ОБ АНДЕРСОНОВСКОЙ ЛОКАЛИЗАЦИИ В КРИСТАЛЛАХ С ТЯЖЕЛЫМИ ИЗОТОПИЧЕСКИМИ ПРИМЕСЯМИ

И.Я.Полищук, А.Л.Бурин, Л.А.Максимов

Показано, что спектр колебаний гармонического кристалла с тяжелыми примесями состоит из двух, разделенных щелью ветвей, при этом в каждой ветви к щели примыкает интервал частот, отвечающий локализованным модам. Найдены пороги локализации, частотная зависимость коэффициента диффузии и радиуса локализации фононов.

Аномальное поведение низкотемпературных свойств аморфных диэлектриков обусловлено специфическим характером низкочастотных элементарных возбуждений, в частности, наличием локализованных мод-ДУС [1] или фрактонов [2]. При этом возбуждение ДУС связано с туннелированием, а фрактоны возникают в перколяционных системах с оборванными связями. В работе [3] была выдвинута гипотеза, что локализованные возбуждения могут возникать при гораздо более слабых условиях, а именно в гармонических решетках с тяжелыми дефектами. В настоящей работе эта идея исследуется подробно.

Исходим из скалярной модели колебаний кубического гармонического кристалла с изотопическими примесями. Рассмотрим квадрат запаздывающей функции Грина $P_{ij} = [G^+_{ij}(t)]^2 = G^+_{ij}(t)G^-_{ji}(-t)$, причем $G^{\pm}_{ij}(t) = \mp i\theta(\pm t) \langle [u_i(t), u_j] \rangle$, а u_i – операторы смещения атома в узле i. Для фурье образа величины P_{ij}, усредненной по положению дефектов, имеем

$$P(\mathbf{k}, \Omega) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{pp}'} \Phi_{\mathbf{pp}'}; \quad \Phi_{\mathbf{pp}'} = \overline{G^+_{\mathbf{p}_+,\,-\mathbf{p}'_+}(\omega_+)G^-_{\mathbf{p}'_-,\,-\mathbf{p}_-}(\omega_-)}, \tag{1}$$

причем $\mathbf{p}_{\pm} = \mathbf{p} \pm \mathbf{k}/2$, $\omega_{\pm} = \omega \pm \Omega/2$, а черта – усреднение по положению примесей. Используя вариант "крестовой" техники, предложенный в [3], для $\Phi_{\mathbf{pp}'}$ можно получить соотношение

$$\Phi_{\mathbf{pp}'} = G^+_{\mathbf{p}_+}(\omega_+)G^-_{\mathbf{p}_-}(\omega_-)(\delta_{\mathbf{pp}'} + \sum_{\mathbf{p}''} W_{\mathbf{pp}''}\Phi_{\mathbf{p}''\mathbf{p}'}), \tag{2}$$

где $G^{\pm}_{\mathbf{p}_{\pm}}(\omega_{\pm}) = (\omega^2_{\pm} - \mathbf{p}^2_{\pm} - \Sigma_{\mathbf{p}_{\pm}}(\omega \pm i0))^{-1}$, $\Sigma_{\mathbf{p}}(\omega \pm i0) = \Delta_{\mathbf{p}}(\omega) \mp i\Gamma_{\mathbf{p}}(\omega)$ – собственная энергия, а $W_{\mathbf{pp}'} = W_{\mathbf{pp}'}(\mathbf{k}, \Omega, \omega)$ – неприводимая вершина; основные параметры идеального кристалла (массу атома, постоянную решетки, скорость звука) полагаем равными единице.

Перепишем уравнение (2) в эквивалентной форме

$$(2\omega\Omega + 2\mathbf{pk} + \Sigma_{\mathbf{p}_+}(\omega_+) - \Sigma_{\mathbf{p}_-}(\omega_-))\Phi_{\mathbf{pp}'} = \Delta G_{\mathbf{p}}(\delta_{\mathbf{pp}'} + \sum_{\mathbf{p}'} W_{\mathbf{pp}''}\Phi_{\mathbf{p}'\mathbf{p}''}), \tag{3}$$

где $\Delta G_{\mathbf{p}} = G^+_{\mathbf{p}_+}(\omega_+) - G^-_{\mathbf{p}_-}(\omega_-)$.

В дипольном приближении (см., например, [4]) можно записать

$$\sum_{\mathbf{p}'} \Phi_{\mathbf{pp}'} = 2\pi i \Delta G_{\mathbf{p}}/\tilde{\omega}(\Phi_0 + 3\mathbf{p}\hat{\mathbf{k}}/\tilde{\omega}\Phi_1), \quad \Phi_{0,1} = \Phi_{0,1}(k, \omega, \Omega), \tag{4}$$

где $\tilde{\omega} = (\omega^2 - \Delta_0(\omega))^{1/2}$, $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$, причем $\Sigma_0(\omega + i0) = \Delta_0(\omega) - i\Gamma_0(\omega)$ – вычисленная в пренебрежении интерференционными эффектами собственная энергия, не зависящая от импульса [3], (см. также (12)). Тогда из (3) получим алгебраическую систему

$$-\omega\Omega\Phi_0 + k\Phi_1 = -i\tilde{\omega}/4\pi, \tag{5'}$$

$$-\omega\Omega\Phi_1 + k\omega^2\Phi_0/3 - iM\Phi_1 = 0, \qquad (5'')$$

$$M = \Gamma(\omega) + 3\pi\tilde{\omega}^{-3}\sum_{pp'} \Delta G_p(\hat{pk}) W_{pp'} \Delta G_{p'}(\hat{p'k}) - \qquad (6)$$

функция памяти, причем при выводе уравнения (5′) мы воспользовались справедливым для рассматриваемой модели кристалла тождеством Уорда

$$\Sigma^+_{p_+}(\omega_+) - \Sigma^-_{p_-}(\omega_-) = \sum_{p'} W_{pp'}\Delta G_{p'} .$$

Из (4) и (5) находим для Φ_0 выражение, обычно получаемое в теории взаимодействующих мод [5]

$$\sum_{pp'} \Phi_{pp'} \approx \Phi_0 = \frac{\tilde{\omega}/4\pi\omega}{-i\Omega + k^2/3\,\dfrac{(\tilde{\omega}/\omega)^2}{-i\Omega + M/\omega}} \approx 1/4\pi\,\frac{\tilde{\omega}/\omega}{-i\Omega + Dk^2}, \qquad (7)$$

где $D = \tilde{\omega}^2/(3\omega M)$ – коэффициент диффузии.

Функцию памяти M вычислим в приближении веерных диаграмм [6], используя результаты работы [3]

$$M \approx \Gamma_0(\omega) + \frac{8\pi^2\Gamma_0(\omega)}{\tilde{\omega}^2\omega}\sum_q \frac{\theta(\Gamma_0(\omega) - \tilde{\omega}q)}{-i\Omega + D_0(\omega)q^2}, \quad q = |p + p'|, \qquad (8)$$

где $D_0(\omega) = \tilde{\omega}^2/(3\omega\Gamma_0(\omega))$.

Используя (7) и (8) получим для коэффициента диффузии фононов выражение, по виду совпадающее с аналогичным в теории слабой локализации электронов [6]

$$D = D_0(\omega)\Big(1 - \frac{12\pi\Gamma_0(\omega)}{\tilde{\omega}^3}\int \frac{\theta(\Gamma_0(\omega) - \tilde{\omega}q)}{q^2 - \dfrac{i\Omega}{D_0(\omega)}}\, q^2 dq\Big). \qquad (9)$$

При $\Omega \to 0$ имеем

$$D = D_0(\omega)\,(1 - 12\pi(\Gamma_0(\omega)/\tilde{\omega}^2)^2). \qquad (10)$$

Это выражение имеет смысл до тех пор пока затухание $\Gamma_0(\omega)$ достаточно мало, при этом порог локализации определяется конечным $\Gamma_0(\omega) = (12\pi)^{-1/2}\tilde{\omega}^2$. В области локализации, где выражение (10) теряет смысл, можно, следуя самосогласованной теории локализации, предложенной в [4] заменить $D_0(\omega)$ на D в подинтегральном выражении в (9). Решив полученное самосогласованное уравнение найдем

$$D \approx -i\Omega R_c^2, \quad R_c = \frac{6\pi^2\Gamma_0(\omega)\tilde{\omega}^2}{12\pi(\Gamma_0(\omega)/\tilde{\omega}^2)^2 - 1}. \qquad (11)$$

Для вычисления $\Gamma_0(\omega)$, входящего в (10), (11), воспользуемся полученным в [3] самосогласованным уравнением для собственной энергии

$$\Sigma_0(\omega + i0) = \frac{n\,\omega^2(m^{-1} - 1)}{m^{-1} + (m^{-1} - 1)\,\omega^2\big((3/4\pi^4)^{1/3} + i(\omega^2 - \Sigma_0(\omega + i0)/4\pi)^{1/2}\big)}\,. \tag{12}$$

где m и n соответственно масса примеси и ее концентрация. Плотность состояний в рассматриваемой системе определяется следующим образом [3]

$$g(\omega) = \omega/2\pi\,\mathrm{Re}[\omega^2 - \Sigma(\omega + i0)]^{1/2}. \tag{13}$$

Пренебрегая мнимой частью в знаменателе (12) и, подставляя результат в (13), видим, что выражение в квадратных скобках отрицательно в области частот (ω_0, ω_*) (где $\omega_0 = (4\pi^4/3)^{1/6} \times (m-1)^{-1/2}$ – квазилокальная частота, отвечающая полюсу выражения (12), а $\omega_* = \omega_0(1 + n(m-1))^{1/2}$) и, следовательно, в этом интервале имеется щель [7]. В интервале $(0, \omega_0)$ спектр колебаний является акустическим $\omega = (1 + nm)^{-1/2}k$ и

$$\Delta_0(\omega) \approx -\frac{n\omega^2(m-1)}{1 - (\omega/\omega_0)^2}, \quad \Gamma_0(\omega)\ \frac{n\omega^4(m-1)^2(\omega^2 - \Delta_0(\omega))^{1/2}}{(1 - (\omega^2/\omega_0^2))^2}. \tag{14$'$}$$

При $\omega_* < \omega \ll \omega_D$ спектр колебаний имеет вид оптической ветви причем $\omega^2 = \omega_*^2 + k^2$, а

$$\Delta_0(\omega) \approx \omega_*^2; \quad \Gamma_0(\omega) = \omega_*^4\tilde{\omega}/n. \tag{14$''$}$$

С помощью (10) – (14) для коэффициента диффузии имеем

$$D = D_0 \begin{cases} 1 - (\omega/\omega')^6, & \omega \ll \omega_0; \quad \omega' \approx ((1-m)^2 n)^{1/3}, \\ 1 - (\omega/\omega'), & \omega \lesssim \omega_c'; \quad \omega_c' \approx \omega_0(1 - n^{1/3}) \text{ если } mn \ll 1, \\ & \omega_c' \approx \omega_0(1 - n^{1/2}m^{1/4}) \text{ если } mn \gg 1, \\ 1 - (\tilde{\omega}_c''/\tilde{\omega}), & \omega \gtrsim \omega_*; \quad \omega_c'' \approx \omega_*(1 + \pi^3((m-1)^{-1} + n)^3/n). \end{cases} \tag{15}$$

Таким образом акустические моды локализованы в интервале (ω_c', ω_0), причем радиус локализации $R_c' \sim (\omega - \omega_c')^{-1}$, а оптические – в интервале (ω_*, ω_c'') с радиусом локализации $R'' \sim (\omega_c'' - \omega)^{-1}$. В работе [8], в отличие от данной, не учитывались особенности спектра колебаний вблизи квазилокальной частоты и единственный, найденный в [8] порог локализации акустических мод ошибочно отождествлен с величиной ω' (см. (15)), всегда лежащей выше границы акустической ветви ω_0 (то есть в щели). Однако существование щели, оптической ветви и особенностей ее мод вообще в [8] не обсуждается.

На последней республиканской конференции по физике низких температур (Ялта, апрель 1990 г) В.Г.Манжелий сделал сообщение о наблюдении резкой зависимости низкотемпературной теплопроводности твердого водорода от концентрации тяжелых примесей (Ne, Ar). На наш взгляд эти эксперименты можно понять, используя результаты настоящей работы.

Авторы благодарят Ю.М.Кагана и Д.Е.Хмельницкого за полезные обсуждения, В.Г.Манжелия за ознакомление с результатами экспериментов до их публикации, А.П.Жернова за плодотворные дискуссии, способствовавшие скорейшей публикации работы.

Литература

1. *Anderson P.W. et al.* Phil. Mag., 1972, **25**, 1.
2. *Alexander S. et al.* Phys. Rev. B, 1983, **28**, 4615.
3. *Полищук И.Я. и др.* ЖЭТФ, 1988, **94**, 259.
4. *Vollhardt D., Wolfle P.* Phys. Rev. B, 1980, **22**, 4666.
5. *Gotze W.* Sol. St. Commun., 1978, **27**, 1393.
6. *Горьков Л.П. и др.* Письма в ЖЭТФ, 1979, **30**, 248.
7. *Косевич А.М.* Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наук. думка, 1981.
8. *Akkermans E., Meynard R.* Phys. Rev.B, 1986, **32**, 7850.

Институт высоких температур
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
4 апреля 1990 г.

После переработки
21 мая 1990 г.