Письма в ЖЭТФ, том 38, вып.11, стр. 536 – . 39 *10 декабря 1983 г.*

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ СИСТЕМЫ АНГАРМОНИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ В СТЕКЛАХ

В.Г.Карпов, Д.А.Паршин

Доказано существование особенностей в плотности состояний системы невзаимодействующих ангармонических осцилляторов. Этими особенностями могут объясняться избыточная по сравнению с дебаевской теплоемкость, плато в температурной зависимости теплопроводности и низкочастотные пики комбинационного рассеяния в стеклах.

Значительный прогресс в понимании низкотемпературных свойств стекол основан на представлениях о существовании там двухуровневых систем (ДУС) [1]. Однако, в теоретическом аспекте невыясненными являются важные вопросы, связанные с таким подходом. До каких энергий E (E – расстояние между двумя уровнями) справедлива модель ДУС, т.е. – где расположен третий уровень? Какова плотность состояний $n(E)$ при энергиях больше нескольких градусов?

Дело в том, что свойства стекол – теплоемкость, теплопроводность и др. [2] обнаруживают универсальное поведение не только при температурах $T \lesssim 1$ К, где они удовлетворительно описываются моделью ДУС, но и при больших T, вплоть до нескольких десятков градусов, где они в рамках модели ДУС не находят своих объяснений [3]. В частности, речь идет об избыточной по сравнению с дебаевской теплоемкости стекол и плато в температурной зависимости теплопроводности при $T \sim 10-20$ К. Поэтому возникает вопрос о выявлении универсальных причин, позволяющих единым образом объяснить наряду с существованием ДУС в стеклах и аномалии, не сводящиеся к концепции ДУС. В настоящей работе дана попытка ответить на этот вопрос.

Наш подход основан на учете существенной роли ангармонизма локальных атомных потенциалов. Аномально сильное влияние ангармонизма в стеклах по сравнению с кристаллами обусловлено флуктуациями структурных параметров, среди которых реализуются флуктуации, отвечающие очень малым или даже отрицательным значениям локальных квазиупругих констант. Для дальнейшего важно, что, в согласии с [4], локальный атомный потенциал можно считать эффективно одномодовым и описывать его выражением

$$V(x) = \epsilon[\eta(x/a)^2 + t(x/a)^3 + (x/a)^4] \quad \text{при } |\eta| \ll 1,\ |t| \ll 1, \tag{1}$$

где ϵ и a – характерные атомные энергия и радиус. Случайные величины η и t меняются от объекта к объекту. При определенных их значениях потенциал (1) оказывается двухъямным, причем в случае мощного межъямного барьера и малой асимметрии реализуется двухуровневая система, энергетическая щель E которой много меньше расстояний до других уровней. Это имеет место при $E \ll w \sim \hbar\omega_D (\hbar\omega_D/\epsilon)^{1/3} \sim 30$ К (ω_D – дебаевская частота) [4]. При $T \ll w$ модели [1] и [4] фактически эквивалентны. Интересуясь явлениями, для которых существенны бо́льшие E (скажем, теплоемкостью при $T \gtrsim 10$ К), мы в рамках излагаемого подхода выходим за пределы применимости модели ДУС и сталкиваемся с необходимостью рассмотрения спектра сильно ангармонического осциллятора (1).

Спектр потенциала (1) имеет вид $E_n = \epsilon_n \hbar^{4/3} \epsilon^{1/3}/2^{2/3} M^{2/3} a^{4/3} \sim \epsilon_n w$, где M – масса атомной частицы, ϵ_n – собственные значения уравнения

$$- \psi'' + (\alpha y^2 + \beta y^3 + y^4)\psi = \epsilon\psi,$$
$$\alpha = \eta/\eta_L, \quad \beta = t/\sqrt{\eta_L}, \quad \eta_L = (\hbar^2/2Ma^2\epsilon)^{1/3} \sim (\hbar\omega_D/\epsilon)^{2/3} \sim 10^{-2}. \tag{2}$$

Спектр ϵ_n уравнения (2) очевидно не меняется при сдвиге $V(y) \to V(y+\widetilde{C})$, где $\widetilde{C}$ – постоянная. Выберем ее таким образом, чтобы в потенциале $V(y+\widetilde{C})$ отсутствовал линейный по y член. Тогда с точностью до несущественной константы $V(y+\widetilde{C}) = \alpha' y^2 + \beta' y^3 + y^4$, где

$$\alpha' = \frac{1}{16}\sqrt{9\beta^2 - 32\alpha}\,(3\beta - \sqrt{9\beta^2 - 32\alpha})\ \left(\beta' = \frac{1}{2}(\sqrt{9\beta^2 - 32\alpha} - \beta)\right). \tag{3}$$

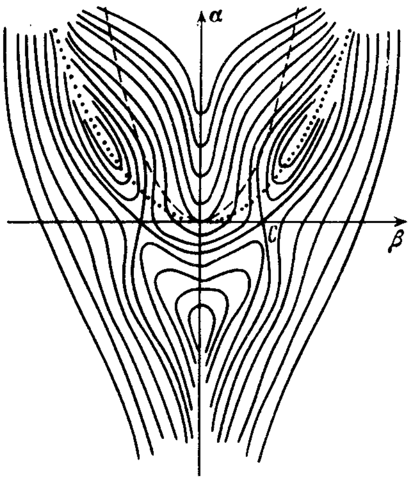
Это означает, что величина любой межуровневой щели $\epsilon_n - \epsilon_m \equiv \epsilon_{nm}(\alpha,\beta)$ инвариантна относительно преобразований (3), т.е. $\epsilon_{nm}(\alpha,\beta) = \epsilon_{nm}(\alpha',\beta')$.

Нас будет интересовать первая межуровневая щель, являющаяся аналитической функцией от α и β во всей плоскости $\{\alpha,\beta\}$. Нетрудно проверить, что функция $I = \alpha - 3\beta^2/8$ инвариантна к преобразованиям (3). Поэтому $\epsilon_{21} = \epsilon_0 + \gamma(\alpha - {}^3/_8\,\beta^2) + \ldots$ вблизи точки $\alpha = \beta = 0$. Для симметричного случая ($\beta = 0$) имеются численные расчеты [5], которые дают $\gamma > 0$. Можно таким образом заключить, что ϵ_{21} убывает вдоль оси β при $|\beta| \ll 1$. Однако при $|\beta| \gg 1$ ϵ_{21} должна увеличиваться с ростом $|\beta|$, так как спектр низких уровней в этом случае описывается формулой для гармонического осциллятора с коэффициентом упругости, пропорциональным β^2. Следовательно, на оси β имеются точки $C = (0, \pm\beta_0)$, в которых $\epsilon_{21}(0,\beta)$ достигает минимального значения.

Покажем, что C является стационарной точкой функции $\epsilon_{21}(\alpha,\beta)$. При преобразованиях (3) точка C переходит сама в себя. Значит, разложение

$$\epsilon_{21}(\alpha,\beta) = \epsilon_{21}(0, \beta_0) + b_1\alpha + b_2(\beta-\beta_0)^2 + b_3\alpha^2 + b_4\alpha(\beta-\beta_0)$$

вблизи этой точки должно быть инвариантно относительно преобразований (3). Это накладывает следующие ограничения на коэффициенты: $b_1 = 0$, $b_4 = -\frac{8}{3}\frac{b_2}{\beta_0}$. Так как $b_2 > 0$, то при $b_3 > \frac{16}{9}\frac{b_2}{\beta_0^2}$ C является точкой минимума, а при $b_3 < \frac{16}{9}\frac{b_2}{\beta_0^2}$ – седловой. Более подробное исследование, на котором мы здесь не имеем возможности останавливаться, показывает, что в случае, когда в точке C достигается минимум, не удается построить топологически непротиворечивой картины изоэнергетических линий $\epsilon_{21}(\alpha,\beta) = \text{const}$ на плоскости $\{\alpha,\beta\}$. Поэтому мы полагаем, что точка C является седловой (см. рисунок).



Схематическая картина изоэнергетических линий $\epsilon_{21}(\alpha,\beta) = \text{const}$, C – седловая точка. Область одноямных потенциалов расположена на и внутри параболы $\alpha = {}^{9}/_{32}\beta^2$, изображенной пунктиром, а также на оси β. Остальные точки плоскости отвечают двухъямным потенциалам. Симметричные двухъямные потенциалы реализуются на плоскости $\alpha < 0$ и вдоль параболы $\alpha = {}^{1}/_{4}\beta^2$, изображенной точками

Из-за наличия седловой точки плотность состояний [1] $n_{21}(E) = \langle \delta[E - E_{21}(\eta,t)] \rangle_{\eta,t}$ для первой межуровневой щели имеет особенность ван Хова: она логарифмически расходится при энергии E, соответствующей точке C. Величина этой энергии порядка w.

Анализируя вид потенциала (1) и пользуясь аналогичными соображениями, можно показать, что плотность состояний $n_{31}(E)$ для щели между первым и третьим уровнями равна нулю до энергии порядка w, при которой испытывает скачок на конечную величину.

Поведение $n_{21}(E)$ при $E \gg w$ определяется потенциалами (1) гармонического типа с $\eta \gg \eta_L$, либо $|t| \gg \sqrt{\eta_L}$; характерное значение $\eta_L \sim 10^{-2}$ (см. (2)). Так как функции распределения случайных величин η и t заметным образом меняются на масштабах $\Delta\eta \gtrsim 10^{-1} \gg \eta_L$ [4], то практически вплоть до энергий порядка $\hbar\omega_D/3$ можно считать $n_{21}(E) \sim E$, что соответствует $\eta, t^2 \lesssim \Delta\eta)$.

Мы считаем, что наблюдаемые особенности тепловых свойств стекол – плато в температурной зависимости теплопроводности и пики в приведенной теплоемкости $c(T)/T^3$ при $T \sim 10$ К [2] – обусловлены как раз найденными выше сингулярностями $n_{21}(E)$ [2]. На-

[1] Усреднение по случайным величинам η и t ведется с функциями распределения, вид которых обсуждался в [4]. Существенно, что при $|\eta| \lesssim \eta_L$ и $|t| \lesssim \sqrt{\eta_L}$ эти функции можно считать константами.

[2] Проведенный нами расчет показывает, что вклад в теплопроводность фононов с энергиями $\hbar\omega \gg w$, обусловленный их резонансным рассеянием на квазилокальных гармонических модах, оказывается не зависящим от температуры при $T \gg w$. Ангармонические моды с $\epsilon_{21} \ll w$ дают при $T \gg w$ вклад в теплопроводность, линейно растущий с температурой. Пики в плотности состояний должны приводить к плато в теплопроводности при $T \sim w/3$ вследствие резонансного рассеяния фононов на этих состояниях.

личие же гармонической области $n_{21}(E) \backsim E$ в сочетании с резким спадом при $E \sim w$ приводит, как можно показать, к появлению пиков комбинационного рассеяния света при низких частотах $\omega_0 \gtrsim w/\hbar$. Подобные пики во многих стеклах действительно наблюдались [2]. Их положение и форма коррелируют с пиками в ИК поглощении [6], что естественно с излагаемой точки зрения.

Таким образом, излагаемый подход может по-видимому единым образом объяснить наблюдаемые свойства стекол как в области применимости модели ДУС, так и при более высоких T. Он позволяет выявить новую универсальную черту стекол: особенность плотности состояний колебательного спектра при характерной энергии $E \sim w \sim 30$ К. Более детальное рассмотрение затронутых вопросов, основанное на численных расчетах, будет дано в отдельных работах.

Мы благодарим В.Л.Гуревича, Ю.М.Гальперина и В.И.Козуба за полезное обсуждение работы.

Литература

1. *Anderson P.W., Halperin B.I., Varma C.M.* Phys. Rev., 1972, **25**, 1; *Phillips W.A.* J.Low Temp. Phys., 1972,
2. Amorphous Solids: Low Temperature Properties. ed. by W.A.Phillips (Springer – Verlag, Heidelberg, 1980).
3. *Jones D.P., Phillips W.A.* Phys. Rev., 1983, **B27**, 3891; *Rothenfusser M., Dietsche W., Kinder H.* Phys. Rev., 1983, **B27**, 5196.
4. *Карпов В.Г., Клингер М.И., Игнатьев Ф.Н.* ЖЭТФ, 1983, **84**, 760; *Игнатьев Ф.Н., Карпов В.Г., Клингер М.И.* ДАН СССР, 1983, **269**, 1341.
5. *Lu P., Wald S.S., Young B.L.* Phys. Rev., 1973, D7, 1701.
6. *Stolen R.H.* Phys. and Chem. Glasses, 1970, **11**, 83.

Ленинградский
политехнический институт

Поступила в редакцию
27 октября 1983 г.