

## РЕЗОНАНСНЫЕ ОСОБЕННОСТИ В СПЕКТРЕ КВАЗИЛОКАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ В СИСТЕМАХ С НЕСКОЛЬКИМИ ВЕТВЯМИ ЗАКОНА ДИСПЕРСИИ

А. М. Косевич

г. Харьков, Физико-технический институт низких температур им. Б.И.Веркина НАН Украины

Д.В.Мацюкин

г. Харьков, Харьковский государственный университет

С. Е. Савотченко

г. Белгород, Белгородский государственный университет

*Проанализированы резонансные особенности рассеяния в одномерной системе с точечным дефектом, в которой существуют два типа элементарных возбуждений. Установлено, что в системе, обладающей законом дисперсии с двумя ветвями, проявляются резонансные состояния особого типа (резонансы Фано). Рассчитаны и проанализированы плотности квазилокальных состояний в одномерной системе с точечным дефектом и в ГЦК кристалле с плоским дефектом. Пик плотности состояний находится вблизи энергии (частоты) резонансного прохождения частицы (волны) через дефект, хотя и слегка смещен относительно нее. При подходе к краю непрерывного спектра пик приближается к резонансной частоте и обостряется, стремясь к  $\delta$ -образному.*

**Введение.** В последнее время проявляется большой интерес к явлениям, связанным со взаимодействием свободно распространяющихся волн или частиц с локализованными вблизи дефектов однотипными состояниями. Предметом обсуждения оказываются особенности резонансного рассеяния волн при наличии многоканальных процессов [1, 2, 3]. Природа этих особенностей тесно связана со свойствами квазилокальных состояний сплошного спектра [4]. Целью данной работы является проанализировать связь между обсуждаемыми особенностями амплитуд рассеяния и спектральной плотностью состояний изучаемой системы. Анализ проведен на двух примерах: 1) взаимодействие частиц с несколькими ветвями закона дисперсии в одномерной квантовой системе; 2) резонансные процессы рассеяния фононов в ГЦК кристалле с плоским дефектом.

**1. Особенности рассеяния и плотности состояний в одномерной системе с двумя ветвями закона дисперсии.** Изучим динамику одномерной системы, в которой имеются две группы элементарных возбуждений (квазичастиц) с отличающимися параметрами законов дисперсии. Такого рода простейшая модель системы с двумя ветвями законов дисперсии квазичастиц была впервые обсуждена в [3]. Считаем, что в интересующей нас области энергии динамика

системы описывается двумя группами квазичастиц с квадратичными законами дисперсии:

$$E = E_1 + \frac{k^2}{2m_1}, \quad E = E_2 + \frac{k^2}{2m_2}, \quad (1)$$

где для определенности  $E_1 < E_2$  и  $m_1 < m_2$  постоянная Планка взята  $\hbar = 1$ .

В [3] было предположено, что динамика такой системы при наличии точечного дефекта в начале координат описывается системой уравнений ( $j=1,2$ ):

$$\begin{aligned} E\psi_j - E_j\psi_j + \frac{1}{2m_j} \frac{\partial^2 \psi_j}{\partial x^2} = \\ = U_0 \sum_{l=1}^2 \alpha_{jl} \psi_l(x) \delta(x), \end{aligned} \quad (2)$$

учитывающих взаимодействие двух типов волн на дефекте. Если параметры взаимодействия  $\alpha_{ik}$  удовлетворяют условию  $\alpha_{11}\alpha_{22} - \alpha_{12}\alpha_{21} \neq 0$ , то из (2) естественным образом следуют граничные условия ( $j=1,2$ ):

$$\left\{ \begin{aligned} \psi_j(+0) &= \psi_j(-0) = \psi_j(0), \\ \frac{\partial \psi_j(+0)}{\partial x} - \frac{\partial \psi_j(-0)}{\partial x} &= \\ &= 2m_j U_0 \sum_{l=1}^2 \alpha_{jl} \psi_l(0) \end{aligned} \right. \quad (3)$$

Рассмотрим рассеяние волны  $\psi_1(x)$  с энергией в интервале  $E_1 < E < E_2$ . При учете взаимодействия с полем  $\psi_2(x)$  это решение имеет вид [3]:

$$\psi_1(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx}, & x < 0; \\ te^{ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (4)$$

$$\psi_2(x) = M \exp\{-\kappa|x|\}, \quad (5)$$

где  $k^2 = 2m_1(E - E_1)$ ,  $\kappa^2 = 2m_2(E_2 - E)$  и

амплитуды  $r$ ,  $t$  и  $M$  равны:

$$r = \frac{i\Delta_r(E)}{\Delta(E)}, \quad t = \frac{\Delta_t(E)}{\Delta(E)}, \quad M = \frac{\Delta_M(E)}{\Delta(E)} \quad (6)$$

и введены обозначения

$$\Delta(E) = \Delta_t(E) - i\Delta_r(E), \quad (7)$$

$$\Delta_r(E) = m_1 U_0 [m_2 U_0 (\alpha_{12} \alpha_{21} - \alpha_{11} \alpha_{22}) - \alpha_{11} \kappa], \quad (8)$$

$$\Delta_t(E) = k(\kappa + \alpha_{22} m_2 U_0), \quad (9)$$

$$\Delta_M(E) = -\kappa m_2 \alpha_{21} U_0. \quad (10)$$

В работе [3] обсуждены резонансные условия, при которых в рассматриваемой задаче рассеяния возникает либо полное отражение ( $R = |r|^2 = 1$ ,  $t = 0$ ), либо полное прохождение ( $r = 0$ ,  $T = |t|^2 = 1$ ) волны. Зависимости коэффициентов отражения и прохождения (6) от энергии представлены на рис. 1, 2. Они имеют вид, характерный для резонансов Фано, когда резонансные энергии прохождения и отражения расположены очень близко друг к другу. Это важное обстоятельство было упущено в [3]. Очень близкие выводы, касающиеся возникновения резонансов Фано, содержатся в работе [2].

Резонансная энергия полного отражения равна:

$$E_r = E_2 - \frac{m_2}{2} (\alpha_{22} U_0)^2 \quad (11)$$

и резонансная энергия полного прохождения равна:

$$E_t = E_2 - \frac{m_2}{2} (\alpha_{22} U_0)^2 \left( 1 - \frac{\alpha_{12} \alpha_{21}}{\alpha_{11} \alpha_{22}} \right)^2. \quad (12)$$

В интервале  $E_1 < E < E_2$  могут существовать специфические собственные стационарные состояния, волновые функции таких состояний имеют две компоненты  $(\psi_1, \psi_2)$ , где  $\psi_2(x)$  по-прежнему представляет собой локализованное решение (5), а  $\psi_1(x)$  есть бестоковое состояние

$$\psi_1(x) = \begin{cases} A \cos(kx - \varphi), & x < 0; \\ A \cos(kx + \varphi), & x > 0. \end{cases} \quad (13)$$

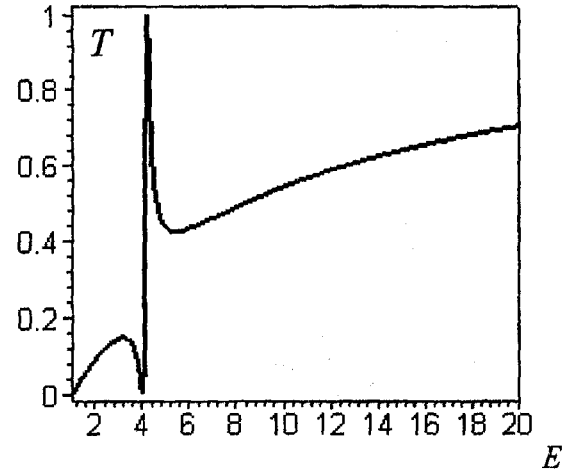


Рис. 1. Зависимость коэффициента прохождения  $T = |t|^2$  от энергии  $E$ , характерная для резонанса Фано (при значениях параметров  $U_0 = -1$ ;  $m_1 = 1$ ;  $m_2 = 2$ ;  $a_{12} = 0,2$ ;  $a_{21} = 0,5$ ;  $a_{11} = 4$ ;  $a_{22} = 4$ ;  $E_1 = 1$ ;  $E_2 = 20$ ).

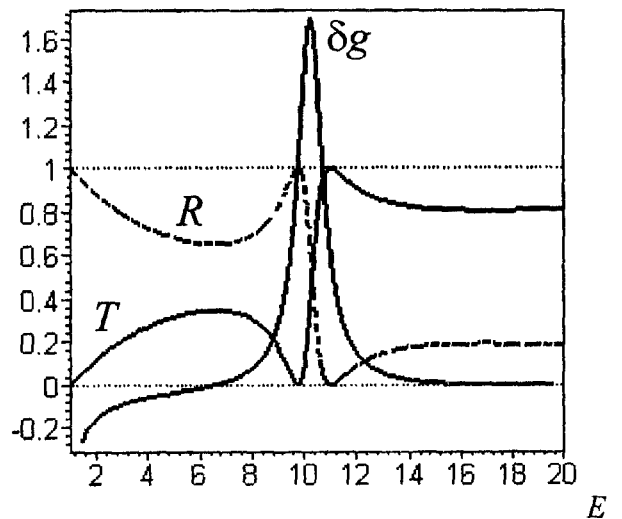


Рис. 2. Зависимость коэффициентов прохождения (сплошная линия  $T$ ) и отражения (пунктирная линия  $R$ ) и плотности квазилокализованных состояний (сплошная линия  $\delta g$ ) от энергии при значениях параметров  $U_0 = -1$ ;  $m_1 = 1$ ;  $m_2 = 2$ ;  $a_{12} = 1$ ;  $a_{21} = 1$ ;  $a_{11} = 4$ ;  $a_{22} = 4$ ;  $E_1 = 1$ ;  $E_2 = 20$ .

Волновая функция (13) есть четное собственное решение уравнения Шредингера с короткодействующим потенциалом, представляющее собой существующую на всей оси стоячую волну. Суперпозицию стоячей волны (13) и локализованного решения (5) принято называть квазилокальным состоянием. Граничные условия (3) позволяют найти дисперсионное соотношение, определяющее фазу  $\varphi$ :

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{m_1 U_0 \{m_2 U_0 (\alpha_{12} \alpha_{21} - \alpha_{11} \alpha_{22}) - \alpha_{11} \kappa\}}{\kappa (\kappa + \alpha_{22} m_2 U_0)}. \quad (14)$$

Квазилокальные состояния обладают непрерывным спектром, который характеризуется одним параметром — фазой  $\varphi$  ( $-\pi/2 < \varphi < \pi/2$ ).

Явная зависимость (14) позволяет вычислить и проанализировать спектральную плотность квазилокальных состояний. Нас будет интересовать изменение плотности состояний непрерывного спектра, вызванное точечным дефектом. Стандартные граничные условия Борна–Кармана на концах изучаемой системы длиной  $L$  определяют допустимые значения волнового числа:  $kL + 2\varphi(k) = 2\pi n$ , где  $n=0,1,2,\dots$ . В пределе  $L \rightarrow \infty$  спектр становится сплошным со следующей плотностью распределения энергии [6]:

$$g(E) = \frac{dn}{dE} = g_0(E) + \delta g(E), \quad (15)$$

где невозмущенная плотность состояний  $g_0(E) = \sqrt{m_1/2(E-E_1)}$  и интересующее нас изменение плотности квазилокальных состояний

$$\delta g(E) = \frac{1}{\pi} \frac{d\varphi(E)}{dE}, \quad (16)$$

а зависимость  $\varphi(E)$  определяется формулой (14), и  $k^2 = 2m_1(E-E_1)$ ,  $\kappa^2 = 2m_2(E_2-E)$ . Вычислив по формуле (16), используя спектральные соотношения (14), получим изменение плотности квазилокальных состояний:

$$\delta g(E) = \frac{\alpha_{11} m_1 m_2 U_0 \kappa \Delta_r(E) + \Delta_r(E) [m_2 k^2 - m_1 \kappa \Delta_r(E)]}{\pi \kappa [\Delta_r^2(E) + \Delta_r^2(E)]}. \quad (17)$$

Для упрощения расчетов и иллюстрации возможных следствий из (17) будем считать, что параметры законов дисперсии

(1)  $E_1, E_2, m_1$  и  $m_2$  имеют одинаковый порядок, взаимодействие волны с дефектом в определенном смысле слабое. Предположим, что  $\alpha_{22} U_0 < 0$ , и в системе имеет место полное прохождение ( $r=0$ ) при некоторой энергии  $E=E_t$  и что вблизи  $E_t$  функции  $\Delta_r(E)$  и  $\Delta_t(E)$  изменяются слабо, то есть точка  $E=E_t$  достаточно далека от каких-либо особенностей спектра (границы ветвей спектра и т. п.). Тогда, производя разложение в (17) по степеням  $\delta E = E - E_t$ , в основном приближении получим:

$$\delta g(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{\left( \delta E + \frac{\Delta_t \Delta_t'}{\Delta_t'^2 + \Delta_r'^2} \right)^2 + \Gamma^2}, \quad (18)$$

$$\text{где } \Gamma = \frac{\Delta_r' \Delta_t'}{\Delta_r'^2 + \Delta_t'^2}, \quad \Delta_{t,r} \equiv \Delta_{t,r}(E=E_t),$$

$\Delta_{t,r}' \equiv \Delta_{t,r}'(E=E_t)$ . Это разложение справедливо, если  $\Delta_t'$  не стремится к 0. Видно (рис. 2), что плотность состояний вблизи точки  $E=E_t$  имеет вид лоренцевского пика с шириной  $\Gamma$ , центр которого смещен относительно точки  $E_t$  на величину  $\frac{\Delta_t \Delta_t'}{\Delta_t'^2 + \Delta_r'^2}$ .

Анализ изменения плотности квазилокальных состояний (17) показал, что условие существования полного отражения выполняется либо при  $\alpha_{22} U_0 < 0$  и слабом взаимодействии частиц двух типов на дефекте  $\alpha_{12} \alpha_{21} \ll \alpha_{11} \alpha_{22}$ , либо при слабой интенсивности дефекта  $U_0$ , если  $\alpha_{12} \alpha_{21} \sim \alpha_{11} \alpha_{22}$ . Условие существования полного прохождения выполняется либо при слабом взаимодействии частиц двух типов на дефекте  $\alpha_{12} \alpha_{21} \ll \alpha_{11} \alpha_{22}$ , либо при выполнении

$$m_1 (\alpha_{11} U_0)^2 \sim m_2 (\alpha_{22} U_0)^2 \gg E_t - E_1.$$

Важно отметить, что одновременное существование полного отражения и прохождения (условия резонанса Фано) реализуется при выполнении условий  $\alpha_{22} U_0 < 0$  и  $\alpha_{12} \alpha_{21} < \alpha_{11} \alpha_{22}$ . Если эти условия не выполняются, то существует либо возможность  $t=0$  при  $\alpha_{22} U_0 < 0$ , либо возможность  $r=0$  при  $\alpha_{22} U_0 > 0$ .

**2. Резонансные особенности плотности состояний в ГЦК кристалле с плоским дефектом.** Рассмотрим динамику ГЦК кристалла с плоским дефектом, совпадающим с плоскостью (001). Оси координат направим вдоль ребер куба, ось  $Oz$  – перпендикулярно плоскости дефекта. Ограничимся учетом взаимодействия атомов только с ближайшими соседями. Будем считать, следуя [5], что дефект характеризуется изменением силовой константы взаимодействия между атомами слоя  $z=0$  и  $z=-1$  (ребро куба элементарной ячейки взято равным двум). Отношение силовой константы  $\gamma'$  в дефектном слое к силовой константе  $\gamma$  в бездефектном кристалле характеризует дефект:  $\varepsilon = \gamma'/\gamma$ .

Как было показано в [5], для такого кристалла собственные (в том числе и квазилокальные) колебания могут быть двух видов: симметричные и антисимметричные. Нас будут интересовать симметричные колебания, для которых

$$u_x^+(n_z - 1) = -u_x^-(n_z), \quad u_z^+(n_z - 1) = u_z^-(n_z),$$

где  $u_i^+$  – смещение в верхнем полупространстве ( $n_z \geq 0$ ), где  $u_i^-$  – смещение в нижнем полупространстве ( $n_z < 0$ ),  $n_z$  нумерует атомные слои вдоль оси  $Oz$ .

Эффекты резонансного прохождения и отражения имеют место для таких фононов, частоты которых лежат внутри одной из ветвей объемных колебаний кристалла, но оказываются вне другой ветви [5]. В таких областях спектра возможно существование собственных квазилокальных состояний, то есть двухпарциальных колебаний, одна компонента которых локализована у дефекта, а другая свободно распространяется вглубь кристалла.

Рассмотрим волну (см. Приложение, формула П.1), распространяющуюся в направлении [110]. Эта волна имеет две независимые компоненты – более низкочастотную (псевдопоперечную), спектр которой на рис. 3 выделен вертикальной штриховкой, и более высокочастотную (псевдопродольную), спектр которой на рис. 3 отмечен наклонной штриховкой. В спектре есть три области существования квазилокальных состояний (рис. 3): первая ограничена кривыми

2, 5, 4; вторая – сплошной частью кривой 3 и пунктирной частью кривой 4; третья – кривой 5, сплошной частью кривой 4 и пунктирной частью кривой 3. Кривая  $T$  в низкочастотной области квазилокальных состояний отвечает условиям полного прохождения через дефект псевдопоперечной волны. В правой части рис. 3 эта кривая выходит на границу щели между псевдопоперечной и псевдопродольной полосами частот. Далее эта кривая непрерывно продолжается дисперсионной кривой  $S$  для щелевой локализованной у дефекта волны.

Рассмотрим низкочастотную область квазилокальных колебаний. Добавка к невозмущенной плотности состояний в этой области спектра вычисляется по аналогии с (16) из дисперсионного соотношения (П.2):

$$\delta g = \frac{1}{\pi} \frac{\partial \phi}{\partial \lambda}, \quad (19)$$

где  $\lambda = \frac{m\omega^2}{4\gamma}$ ,  $\gamma$  – силовая константа в объеме кристалла.

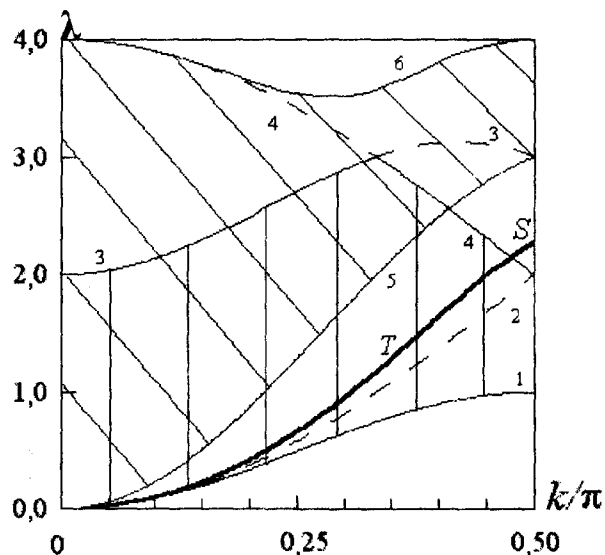


Рис. 3. Дисперсионные зависимости частот резонансного прохождения  $T$  и симметричного колебания  $S$  при  $\varepsilon = 3$ . Вертикальная штриховка соответствует псевдопоперечной ветви, наклонная – псевдопродольной. Линии:

- (2) –  $\lambda = 2(1 - \cos k)$ ,  $q = 0$ ;
- (3) –  $\lambda = 2 - \cos 2k - \cos k$ ,  $q = \pi$ ;
- (4) –  $\lambda = 2(1 + \cos k)$ ,  $q = \pi$ ;
- (5) –  $\lambda = 2 - \cos 2k + \cos k$ ,  $q = 0$ ;
- (1, 6) – соответственно нижняя и верхняя границы спектра.

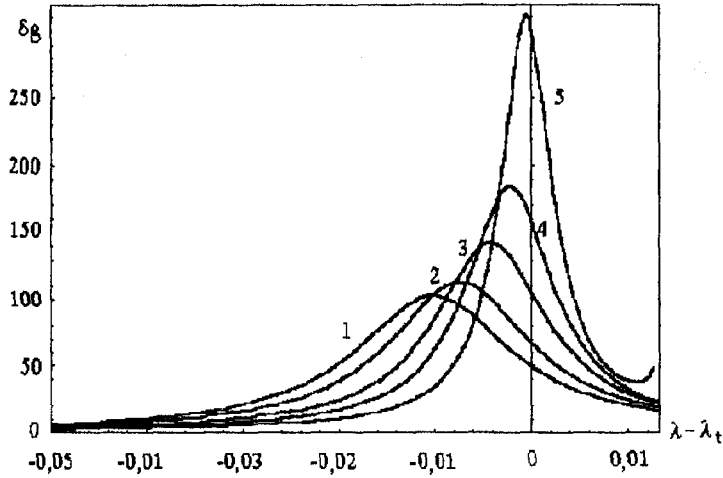


Рис. 4. Зависимость плотности состояний от  $\lambda - \lambda_t$  для разных  $k$  вдоль кривой  $T$  (см. рис.3) при  $\varepsilon = 3$  ( $\lambda_t$  соответствует частоте полного прохождения). Линии:

- (1) -  $k = 84 \frac{\pi}{180}$ ,
- (2) -  $k = 85 \frac{\pi}{180}$ ,
- (3) -  $k = 86 \frac{\pi}{180}$ ,
- (4) -  $k = 86.5 \frac{\pi}{180}$ ,
- (5) -  $k = 86.9 \frac{\pi}{180}$ .

Ограничимся анализом только симметричных квазилокальных состояний. Явные формулы для  $\delta g(\lambda)$  достаточно громоздки, поэтому мы представляем только результаты вычислений. На кривой плотности состояний при фиксированном  $k$  наблюдается пик, немного смещенный относительно частоты резонансного прохождения в сторону низких частот (рис. 4). Если следить за изменением плотности состояний с изменением волнового числа  $k$  вдоль кривой полного прохождения  $T$  (рис. 3), то видно, что вблизи точки на краю объемного спектра, в которой  $T$  стыкуется с кривой закона дисперсии щелевых локализованных колебаний  $S$ , пик на плотности состояний приближается к частоте полного прохождения и обостряется

с ростом  $k$ , стремясь к  $\delta$ -образному на краю сплошного спектра (рис. 4). Именно это состояние при выходе из сплошного спектра превращается в локализованное вблизи дефекта колебание симметричного типа (рис. 3, кривая  $S$ ).

Анализ плотности состояний симметричного типа при малых значениях продольного волнового вектора  $k$  показал, что  $\delta g(\lambda)$  имеет ярко выраженный пик, находящийся между частотами резонансного прохождения и отражения. С ростом  $k$  этот пик постепенно «размывается», а его центр смещается к частоте резонансного отражения (рис. 5). Аналогичная ситуация имеет место в квантовой системе с точечным дефектом, рассмотренной в п.1 (рис. 2)

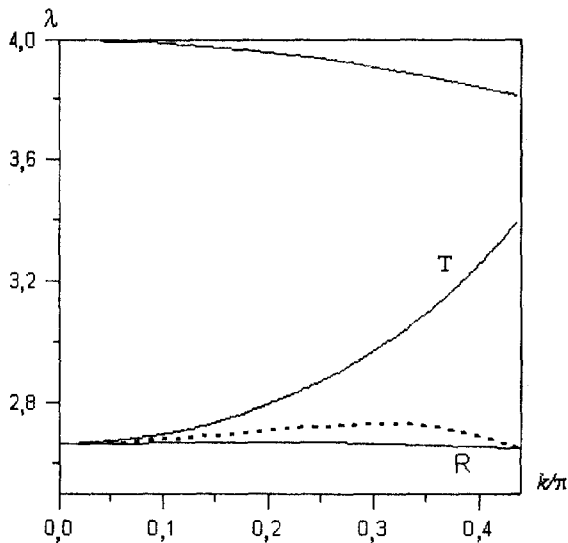


Рис. 5. Дисперсионные кривые частот, соответствующих максимуму плотности состояний (пунктирная кривая);  $T$  - закону дисперсии резонансного прохождения;  $R$  - закону дисперсии резонансного отражения;  $\beta = 2\alpha$ .

В заключение следует отметить, что на примере одномерной квантовой системы с двумя группами возбуждений и ГЦК кристалла с плоским дефектом показано, что кривые резонансного прохождения в сплошном спектре сопровождаются пиками плотности состояний. Наличие острого пика на кривой плотности колебательных состояний показывает, что соответствующие колебания резко выделены и действительно имеют характер резонансов в сплошном спектре. Применительно к ГЦК кристаллу это означает, что именно эти колебания могут играть роль так называемых «вытекающих волн».

**Приложение.** Вектор смещения волны при  $z \geq 0$  имеет вид:

$$\begin{aligned} u_x^+(x, z) &= \left( u_l \cos(qz + \varphi) + u_l e^{-\kappa z} \right) e^{ik(x+y)}, \\ u_z^+(x, z) &= \left( iu_l \Gamma_l \sin(qz + \varphi) + u_l \Gamma_l e^{-\kappa z} \right) e^{ik(x+y)}. \end{aligned} \quad (\text{П.1})$$

где

$$\Gamma_t = -\frac{2 - \cos 2k - \cos k \cos q - \lambda}{\sin k \sin q},$$

$$\Gamma_l = i \frac{2 - \cos 2k - \cos k \operatorname{ch} \kappa - \lambda}{\sin k \operatorname{sh} \kappa}.$$

Поперечное волновое число  $q$  связано с продольным  $k$  соотношением:

$$\cos q = \frac{1}{4} (\cos k (6 - 3\lambda - 2 \cos 2k) \pm \sqrt{D}),$$

где знак «+» выбирается для верхней области сплошного спектра, а знак «-» - для нижней, и

$$D = (6 - 3\lambda - 2 \cos 2k)^2 \cos^2 k - 8[(\lambda - 2)^2 + \lambda \cos 2k - 2 \cos^2 k].$$

Затухание  $\kappa$  связано с продольным  $k$  соотношением:

$$\operatorname{ch} \kappa = \frac{1}{4} (\cos k (6 - 3\lambda - 2 \cos 2k) \mp \sqrt{D}),$$

где знак «+» выбирается для нижней области сплошного спектра, а знак «-» - для верхней.

Используя сформулированные в [5] граничные условия на плоском дефекте, можно получить дисперсионное соотношение, связывающее фазу  $\varphi$ , волновые числа и  $\lambda$ :

$$\operatorname{tg} \varphi_{A,S} = \frac{g_1^{(A,S)} C_{1l}^{(A,S)} - f_1^{(A,S)} C_{2l}^{(A,S)}}{f_2^{(A,S)} C_{2l}^{(A,S)} - g_2^{(A,S)} C_{1l}^{(A,S)}}, \quad (\text{П.2})$$

УДК 539

## РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННЫЕ ПРОЦЕССЫ ЭВОЛЮЦИИ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

*И.М.Неклюдов, Б.А.Шилев*

г.Харьков, ННЦ «Харьковский физико-технический институт»

Деградация физико-механических характеристик конструкционных материалов активных зон ЯЭУ происходит из-за образования радиационно-индуцированных элементов микроструктуры.

Соотношение концентрации стоков точечных дефектов, имеющих в материале до облучения, и концентрации радиационно-индуцированных стоков, зависящей от энергетического спектра нейтронов, плотности их потока и

где

$$f_1^{(A,S)} = 5 - 2\lambda - 2 \cos^2 k - \cos k \cos q + \Gamma_t \sin k \sin q + \varepsilon(1 \mp \cos k);$$

$$f_2^{(A,S)} = \Gamma_l [\cos q \mp \varepsilon] \sin k - \cos k \sin q;$$

$$g_1^{(A,S)} = -i\{\Gamma_t \cos k \sin q + [\cos k \mp \varepsilon] \sin k\};$$

$$g_2^{(A,S)} = -i\{\Gamma_l (1 - \lambda - \cos k \cos q) + \sin k \sin q + \varepsilon \Gamma_t (1 \pm \cos k)\},$$

а  $\varepsilon = \gamma'/\gamma$  - параметр, характеризующий дефект, и равный отношению силовой константы взаимодействия дефектных слоев  $\gamma'$  к силовой константе в объеме кристалла  $\gamma$ . Верхний знак в этих формулах выбирается для антисимметричных колебаний (индекс "A"), а нижний знак для симметричных (индекс "S").

### Библиографический список

1. N. Darzynskii and G. A. Maugin. Wave Motion 23, 363 (1996).
2. Ким Ч. С., Сатанин А. М. // ЖЭТФ. - 115, 211 (1999).
3. Косевич А. М. // ЖЭТФ 115, 306 (1999).
4. Косевич А. М., Савотченко С.Е. // ФНТ. - 25, 737 (1999).
5. Косевич А. М., Мацокин Д. В., Савотченко С. Е. // ФНТ. - 25, 63 (1999).
6. Косевич А. М., Савотченко С.Е. // Научные ведомости БелГУ. Сер.: Физика, N1(10), 2000. - С.3.