Письма в ЖЭТФ, том 49, вып. 12, стр. 680–682 *25 июня 1989 г.*

ЛОКАЛИЗАЦИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭНЕРГИИ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СРЕДАХ. НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛОВ

А.Л.Бурин, Л.А.Максимов, И.Я.Полищук

На примере модели двухуровневых систем с взаимодействием $U(R) \sim R^{-\alpha}$ показано, что в неупорядоченных средах существуют делокализованные коллективные возбуждения, если $\alpha < 6$. Вычислен низкотемпературный коэффициент теплопроводности, обусловленной этими возбуждениями, причем $\kappa \sim T^{4/3}$, если $\alpha = 3$.

Согласно теореме Андерсона в неупорядоченной трехмерной среде элементарные возбуждения локализуются, когда масштаб флуктуаций энергии этих возбуждений N_0^{-1} достаточно велик по сравнению с характерной амплитудой M туннелирования возбуждений. В работах [1,2] показано, что учет коллективных возбуждений существенно понижает порог локализации в сторону меньших значений $N_0 M$, а при некоторых условиях полностью снимает локализацию. Рассмотрим локализацию и распространение энергии в модели двухуровневых систем (ДУС) со средним расстоянием между ними a и обычным распределением энергетических параметров E и Δ_0 [3] ширины N_0. В настоящей работе будет показано, что взаимодействие между ДУС, которое мы выбираем в форме

$$U(R) = A(a/R)^{\alpha}, \quad \gamma = N_0 A \ll 1, \quad \alpha > 3, \tag{1}$$

при конечной температуре полностью снимает локализацию и создает новый бесфононный механизм теплопроводности, если $\alpha < \alpha_c = 6$. Причем $\kappa_{non.ph} \sim T^{4/3}$, если $\alpha \to 3$ (взаимодействие через поле деформации).

Легко понять, что основную роль в распространении энергии играют "тепловые" ДУС, для которых энергия и амплитуда туннелирования $E \approx \Delta_0 \approx T$. Среднее расстояние между тепловыми ДУС $R_T \approx a(N_0 T)^{-1/3}$ и, соответственно, характерная энергия взаимодействия (1) между ними

$$U_T = U(R_T) \approx T\gamma^{\alpha/3}(T/A)^{(\alpha-3)/3}. \tag{2}$$

Эта величина мала по сравнению с температурой практически при всех температурах ($T \ll \ll T_A = N_0^{-1}\gamma^{-3/(\alpha-3)}$).

Как показано в [4] выражение (1) одновременно характеризует как сдвиг энергии возбуждения E ДУС, так и амплитуду *flip–flop* перехода двух ДУС. Из $U_T \ll T$, применяя теорему Андерсона, находим, что в рассматриваемой системе ($\alpha > 3$) одноквантовые энергетические возбуждения не могут распространяться на макроскопические расстояния.

Рассмотрим пару тепловых ДУС, одна из которых находится в основном, а другая – в возбужденном состоянии. Эта пара образует двухуровневый кластер с расстоянием между уровнями $E_{12} = |E_1 - E_2|$. Если выполняется условие резонанса

$$M_{12} = U(R_{12}) > E_{12}, \tag{3}$$

то собственные состояния пары есть когерентная смесь из основного и возбужденного состояний каждой ДУС. Концентрация резонансных пар, для которых $M_{12} \approx M$ равна по порядку величины

$$W(M) \approx a^{-3}(N_0 T)(N_0 M)(A/M)^{3/\alpha} = R_M^{-3}. \tag{4}$$

Здесь первый множитель – вероятность того, что $E_1 \approx T$, второй – вероятность того, что $E_{12} \approx M$, третий – объем, внутри которого выполняется условие (3). Среднее расстояние между такими парами – R_M, а характерная энергия взаимодействия между соседними резонансными парами этого сорта, отнесенная к расстоянию между уровнями пар, равна

$$\chi_M = U(R_M)/M = (N_0^2 TA)^{\alpha/3}(A/M)^{(6-\alpha)/3}. \tag{5}$$

Если $\alpha > 6$, то χ_M растет с ростом M и для максимально возможного значения $M \approx T$ имеем

$$\chi_T \approx (N_0^2 AT)^{\alpha/3}(T/A)^{(\alpha-6)/3}, \tag{6}$$

что означает слабое взаимодействие между резонансными парами и, тем самым указывает на то, что в системе отстутствуют делокализованные состояния. Наоборот, при $\alpha < 6$ величина χ_M неограниченно растет с уменьшением M, так что $\lim_{M\to 0}\chi_M = \infty$,

$$\chi_M = (M_*/M)^{(6-\alpha)/3}, \quad M_* \approx T(T/A)^{2(\alpha-3)/(6-\alpha)}\gamma^{2\alpha/(6-\alpha)}. \tag{7}$$

Это свидетельствует о том, что в системе существуют макроскопические кластеры сильно взаимодействующих резонансных пар с квазинепрерывным спектром состояний – система делокализована.

Можно показать, что учет резонансных кластеров из $n \geq 3$ ДУС оставляет $\alpha_c = 6$ и не меняет зависимости M_* от T.

Таким образом, если взаимодействие ДУС спадает быстрее чем R^{-6}, то система ДУС локализована, и локализация снимается только в меру взаимодействия с фононами. В случае более медленного убывания взаимодействия система ДУС, рассматриваемая как замкнутая система, при конечной температуре делокализована и допускает распространение энергетических возбуждений на макроскопические расстояния.

В заключение рассмотрим бесфононный механизм теплопроводности в системе ДУС при $\alpha < 6$. Релаксация энергетических возбуждений наиболее эффективно происходит по системе связанных резонансных пар, т.е. по парам, для которых $M \lesssim M_*$ (см. (7)). Поскольку резонансные пары сильно связаны, то скорость релаксации, т.е. обратное время жизни этих пар, по порядку величины совпадет с расстоянием между уровнями. С этими парами связана теплоемкость $\sim W(M_*)$ (4). Элементарный процесс передачи энергии – это прыжок энергии T с одной ДУС на другую на расстояние, определяемое характерным размером пары $l \approx a(A/M^*)^{3/\alpha}$ (4). В результате получаем оценку коэффициента теплопроводности:

$$\kappa \approx W(M_*)l^2\tau^{-1} = a^2A(T/A)^{(\alpha+1)/(6-\alpha)}\gamma^{2[(\alpha+1)/(6-\alpha)]} \qquad (8)$$

Приведенные выше оценки можно получить более строго, рассматривая, как в [2], самосогласованную задачу о релаксации резонансных пар ДУС во флуктуирующем поле окружающих ДУС и вычисляя поток энергии через единичную площадку, перпендикулярную ∇T. Решение этой задачи будет опубликовано отдельно.

При $\alpha \to 3$ из (8) получаем $\kappa_{non.ph} \sim T^{4/3}$, т.е. она более медлено спадает с температурой, чем теплопроводность, обусловленная рассеянием фононов на ДУС: $\kappa_{ph} \sim T^2$ [3].

Следует ожидать, что в аморфных материалах при понижении температуры температурная зависимость теплопроводности должна измениться от закона T^2 к более мягкому закону, что и наблюдается во многих экспериментах (см. [5]).

Авторы выражают благодарность Ю.М.Кагану и Н.В.Прокофьеву за интерес к работе и полезные обсуждения.

Литература

1. *Каган Ю., Максимов Л.А.* ЖЭТФ, 1984, 87, 348.
2. *Бурин А.Л., Максимов Л.А.* ЖЭТФ, 1989, 95, 1345.
3. *Anderson P.W. et al.* Phil. Mag., 1972, 25, 1.
4. *Малеев С.В.* ЖЭТФ, 1988, 94, 280.
5. *Берман Р.* Теплопроводность твердых тел. М.: Мир, 1979, с. 286.

Институт атомной энергии
им. И.В.Курчатова

Поступила в редакцию
26 мая 1989 г.