

СПЕКТР НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ (2 – 10 мэВ) КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ СТЕКОЛ В ДИСКЛИНАЦИОННОЙ МОДЕЛИ

В.Н.Новиков

Показано, что колебания, локализованные на линейных топологических дефектах в стеклах могут обуславливать наблюдаемую избыточную по сравнению с дебаевской плотность колебательных состояний (ПКС) в диапазоне энергий 2 – 10 мэВ. В этом подходе найдены спектры ПКС и неупругого рассеяния света на колебаниях в согласии с недавними экспериментальными результатами.

Колебательные спектры кристаллов и стекол наиболее сильно отличаются в области низких энергий $E < 8 \div 10$ мэВ. В стеклах при энергии $2 \div 10$ мэВ плотность колебательных состояний (ПКС) превышает дебаевскую (вычисленную по известной из эксперимента скорости звука) в несколько раз¹. Эта особенность проявляется в избыточной теплоемкости и плато в теплопроводности при $T \sim 10 \div 30$ К, в спектрах ИК-поглощения и неупругого рассеяния света².

В настоящей работе предложена модель для колебательных возбуждений, ответственных за эти аномалии.

Недавно было обнаружено, что спектры избыточной ПКС, а также соответствующий спектр неупругого рассеяния света, имеют универсальную форму в целом ряде разных стекол^{3, 4}. Это свидетельствует об универсальном характере элементов структуры, ответственных за обсуждаемые аномалии.

Как показано в данной работе, нейтронные и рамановские спектры стекол в низкоэнергетической области хорошо описываются в предположении, что дополнительные колебательные возбуждения локализованы на линейных объектах размером $L \sim 30$ Å замкнутых в петли. Наличие таких топологических дефектов структуры является основой дисклинационной модели стекла⁵, где они ассоциируются с линией, проходящей через 5-ти или 7-ми численные кольца связей. Известно, что такие линии (*odd lines*), генетически связанные с дисклинациями, не могут обрываться внутри стекла, а либо образуют петли, либо выходят на поверхность⁶. Упругие свойства материала вблизи дисклинационной петли должны, очевидно, заметно отличаться от средних значений, что и служит основой для появления локализованных на петле колебаний. Отметим, что собственные колебательные моды 2-х мерного дефекта–поверхности микрокристаллов диаметром 30 – 60 Å, выращенных внутри матрицы стекла того же или иного состава, хорошо видны в спектрах неупругого рассеяния света^{7, 8}.

В качестве исходной модели рассмотрим ансамбль хаотически расположенных упругих петель длиной $L \gg a$ (a – характерное межатомное расстояние). Найдем ПКС возбуждений, локализованных на петлях. ПКС d -мерных колебаний в дебаевском приближении имеет вид: $g(E) \propto E^{d-1}$. Для одномерных объектов это константа, равная в нашем случае

$$g_1^0 = \alpha / a^3 E_D \quad (1)$$

где E_D – дебаевская энергия, α – доля атомов принимающих участие в локализованных на петлях колебаниях. Из экспериментальных данных по ПКС^{3, 4, 9} следует, что интегрально избыточная ПКС в низкоэнергетической области составляет 10 – 15% от полной ПКС, т. е. $\alpha \sim 0,1 \div 0,2$. Характерной, и одной из наиболее важных черт рассматриваемой модели является то, что спектр колебаний петель обрезан снизу энергией E_0 , где $E_0 \sim 2\pi v/L$, v – скорость звука. Таким образом, рассматриваемая одномерная ПКС описывается ступенчатой функцией $g_1(E) = g_1^0 \theta(E - E_0)$, которую необходимо усреднить с гауссовской функцией распределения для каждой моды, чтобы учесть разброс по размерам и форме петель (при этом становится несущественной дискретность наиболее низколежащих мод):

$$\bar{g}_1(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta^2}} \int_{E_0}^{\infty} dE g_1^0 \exp \left[-\frac{(E - E_0)^2}{2\Delta^2} \right]. \quad (2)$$

Функция $\bar{g}_1(E)$ показана на рис. 1. Оценка для дисперсии $\Delta \sim E_0/\sqrt{L/a}$ оказывается близкой к значению $\Delta \approx 1/3 E_0$, полученной из условия наилучшей подгонки экспериментальных кривых. Поскольку $\bar{g}_1(E)$ обеспечивается лишь малой долей ($\alpha \sim 0,1$) от полного числа атомов, то в полную ПКС она входит в первом приближении аддитивно: $g(E) = \bar{g}_1(E) + g_3(E)$, где $g_3(E) = 3E^2/E_D^3$ — 3-мерная дебаевская ПКС. На рис. 2 а видно хорошее согласие данной модели для ПКС с экспериментальными кривыми.

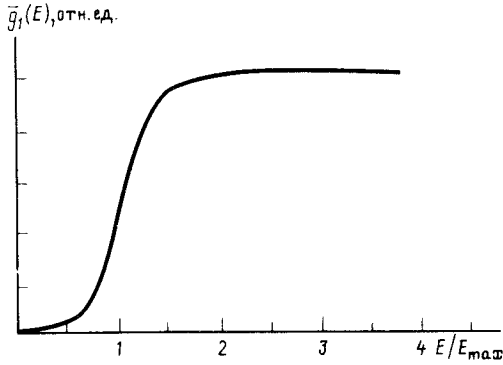
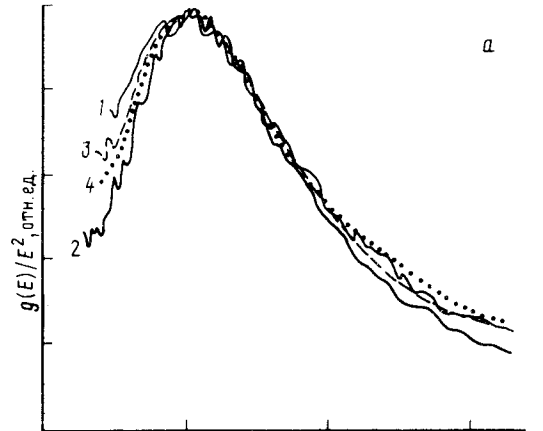


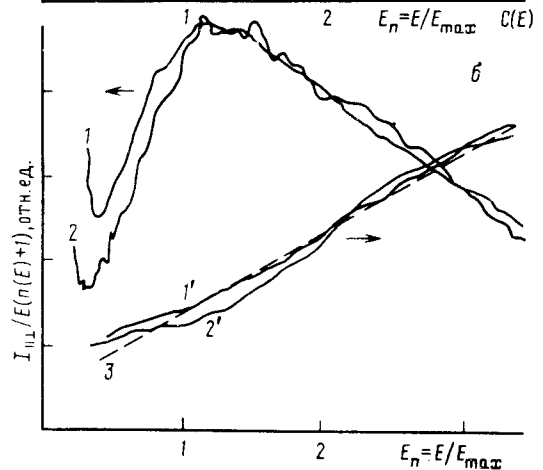
Рис. 1. Усредненная ПКС для одномерных дефектов ($\Delta/E_0 = 1/3$).



а

Рис. 2. а) Отношение низкоэнергетической ПКС к дебаевской в масштабе энергий E/E_{max} . Амплитуда пика нормирована на единицу. 1, 2, 3 — экспериментальные спектры для стеклообразных As_2S_3 , SiO_2 и $Mg_{70}Zn_{30}$ соответственно. 4 — теоретическая кривая.

б) Низкоэнергетические спектры КРС стекол As_2S_3 (1) и SiO_2 (2); Зависимость $C(E)$ для As_2S_3 (1') и SiO_2 (2')⁴. Прямая линия — линейная зависимость $C(E) \propto E$



б

Обратимся теперь к данным по неупругому рассеянию света на рассматриваемых колебаниях. В низкоэнергетической области интенсивность рассеяния $I(E)$ демонстрирует пик (т. н. бозонный пик), отражающий пик в ПКС². Согласно модели Шукера — Гамона¹⁰ интенсивность рассеяния света в стеклах

$$\frac{EI(E)}{n(E)+1} \approx C(E)g(E),$$

где $n+1$ — бозевский фактор, $C(E)$ — квадрат матричного элемента взаимодействия света с колебаниями. Для рассеяния на фононах $C(E) \propto E^2$ ². В районе бозонного пика согласно недавним экспериментальным результатам⁴ $C(E) \propto E$ (рис. 2 б).

Для рассеяния света локализованным на d -мерном дефекте колебанием оценка метричного элемента дается выражением

$$M = \int P_{ijkl} \epsilon_i \epsilon'_k e^{ikr} \nabla_j \psi_l(r) e^{-ik'r} d^d r, \quad (3)$$

где P_{ijkl} – упругооптические контакты для рассматриваемых колебаний, $\vec{\epsilon}, \vec{k}$ и ϵ', \vec{k}' – вектора поляризации и импульса падающей и рассеянной световых волн соответственно, ψ_l – волновая функция колебательного возбуждения. В (3) $|k - k'|L \sim L/\lambda_{\text{света}}$ и $\nabla\psi \sim \frac{1}{L}\psi$, где L – характерный размер дефекта. Учитывая нормированность ψ , $\int d^d r |\psi_l|^2 = 1$, так что $\psi_l \propto L^{-d/2}$ в результате получаем следующую оценку:

$$M \propto \int d^d r \frac{1}{L} \psi \propto L^{\frac{d}{2} - 1}. \quad (4)$$

Поскольку низшие колебательные моды имеют энергию $E \sim 2\pi\nu/L$, то $M \propto E^{1-d/2}$ и для некогерентных колебаний усредняя по объему получаем $|\overline{M}|^2 \propto E^{2-d}$. Одномерный случай $d = 1$ дает наблюдающуюся в эксперименте зависимость $C(E) \propto |\overline{M}|^2 \propto E$ (рис. 2б).

Таким образом, рассмотренная модель правильно воспроизводит положение, амплитуду и спектральную форму низкоэнергетической ПКС в стеклах, а также соответствующий спектр комбинационного рассеяния света.

Автор благодарен В.К.Малиновскому и А.П.Соколову за полезные обсуждения.

Литература

1. *Hunklinger S., Raychandhari A.K.* In Progr. Low-Temp. Phys., v. IX, ed. D.F.Brawer. Amsterdam, Elsevier, 1986.
2. *Jäckle J.* In Amorphous Solids: Low-Temperature Properties. Berlin, Springer, 1981.
3. *Землянов М.Г. и др.* Письма в ЖЭТФ, **49**, 521.
4. *Malinovsky V.K. et al.* Europhys Lett., 1989.
5. *Venkataraman G., Sahoo D.* Contemp. Phys., 1985, **26**, 579.
6. *Rivier N.* Phil. Mag. A 1979, **40**, 859.
7. *Duval et al.* Phys. Rev. Lett., 1986, **56**, 2052.
8. *Malinovsky V.K. et al.* Sol. St. Comm., 1988, **65**, 681.
9. *Buchenau U. et al.* Phys. Rev. B, 1986, **57**, 757.
10. *Shuker R., Gammon R.W.* Phys. Rev. Lett., 1970, **25**, 222.