Основы теории внутрикристаллического поля представлены во многочисленных книгах и обзорных статьях. Отсылаем читателя в особенности к статьям Бассани в [113b], Херцфельда и Мейджера в [101.12] и Мак Клура в [101.9]. Статья Мак Клура уделяет особое внимание оптическим спектрам отдельных ионов в кристаллах.

§ 16. Локализованные колебания решетки

Подобно электронным состояниям зонной модели, состояния в колебательном спектре решетки модифицируются изолированными дефектами. Из § 14 могут быть заимствованы наиболее важные результаты: незначительное влияние дефектов на состояния в ветвях фононного спектра; появление локализованных состояний между акустическими и оптическими ветвями и над оптическими ветвями и возможность резонансных состояний внутри ветвей.

Рассматриваем прежде всего возникновение локализованных состояний па простом примере линейной бесконечной цепочки идентичных шариков (с массой M) на одинаковом расстоянии a, связанных пружинами с жесткостью f (ср. ч. I, рис. 43, a). Тем самым мы состыковываемся с обсуждением в ч. I, § 30. Для невозмущенной цепочки из (ч. I.30.18) находим для частотного спектра:

$$\omega(q) = 2\sqrt{\frac{f}{M}}\left|\sin\frac{qa}{2}\right| = \omega_0\left|\sin\frac{qa}{2}\right|. \tag{2.18}$$

Здесь введена верхняя граничная частота $\omega_0 = 2\sqrt{f/M}$.

Предполагаем теперь, что шарик с номером $n = 0$ имеет слегка отличную от M массу $M_0 = M(1-\varepsilon)$. (ε может быть как положительным, так и отрицательным.) Имеем тогда, вместо (ч. I.30.15), уравнения движения:

$$\begin{aligned} M_0\ddot{s}_0 &= f(s_1 + s_{-1} - 2s_0), \\ M\ddot{s}_n &= f(s_{n+1} + s_{n-1} - 2s_n), \qquad n \neq 0. \end{aligned} \tag{2.19}$$

Используя временную зависимость $s_n \propto \exp(-i\omega t)$, можно привести их к виду

$$\begin{aligned} s_1 + s_{-1} + \left[\frac{4\omega^2}{\omega_0^2}(1-\varepsilon) - 2\right]s_0 &= 0, \\ s_{n+1} + s_{n-1} + \left(\frac{4\omega^2}{\omega_0^2} - 2\right)s_n &= 0, \qquad n \neq 0. \end{aligned} \tag{2.20}$$

Для зависимости смещений от n выбираем выражение

$$s_n = A\lambda^n + B\lambda^{-n}. \tag{2.21}$$