приводящим к принципиальным, качественным изменениям спектра. Таким качественным эффектом сильного ангармонизма колебаний является образование связанных бифононных, трифононных и т.д. колебаний, проявляющихся в экспериментально наблюдаемых спектрах рассеяния медленных нейтронов, ИК-спектрах в виде отдельных интенсивных резонансных пиков вблизи размытых полос диссоциированных двухфононных, трехфононных и т.д. колебаний [7]. Исследования спектров связанных многофононных колебаний (бифононов, трифононов и т.д.) проводились теоретически и экспериментально в ряде работ (см. [8,9]). В обзоре [8] в одном из разделов спектр бифононных колебаний в неупорядоченных кристаллах с диагональным беспорядком изучался варьированием энергии возбуждения изолированных мономеров. В [10] исследовался спектр бифононов фрактальной структуры — ковры Серпинского. Отметим, что бифононные колебания более чувствительны к наличию дефектов решетки, поскольку они локализуются на дефектах решетки при гораздо более слабом искажении, чем это необходимо для локализации однофононных возбуждений [8]. В развитие этих исследований с учетом возможности использования бифононных резонансов в практических целях представляют интерес изучение спектров бифононных колебаний в квазикристаллах и сравнение этих спектров со спектрами бифононов в неупорядоченных кристаллах и фрактальных структурах.

Как и в [4], рассмотрим одномерный квазикристалл с варьируемыми величинами межатомного взаимодействия в соответствии с последовательностью чисел Фибоначчи. Одномерная замкнутая цепочка атомов с взаимодействием ближайших соседей V_A или V_B формально геометрически генерируется из замкнутой цепочки, состоящей из трех атомов ($i = 1, 2, 3$) с величинами потенциала межатомного взаимодействия $V_{12} = V_A$, $V_{23} = V_B$, $V_{31} = V_A$.

Последующая геометрическая генерация цепочки из $N = F_N$ атомов, где F_N — числа Фибоначчи ($F_0 = 1, F_1 = 1, F_2 = 2, F_3 = 3, \dots, F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$), происходит по рекурсивной "арочной" схеме $A_n \rightarrow A_{n+1}B_{n+1}, B_n \rightarrow A_{n+1}$ с заменой связи V_A на систему связь V_A -атом-связь V_B и заменой V_B на V_A . При больших n значения $F_n \cong (\tau-1)^{-n}$, где скейлинговый параметр $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ (золотое сечение), определяются из квадратного уравнения $(\tau-1)^2 + (\tau-1) - 1 = 0$. Так же как и в первых работах этого направления, учтем в первую очередь ангармонизм колебаний, отвечающий контактному взаимодействию возбуждений — оптических фононов. В этом случае гамильтониан H квазикристаллической системы в узельном представлении вторичного квантования имеет следующий вид [8]:

$$H = \sum_n E_n B_n^+ B_n + \sum_{nm} V_{nm} B_n^+ B_m - A \sum_n B_n^+ B_n^+ B_n B_n, \quad (1)$$

где E_n — энергия возбуждения изолированного мономера, B_n^+, B_n — бозе-операторы рождения, уничтожения возбуждений, A — константа ангармонизма. Для однофононных состояний решение уравнения Шредингера $H|1\rangle = E|1\rangle$ ищется, как обычно, в виде $|1\rangle = \sum \Psi_n B_n^+ |0\rangle$, где $|0\rangle$ — основное состояние. После подстановки $|1\rangle$ в уравнение Шредингера для энергии E и волновой функции Ψ находятся соответствующие динамические уравнения

$$(E - E_n)\Psi_n = V_{n-1,n}\Psi_{n-1} + V_{n,n+1}\Psi_{n+1}. \quad (2)$$

Так же как и в [4], введем обозначения

$$E_n = \begin{cases} \varepsilon_\alpha, & V_{n-1,n} = V_{n,n+1} = V_A, \\ \varepsilon_\beta, & V_{n-1,n} = V_A, V_{n,n+1} = V_B, \\ \varepsilon_\gamma, & V_{n-1,n} = V_B, V_{n,n+1} = V_A. \end{cases} \quad (3)$$

Следуя decimation-процедуре, можно уменьшить число уравнений в системе секулярных уравнений (2), выразив Ψ_n , отвечающие $E_n = \varepsilon_\beta$, через соседние $\Psi_{n\pm 1}$. Полученная после этого система F_{N-1} секулярных уравнений будет того же вида, что и (2) для цепочки с F_{N-1} узлами, но только с преобразованными величинами энергий возбуждения в узлах и межузельного взаимодействия

$$\tilde{\varepsilon}_\alpha = \varepsilon_\gamma + \frac{V_A^2 + V_B^2}{E - \varepsilon_\beta}, \quad \tilde{\varepsilon}_\beta = \varepsilon_\gamma + \frac{I_B^2}{E - \varepsilon_\beta},$$

$$\tilde{\varepsilon}_\gamma = \varepsilon_\alpha + \frac{V_A^2}{E - \varepsilon_\beta}, \quad \tilde{V}_A = \frac{V_A V_B}{E - \varepsilon_\beta}, \quad \tilde{V}_B = V_A. \quad (4)$$

Таким образом, формально вновь имеется система уравнений (2), но уже с измененными параметрами $\tilde{\varepsilon}, \tilde{V}$. При последующем многократном повторении рекурсивной процедуры (4) при фиксированном E величины \tilde{V} быстро уменьшаются, составляющие $\tilde{\varepsilon}$,

пропорциональные V^2 , также быстро уменьшаются, и уже при числе итераций ≈ 20 их роль ничтожна. Ясно, что для бесконечно замкнутой цепочки эта процедура сворачивания (decimation) приводит к также бесконечной цепочке. При этом формально кристаллическая цепочка представляет собой систему невзаимодействующих осцилляторов типа α, β, γ . Общее число F_N осцилляторов состоит из F_{N-3} осцилляторов типа α , F_{N-2} осцилляторов типа β и F_{N-2} осцилляторов типа γ . Соответствующие концентрации α, β, γ центров равны $n_\alpha = F_{N-3}/F_N = 2\tau - 3$, $n_\beta = n_\gamma = F_{N-2}/F_N = 2 - \tau$, $n_\alpha + n_\beta + n_\gamma = 1$. Плотность однофононных состояний $\rho_1(E)$ для системы невзаимодействующих осцилляторов известным образом связана с мнимой частью соответствующей функции Грина $G^{(1)}(E)$ однофононных состояний

$$\rho_1(E) = \pi^{-1} \text{Im} G^{(1)}(E),$$

$$G^{(1)}(E) = \frac{n_\alpha}{E - \varepsilon_\alpha^{(\infty)}} + \frac{n_\beta}{E - \varepsilon_\beta^{(\infty)}} + \frac{n_\gamma}{E - \varepsilon_\gamma^{(\infty)}}, \quad (5)$$

где $\varepsilon_\alpha^{(\infty)}, \varepsilon_\beta^{(\infty)}, \varepsilon_\gamma^{(\infty)}$ — соответствующие пределы $\varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}$ при больших числах итераций. Для стартовых значений $\varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}$ следует ввести феноменологическое затухание, которое будем считать одинаковым $\varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma} = \varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}^{(0)} + i\eta$.

Для двухфононных состояний с энергией E решние уравнения Шредингера

$$H|2\rangle = E|2\rangle \quad (6)$$

ищется в виде следующей суперпозиции [8]:

$$|2\rangle = \sum_{nm} \Psi_{nm} B_n^+ B_m^+ |0\rangle. \quad (7)$$

Подстановке (7) в (6) приводит к следующей системе уравнений для волновой функции Ψ_{nm} :

$$(E + 2A\delta_{n,m} - E_n - E_m)\Psi_{n,m} = V_{n+1,n}\Psi_{n+1,m} + V_{n,n-1}\Psi_{n-1,m} + V_{m+1,m}\Psi_{n,m+1} + V_{m-1,m}\Psi_{n,m-1}. \quad (8)$$

Проведение decimation-процедуры для системы секулярных уравнений (8) в общем случае произвольной константы ангармонизма представляется затруднительным, по крайней мере этот вопрос требует дальнейшего исследования. Однако, как и для фрактальных структур [10], можно в первую очередь рассмотреть предельный случай сильного ангармонизма $A > V$. В этом случае оказалось возможным проведение decimation-процедуры применительно к системе уравнений (8) с последовательным исключением тех уравнений (8), которые включают β -центры. Естественно, в связи с увеличением вдвое числа индексов, принципиальным изменением "размерности" возрастает число величин, включенных в рекурсивную схему типа (4).

Введем для величин $E_n + E_m$ следующие обозначения с фиксированной нумерацией пар индексов: $\alpha\alpha \rightarrow 1, \beta\beta \rightarrow 2, \gamma\gamma \rightarrow 3, \alpha\beta \rightarrow 4, \alpha\gamma \rightarrow 5, \beta\gamma \rightarrow 6,$

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= 2\varepsilon_0, & \varepsilon_2 &= 2\varepsilon_\beta, & \varepsilon_3 &= 2\varepsilon_\gamma, \\ \varepsilon_4 &= \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta, & \varepsilon_5 &= \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\gamma, & \varepsilon_6 &= \varepsilon_\beta + \varepsilon_\gamma. \end{aligned} \quad (9)$$

Введем также двенадцать величин $V_{A,B}^{ij}, 1 \leq i \leq 6, 1 \leq j \leq 6,$ определяющих A - или B -перенос возбуждения между узлами в том случае, когда пара i переходит в пару j

$$\begin{aligned} V_A^{14}, V_A^{15}, V_A^{24}, V_A^{26}, V_B^{26}, V_A^{35}, \\ V_A^{36}, V_B^{36}, V_A^{45}, V_B^{45}, V_A^{46}, V_A^{56}. \end{aligned} \quad (10)$$

Остальные компоненты V в наборе i, j, A, B отсутствуют в рекурсионной схеме. Детальные расчеты, не приводимые для краткости изложения, показали, что рекуррентная процедура последовательного свертывания системы уравнений (8) для двухфононных состояний с "исключением" β -центров (decimation), более сложная, чем (4) для однофононных состояний, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_1 &= \varepsilon_3 + 2 \left[S(\varepsilon, V) (V_B^{36})^2 + R(\varepsilon, V) (V_A^{36})^2 \right], \\ \tilde{\varepsilon}_2 &= \varepsilon_3 + 2S(\varepsilon, V) [V_B^{36}]^2, \\ \tilde{\varepsilon}_3 &= \varepsilon_1 + 2Q(\varepsilon, V) [V_A^{14}]^2, \\ \tilde{\varepsilon}_4 &= \varepsilon_3 + S(\varepsilon, V) [V_Z^{36}]^2 + R(\varepsilon, V) [V_B^{36}]^2 + \frac{[V_B^{36}]^2}{E - \varepsilon_6}, \\ \tilde{\varepsilon}_5 &= \varepsilon_5 + Q(\varepsilon, V) [V_B^{45}]^2 + S(\varepsilon, V) [V_A^{56}]^2 + \frac{[V_A^{45}]^2}{E - \varepsilon_4}, \\ \tilde{\varepsilon}_6 &= \varepsilon_5 + S(\varepsilon, V) [V_A^{56}]^2 + Q(\varepsilon, V) [V_B^{45}]^2, \end{aligned} \quad (11a)$$

где для сокращения записи введены вспомогательные величины S, R, Q

$$\begin{aligned} S(\varepsilon, V) &= \left[E - \varepsilon_6 - \frac{2(V_B^{26})^2}{E + 2A - \varepsilon_2} \right]^{-1}, \\ R(\varepsilon, V) &= \left[E - \varepsilon_6 - \frac{2(V_A^{26})^2}{E + 2A - \varepsilon_2} \right]^{-1}, \\ Q(\varepsilon, V) &= \left[E - \varepsilon_4 - \frac{2(V_A^{24})^2}{E + 2A - \varepsilon_2} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (11b)$$

Остальные двенадцать уравнений для V в общей с (11a) рекурсионной схеме имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \tilde{V}_A^{14} &= R(\varepsilon, V) V_A^{36} V_B^{36}, & \tilde{V}_A^{15} &= S(\varepsilon, V) V_A^{56} V_B^{36}, \\ \tilde{V}_A^{24} &= S(\varepsilon, V) V_A^{36} V_B^{36}, & \tilde{V}_A^{26} &= S(\varepsilon, V) V_A^{56} V_B^{36}, \\ \tilde{V}_B^{26} &= V_A^{35}, & \tilde{V}_A^{35} &= Q(\varepsilon, V) V_A^{14} V_B^{45}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}_A^{36} &= Q(\varepsilon, V) V_A^{14} V_B^{45}, & \tilde{V}_B^{36} &= V_A^{15}, & \tilde{V}_B^{45} &= V_A^{35}, \\ \tilde{V}_A^{45} &= \frac{V_B^{36} V_A^{56}}{E - \varepsilon_4}, & \tilde{V}_A^{46} &= \frac{V_B^{36} V_A^{56}}{E - \varepsilon_6}, & \tilde{V}_A^{56} &= \frac{V_A^{45} V_B^{45}}{E - \varepsilon_4}. \end{aligned} \quad (12)$$

Рекурсивную схему (11), (12) можно проверить при наименьших по объему вычислений сворачиваний системы уравнений (8), стартуя от $F_5 = 8$. При этом в расчетах следует для сильного ангармонизма учитывать только наибольшие по A члены при сравнении различных степеней A^n при энергиях E вблизи бифононной зоны $E \approx 2\varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}^{(0)} - 2A$ [8]. После многократных итераций по рекуррентной схеме (11), (12), как и для однофононных колебаний, при фиксированной энергии E в области бифононной зоны величины V и составляющие $\tilde{\varepsilon}$, пропорциональные V^2 , быстро уменьшаются. Поэтому в предельном случае большого числа итераций имеем систему невзаимодействующих ангармонических осцилляторов. Соответственно плотность двухфононных состояний $\rho_2(E)$ в этом случае связана с мнимой частью функции Грина $G^{(2)}(E)$ двухфононных состояний известным образом [8]

$$\begin{aligned} \rho_2(E) &= \pi^{-1} \text{Im} G^{(2)}(E), \\ G^{(2)}(E) &= \frac{n_\alpha}{E + 2A - \varepsilon_1^{(\infty)}} + \frac{n_\beta}{E + 2A - \varepsilon_2^{(\infty)}} + \frac{n_\gamma}{E + 2A - \varepsilon_3^{(\infty)}}, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\varepsilon_{1,2,3}^{(\infty)}$ — предельные при большом числе итераций значения $\varepsilon_{1,2,3}$.

Полученная выше рекуррентная схема (11), (12) была реализована на ЭВМ при тех же стартовых значениях величин ε, V , что и в [4]. На рис. 1–4 приведены результаты вычислений. Все безразмерные энергетические величины приведены в единицах $V_1 \equiv V_A$, величина $V_B/V_A = 2$, энергия отсчитывается от центра зоны в случае однофононных колебаний ($\varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}^{(0)} = 0$) на рис. 1 или от центра полосы диссоциированных двухфононных колебаний для бифононов (рис. 2–4, $\varepsilon_{1,2,\dots,6}^{(0)} = 0$). В стартовые значения $\varepsilon_{1,2,\dots,6}$ вводилось, естественно, удвоенное по сравнению с однофононным феноменологическое затухание $\varepsilon_{1,2,\dots,6} = \varepsilon_{1,2,\dots,6}^{(0)} + i(2\eta), \eta = 5 \cdot 10^{-6} V_A$.

На рис. 1 представлен спектр оптических фононов в квазикристалле, полученный при использовании рекуррентной схемы (4). Общий вид совпадает с полученным в [4]. Наблюдаются две главные щели в областях энергий $|E| \approx 2V_A$, серии пиков с последовательно уменьшающейся амплитудой, удаляющихся от пика с максимальной интенсивностью, того же типа, что и во фрактальных структурах [10]. Более детальный анализ показал, что действительно имеется канторовский набор, поскольку при увеличении масштаба непрерывно проявляется самоподобная система пиков и щелей. Отметим, что в [4] вычисление плотности одночастичных состояний проводилось для электронов и акустических фононов. Сравнение

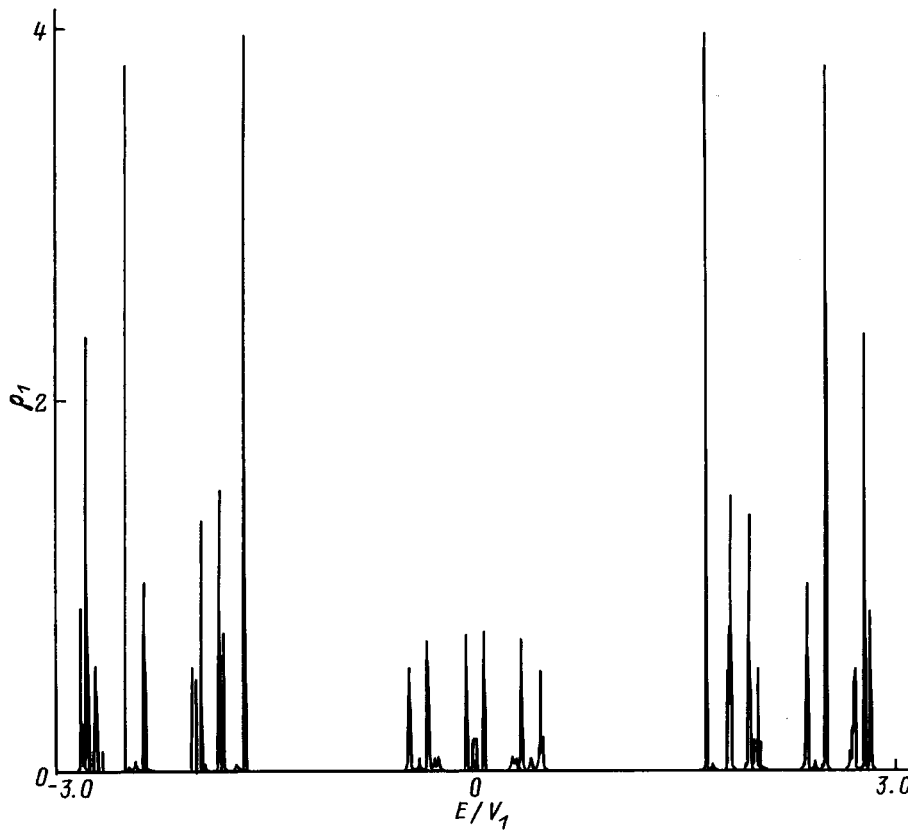


Рис. 1. Плотность состояний однофоновых оптических колебаний в квазикристаллической цепочке Фибоначчи.

рис. 1 следует проводить со спектром электронов, полученным в [4], поскольку для одночастичных состояний в данном случае изолированной высокочастотной зоны в приближении сильного взаимодействия разница спектров фермионов и бозонов несущественна. Со спектром акустических фононов, полученным в [4], скорее, следует сравнивать спектр акустических бифононов в квазикристалле, который необходимо в будущем исследовать, используя теорию акустических бифононов в идеальных кристаллах, развитую в [11]. Отметим, что в [4] вычисление плотности одночастичных состояний проводилось с использованием рекуррентной схемы (4) с тем, однако, отличием, что феноменологическое затухание $i\eta$ вводилось в концевой после всех итераций полюс функции Грина $G^{(1)}(E + i\eta)$ как мнимая добавка к энергии E . В наших же расчетах в соответствии с общей теорией [8] в первых стартовых значениях $\varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}$ вводилось дополнительное феноменологическое затухание $\varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma} = \varepsilon_{\alpha,\beta,\gamma}^{(0)} + i\eta$, и последующая рекурсивная схема шла в комплексных $\tilde{\varepsilon}, \tilde{V}$. Возможно, с этим связано то обстоятельство, что в [4] центральная вблизи $E \approx 0$ группа пиков имеет большую интенсивность, чем на краях зоны при $E \approx \pm 3V_A$, а в наших расчетах на рис. 1 центральная группа имеет меньшую интенсивность пиков, чем на краях. При этом следует отметить, что в отличие от [4] проведенная по вер-

шинам пиков огибающая кривая (не представлена на рис. 1) с минимумом в центре зоны $E \approx 0$ и подъемом на краях имеет тот же общий вид, что и плотность однофоновых состояний в идеальном одномерном кристалле. Это является косвенным подтверждением корректности расчетов. Отметим вместе с тем, что поскольку исследование однофоновых спектров в квазикристаллах не являлось основной целью работы, рис. 1 получен при равномерном сканировании зоны по энергии и дополнительная подпрограмма для уточнения интенсивности пиков, как это делалось для бифононов (см. далее), не использовалась. Во всяком случае этот вопрос требует дальнейшего детального анализа.

На рис. 2 представлена зависимость плотности бифоновых состояний в квазикристалле от энергии. Поскольку присутствующие в спектре резонансные пики имеют амплитуды, на порядки превосходящие фоновые значения, для представления на графике и последних на рис. 2 представлена зависимость от энергии функции $\rho_c(E)$

$$\rho_c(E) = \ln(1 + \rho_2(E)). \quad (14)$$

Нетрудно видеть, что при малых $\rho_2(E)$ величина $\rho_c(E) \approx \rho_2(E)$, а при больших значениях $\rho_2(E)$ идет представление $\rho_2(E)$ в логарифмическом масштабе. При этом сохраняется монотонность в отображении

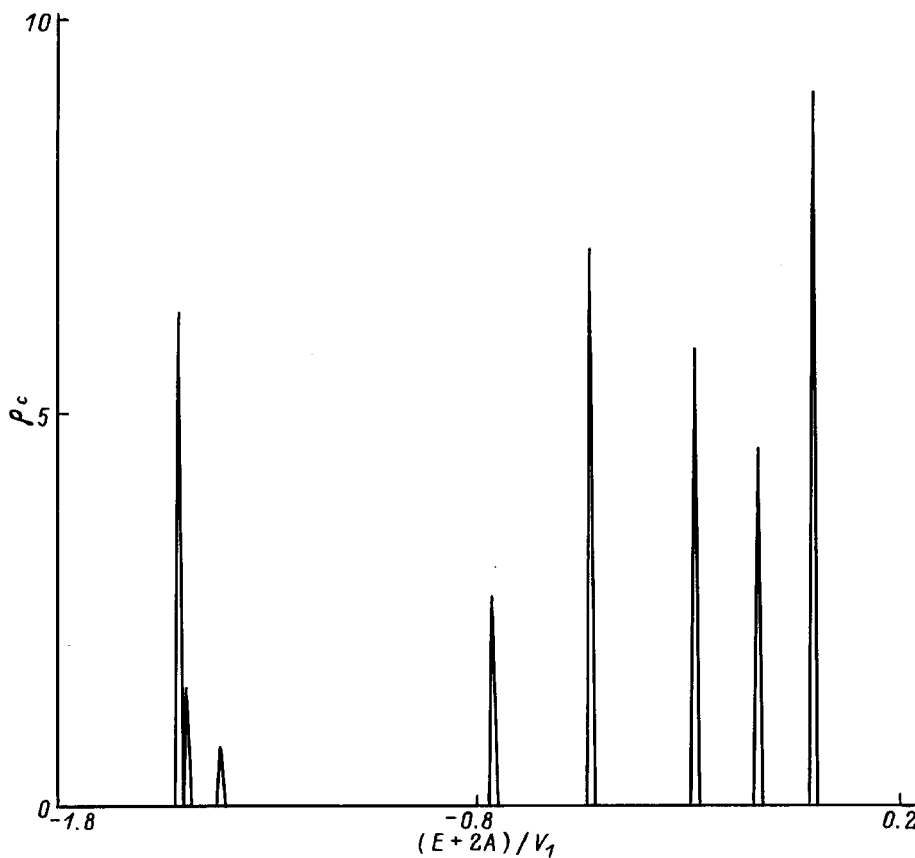


Рис. 2. Плотность состояний бифононных оптических колебаний в квазикристаллической цепочке Фибоначчи.

$\rho_2(E)$ в $\rho_c(E)$. Использованное для рис. 2 значение константы ангармонизма $A = 5V_A$. При такой константе ангармонизма бифононная зона целиком отщепляется в низкочастотную область от зоны диссоциированных двухфононных состояний [8]. Сравнивая рис. 1 и 2, можно заметить, что общая огибающая всех бифононных пиков (не представлена на рис. 2), так же как и для фононов в идеальном кристалле и на рис. 1, имеет минимум в центре бифононной зоны и подъемы на высокочастотном крае $E_u \approx \varepsilon_i^{(0)} - 2A$ и на низкочастотном крае $E_d \approx \varepsilon_i^{(0)} - 2A - (V^2/2A)$ [8]. Это, естественно, связано с тем обстоятельством, что бифононы при больших константах ангармонизма $A)V$ являются все-таки квазичастицами, хотя и со сложной внутренней структурой. Детали резонансной структуры рис. 1 и 2 именно в связи с последним существенно различны. Прежде всего отличие состоит в том, что на рис. 2 наблюдается явная асимметрия относительно центра бифононной зоны в сравнении с симметрией рис. 1 относительно центра фононной зоны. Это, естественно, связано с самой динамикой бифонона и следует, например, из вида асимметричной дисперсионной кривой бифонона [8].

Переходя к обсуждению основных особенностей внутренней резонансной структуры на рис. 2, следует отметить, что, как правило, в спектре связанных

двухчастичных состояний "замазываются" особенности спектра одночастичных состояний. Это обусловлено тем обстоятельством, что связанное состояние с данной энергией E определяется всеми парами однофононных состояний с энергиями E' и $E - E'$ при E' , изменяющейся во всем интервале энергий однофононной зоны. Так, для идеального кристалла с энергией однофононных состояний $E_{\mathbf{k}}$, где \mathbf{k} — волновой вектор, энергия бифонона $E(\mathbf{K})$ с волновым вектором \mathbf{K} определяется из уравнения [8]

$$-1 = \frac{2A}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E(\mathbf{K}) - E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{K}-\mathbf{k}}}, \quad (15)$$

из которого видно, что величина $E(\mathbf{K})$ определяется интегралом по $E_{\mathbf{k}}$. Как пример такого "замазывания" особенностей спектра одночастичных состояний можно указать отсутствие прямого эффекта superradiance у биполяритонов [12], в то время как у поляритонов этот эффект присутствует [13] (впервые этот эффект экспериментально наблюдался в [14]). Аналогичным образом в предварительных исследованиях биротоннов в жидком гелии методом рассеяния медленных нейтронов [15] наблюдалась бесструктурная полоса, не имеющая известных особенностей одночастичной зоны с фононами и ротонами. Поэтому неудивительно,

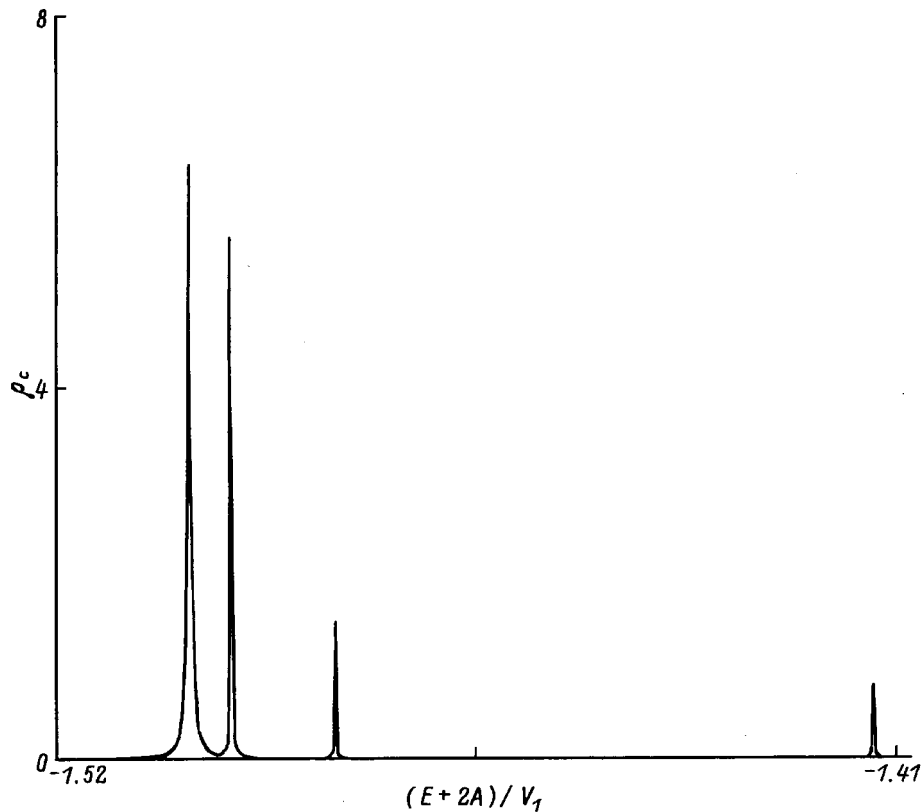


Рис. 3. Фрактальная структура в плотности состояний на низкочастотном крае бифононной зоны в квазикристалле.

что на рис. 2 отсутствуют в полном объеме те особенности спектра, которые видны на рис. 1. Вместе с тем некоторые из этих особенностей проявляются и на рис. 2.

Наибольший интерес на рис. 2 привлекает низкочастотная область, где видны два близко расположенных пика. Наблюдение с большим разрешением показывает, что здесь вблизи самого низкочастотного интенсивного пика с энергией $E_c = -2A - 1.51V_1$ существует фрактального типа серия удаляющихся в высокочастотную область сателлитных пиков E_i ($i = 1, 2, 3$) с последовательно уменьшающейся амплитудой. На рис. 3 эта серия представлена в более крупном масштабе. Видно, что расстояние между пиками этой серии последовательно возрастает при удалении в высокочастотную область. Множество серий пиков такого типа наблюдается в спектре одночастичных состояний в квазикристаллах (рис. 1 [5]). Интересно оценить закономерности этой серии пиков вблизи $E \approx E_c$ для бифононов. Поскольку полная теория бифононов в квазикристаллах еще только начинает развиваться (этой работой), воспользуемся на первом этапе результатами теории одночастичных возбуждений в квазикристаллах, полагая, что в определенном приближении, при рассмотрении бифонона как квазичастицы, это возможно. В соответствии с этой теорией из линеаризованного ренорм-группового преобразования следует, что функциональное урав-

нение для плотности состояний $\rho(E)$ и его решение могут быть представлены в следующем виде [4]:

$$\rho(E) \sim \tau^{y-d} \rho[E_c - \lambda(E_c - E)],$$

$$\rho(E) \sim |E_c - E|^{(d/y)-1} W(\ln |E_c - E|), \quad (16)$$

где $y = \ln \lambda / \ln \tau$, λ — соответствующее собственное значение, d — фрактальная размерность, W — периодическая функция указанного аргумента с периодом $\ln \lambda$. В соответствии с этой теорией расстояние по энергии между последовательными пиками серии и наиболее интенсивным пиком возрастает по логарифмическому закону, так что последовательные пики в этой шкале равноудалены на расстояние $\ln \lambda$. Бифононный спектр на рис. 3 может быть приведен в логарифмической по энергии шкале. При этом действительно наблюдается приблизительно эквидистантное расстояние между $i = 1, 2, 3$ пиками с соответствующим расстоянием $\ln \lambda = 1.35$. Отметим, что для одночастичных состояний эта величина $\ln \lambda = 3.7$ [4]. Это уменьшение $\ln \lambda$ очевидным образом связано с сужением бифононной зоны при увеличении константы ангармонизма и смещении этой зоны в низкочастотную область. Полученное значение λ может быть использовано для оценки закономерности спада интенсивности пиков в серии. Например, подстановка в (16) значений $\rho_2(E_2) = 3.38$, $\rho_2(E_3) = 1.25$ для пиков $E_2 = -2A - 1.49V_1$, $E_3 = -2A - 1.41V_1$

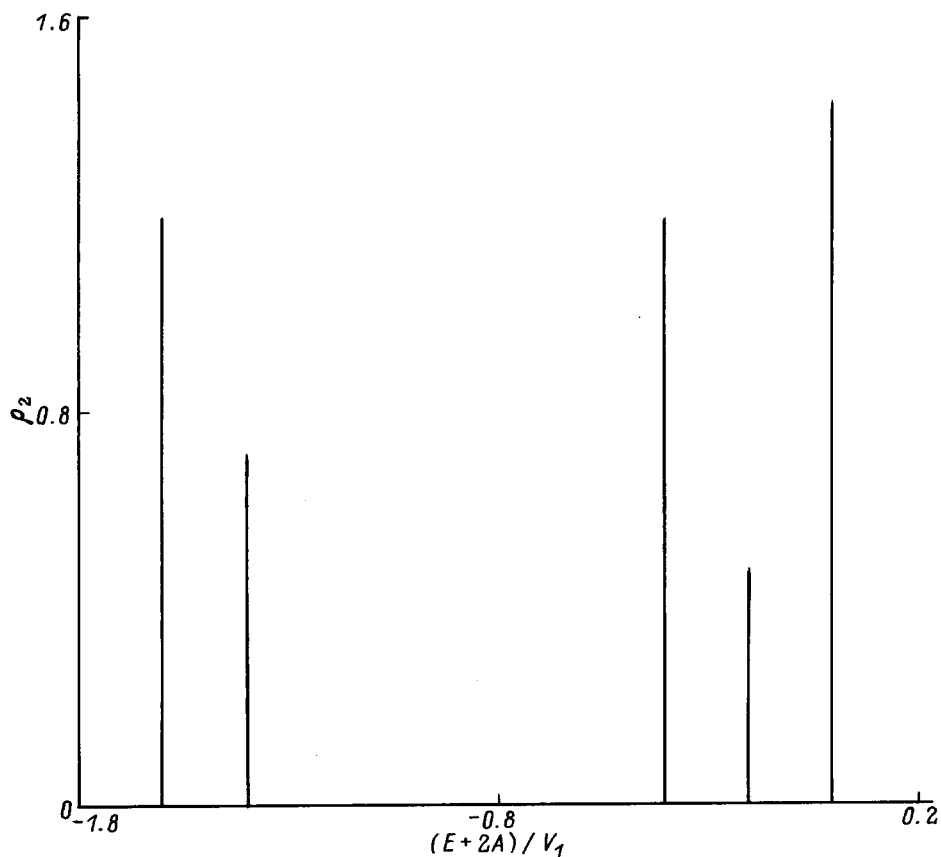


Рис. 4. Спектр бифононных колебаний в квазикристаллической цепочке, полученный при точном решении системы секулярных уравнений.

дает значение $d \approx 0,8$, что вполне согласуется с использованным в теории одночастичных состояний в квазикристалле значением фрактальной размерности в цепочке Фибоначчи $d = 1$. Вместе с тем буквальное сопоставление соотношений (16) и бифононного спектра на рис. 2, 3 можно проводить в отсутствие детальной теории бифононов в квазикристаллах только для оценок, поскольку соотношения (16) получены для одночастичных состояний. Именно вследствие отсутствия такой теории в настоящее время представляется затруднительным анализ высокочастотной области бифононного спектра, представленного на рис. 2 набором резонансных пиков, систематику которых предполагается провести в дальнейшем.

В связи с этим представляет интерес сравнение полученных с использованием рекуррентной схемы (11), (12) результатов, представленных на рис. 2, с результатами точных расчетов спектра бифононов в квазикристалле непосредственно из решения системы секулярных уравнений (8) путем диагонализации соответствующей матрицы на ЭВМ. Этот расчет был выполнен для цепочки Фибоначчи с числом узлов $N = F_7 = 21$. При этом число секулярных уравнений в системе (8) равно $N_s = N(N + 1)/2 = 231$. Диагонализация матрицы 231×231 и последующие расчеты плотности состояний $\rho_2(E)$ проводились на

ЭВМ ЕС-1062. Отметим, что при большем N вычисления уже затруднительны, поскольку необходимо диагонализировать матрицу 595×595 и более высокого ранга. Полученные результаты для плотности бифононных состояний в квазикристалле при $N_s = 231$, $A = 5V_A$, $V_B = 2V_A$ представлены на рис. 4. При этом бифононная зона разбита на каналы с шириной $\Delta = 0.2V_1$, и для графической демонстрации число собственных значений энергии n_i , попавших в данный i -й канал, представлялось вертикальной линией с длиной, равной величине $\rho_{2,i} = n_i/N\Delta$ на правом крае канала. При этом удовлетворяется необходимое для плотности состояний условие нормировки $\sum \rho_{2,i}\Delta = 1$. Сравнение рис. 4 и 2 показывает, что спектр бифононов, полученный при использовании рекуррентной схемы (11), (12), и спектр, полученный при точном решении системы секулярных уравнений (8), имеют совпадающий общий вид с выделением характерного расположения системы пиков в низкочастотной и высокочастотной областях, что подтверждает корректность использованной рекуррентной схемы (11), (12) при сильном ангармонизме. Вместе с тем абсолютной тождественности рис. 4 и 2 не наблюдается, поскольку длина $N = 21$ слишком мала, например, для проявления фрактальной структуры, представленной на рис. 3. Увеличение длины цепоч-

ки позволит зафиксировать начало генерации этой фрактальной структуры и, кроме того, исследовать основные закономерности систематики группы пиков в высокочастотной области бифонной зоны (рис. 2), что представляет несомненный интерес.

В заключение авторы считают своим долгом выразить В.М. Аграновичу искреннюю признательность за полезные замечания.

Список литературы

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 15, 1951 (1984).
- [2] S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, H.J. Schellnhuber, E.D. Siggia. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 24, 1873 (1983).
- [3] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff, C. Tang. *Phys. Rev. Lett.* **50**, 24, 1870 (1983).
- [4] J.A. Ashraff, R.B. Stinchcombe. *Phys. Rev.* **B37**, 10, 5723 (1988).
- [5] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F.Y. Juang, P. Bhattacharya. *Phys. Rev. Lett.* **55**, 14, 1768 (1985).
- [6] V.I. Zubov, J.N. Teixeira. *Phys. Rev.* **B49**, 13, 8671 (1994).
- [7] A.I. Kolesnikov, M. Prager, J. Tomkinson, I.O. Bashkin, V.Yu. Malyshev, E.G. Ponyatovskii. *Phys.: Cond. Matter.* **3**, 5, 5927 (1991).
- [8] V.M. Agranovich, O.A. Dubovsky. *Optical Properties of Mixed Crystals.* North-Holland. Amsterdam (1988). P. 297–398.
- [9] V.M. Agranovich, O.A. Dubovsky, A.V. Orlov. *Phys. Lett.* **A119**, 2, 83 (1986).
- [10] О.А. Дубовский, А.В. Орлов. *ФТТ* **32**, 6, 1613 (1986).
- [11] О.А. Дубовский, А.В. Орлов. *ФТТ* **36**, 10, 3131 (1994).
- [12] V.M. Agranovich, S. Mukamel. *Phys. Lett.* **A147**, 1, 155 (1990).
- [13] В.М. Агранович, О.А. Дубовский. *Письма в ЖЭТФ* **3**, 2, 345 (1966).
- [14] Я. Аавиксоо, Я. Липпмаа, Т. Рейнот. *Опт. и спектр.* **62**, 2, 419 (1987).
- [15] Н.М. Благовещенский, Е.Б. Докукин, Ж.А. Козлов, В.А. Парфенов. *Письма в ЖЭТФ* **30**, 1, 14 (1979).