Письма в ЖЭТФ, том 29, вып. 10, стр. 626 – 629 *20 мая 1979 г.*

О ЛОКАЛЬНЫХ ФОНОННЫХ МОДАХ И СТРУКТУРНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ НА ЛИНЕЙНЫХ ДЕФЕКТАХ

В.М.Винокур, В.Я.Кравченко

Рассмотрена задача о спектре колебаний линейных дефектов. Исследуется возможность решений $\omega^2(q \neq 0) = 0$, отвечающих неустойчивости. Анализируется характер неустойчивости и возможность структурного перехода. Результаты применяются для анализа спин-решеточной релаксации, изменения электросопротивления и теплоемкости.

Наличие линейных дефектов в кристаллической решетке может приводить к возникновению локализованных в перпендикулярной дефекту плоскости фононных мод [1]. Их спектр определяется уравнением

$$\left|\delta_{\alpha\beta} - U_q^{\alpha\gamma} G_q^{\circ\gamma\beta}(0, \omega^2)\right| = 0. \qquad (1)$$

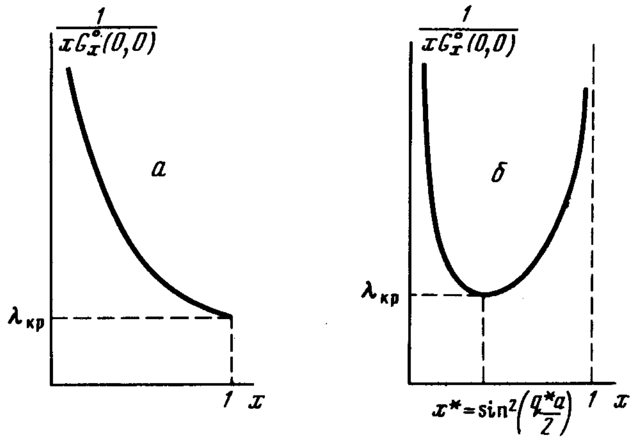
Здесь $\hat{G}_q^{\circ}(\mathbf{n}_\perp, \omega^2)$ – временная и пространственная (по координате вдоль линии дефектов, q – соответствующий волновой вектор) фурье-компонента функции Грина идеального кристалла, U_q – вносимое дефектом возмущение, которое считается локализованным на атомах дефекта (модель Лифшица – Косевича [1], в (1) $\mathbf{n}_\perp = 0$). Последнее обстоятельство удобно тем, что $G_q^{\circ\gamma\beta}$ является тензором второго ранга по индексам $\gamma\beta$ и при выборе линии дефекта вдоль достаточно симметричных направлений $G_q^{\circ\gamma\beta}$, как и $U_q^{\alpha\gamma}$ диагонализуется. Связанные состояния интересующего нас типа возникают при $U_q < 0$, что соответствует ослаблению взаимодействия дефектных атомов между собой (или с соседними атомами матрицы) по сравнению с взаимодействиями в матрице. Анализ дисперсионного уравнения показывает, что в гармоническом приближении спектр $\omega^2(q)$ смягчается (по сравнению с неискаженным законом дисперсии), а при возмущениях $|U_q|$, превышающих некоторую характерную величину, возникает "ротонный" провал и даже обращение ω^2 в нуль при $q = q^* \neq 0$. Темой настоящего сообщения является исследование "ротонной" особенности и неустойчивости при $q = q^*$ и их проявлений в некоторых физических эффектах.

Проанализируем сначала возможность решений уравнения (1) с $\omega^2(q^*) = 0$. Для этого воспользуемся моделью кубического кристалла с взаимодействием ближайших соседей и линией дефекта вдоль [100] Из (1) получаем при $\omega^2 = 0$ (для любого $U_q^{\alpha\alpha} \neq 0$) [1]:

$$1 = \lambda \frac{x}{1+x} \mathcal{K}\left(\frac{1}{1+x}\right), \quad \lambda = -\frac{2}{\pi}\frac{\Delta\Phi}{\Phi_0}, \quad x = \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) \qquad (2)$$

[1] Дисперсионное уравнение (1) в модели ближайших соседей для изотопической примесной цепочки исследовано в [5]. В этом случае, однако, возмущение $\sim \omega^2$ и интересующие нас эффекты отсутствуют.

$\Delta\Phi/\Phi_0$ – относительное изменение силовых констант, $\mathcal{K}$ – полный эллиптический интеграл, a – параметр решетки. Величина λ характеризует возмущение ($U_q \sim \lambda x$). На рис. *а* показано графическое решение (2), а на рис. *б* – решение аналогичного уравнения, полученного для направления дефекта [111]. Решения существуют при $\lambda \geqslant \lambda_{кр}$ (для (2) $\lambda_{кр} = 1{,}85$), т. е. возникает неустойчивость спектра $\omega^2(q \neq 0) = 0$. Характерна зависимость q^*, соответствующего $\lambda_{кр}$, от ориентации дефекта: если максимальный волновой вектор вдоль дефекта q_m попадает на грань (как в случае (2)) или ребро зоны Бриллюена, то $q^* = q_m$; если же дефект ориентирован так, что q_m попадает в вершину зоны Бриллюена, то $q^* < q_m$ [1]).



Для получения зависимости $\omega^2(q)$ в области неустойчивости необходимо найти ангармонические поправки к спектру. Удобно воспользоваться техникой температурных функций Грина, аналогичной описанной, например, в [2]. В отличие от стандартного случая мы теперь невозмущенной считаем гармоническую систему дефектного кристалла. Собственно-энергетические поправки за счет ангармонизма третьего и четвертого порядка таковы:

 (3)

Вычисления с использованием функции Грина для атомов на дефектной линии, приведенной в [3], дают следующее уравнение для щели $\Delta^2 = \Omega^2(Q^*)$ (ниже фигурируют безразмерные величины $\Omega = \omega/\omega_m$, $Q =$

1) Это связано с тем, что в первом случае $G^\circ_{q_n}(0, \omega^2) \neq 0$ и правая часть (2) изменяется монотонно, тогда как во втором случае $G^\circ_{q_m}(0, \omega^2) = 0$, (ибо при вычислении $G^\circ_{q_m}(0, \omega^2)$ область интегрирования функции $G^\circ_{q\,q_\perp}(\omega^2)$ по поперечным импульсам вырождается для $q = q_m$ в точку) и правая часть аналогичного (2) уравнения имеет максимум.

$= q/q_m$, $t = T/\Theta$, ω_m и Θ — частота и температура Дебая):

$$\Delta^2 = \Omega_0^2(Q^*) + a \begin{cases} t/\Delta, & t \gg \Delta \\ \ln \dfrac{1}{\Delta}, & t \ll \Delta \end{cases} . \quad (4)$$

Здесь $\Omega_0^2(Q^*)$ — затравочная щель (при $\lambda > \lambda_{кр}$ она отрицательна: $\Omega_0^2(Q^*) \equiv \Omega_0^2 = -\Delta_0^2$), $a = \Theta/\epsilon_a \sim 10^{-2}$ — ангармонический параметр (ϵ_a — порядка атомной энергии); численные множители ~ 1 в (4) опущены.

В соответствии с общим результатом об отсутствии фазовых переходов в одномерных системах $\Delta \neq 0$ (при $T = 0$ переход разрушается нулевыми колебаниями); конечная величина Δ^2 описывает перенормированную "ротонную" щель. Конкретный вид ее температурной зависимости определяется соотношением параметров t, a и Ω_0^2, величина последнего довольно сложным образом связана с значением λ. Однако структурный переход может осуществиться при наличии системы дефектов. Нетрудно проанализировать ситуацию для системы параллельных или ориентированных вдоль кристаллографически эквивалентных направлений дефектов. В этом случае Δ в правой части (4) заменяется на $\sqrt{\Delta^2 + c}$ (c — концентрация дефектных линий), что обеспечивает возможность решений $\Delta = 0$ и, следовательно, структурный переход при температуре $t_c = \sqrt{c}\,\dfrac{\Delta_0^2}{a}$. Вблизи перехода $\Delta \sim (t - t_c)^{1/2}$. Этот переход сопровождается смещением дефектных атомов и образованием сверхструктуры на линии с периодом $2\pi/q^*$. Как показано выше, в зависимости от ориентации дефектов возможно как удвоение периода, так и, вообще говоря, несоизмеримость нового периода с исходным. Отметим, что установление ближнего порядка возможно и при $t > t_c$: коррелятор смещений дефектных атомов $\langle u(n_x)u(n_x') \rangle \sim \Delta^{-1} \times \exp\left(-\dfrac{|n_x - n_x'|}{r_c}\right)$, где радиус корреляции $r_c = a\Delta^{-1}$ при достаточно малых Δ может превышать длину дефекта.

Вопрос о реализации значений $\lambda > \lambda_{кр}$ рассмотрен нами в рамках ленард-джонсовской модели взаимодействия атомов. Если расстояние между дефектными атомами больше того, на котором они находились бы в собственной матрице, то необходимые величины λ в принципе возможны. Отметим, что можно воздействовать на этот параметр и внешней нагрузкой.

Объектами к которым приложима наша модель структурной неустойчивости, могут быть цепочки примесных атомов, должным образом локально изменяющих силовую матрицу. Сюда же можно отнести и разрыв и перестройку некоторых связей при введении дислокаций. В частности, между "болтающимися" связями возникает обменное взаимодействие [4], также дающее вклад в λ.

Мы рассчитали эффекты, вносимые "ротонной" особенностью в зависимость от T времени спин-решеточной релаксации дислокационной цепочки спинов τ, дислокационной добавки к электросопротивлению ρ_d и теплоемкости C_d. Приведем некоторые результаты. Случай спин-решеточной релаксации особенно нагляден, ибо в ней принимают участие именно локальные фононы. Даже в отсутствие "ротонного" провала в спектре обычная T-зависимость комбинационного рассеяния ($\tau_k^{-1} \sim T^7$) существенно ослабляется, а τ_k^{-1} возрастает. Для релаксации посредством модулированного обменного взаимодействия имеем

$$\tau_k^{-1} \approx 4\cdot 10^4 A(T), \quad A(T) \approx \kappa^{-1} e^{-\kappa}, \quad \kappa = \frac{3}{2}\left(\frac{2}{\lambda t^2}\right)^{1/3}. \tag{5}$$

Наличие щели может приводить к значительно бо́льшему вкладу. В частности, при $\lambda < \lambda_{\text{кр}}$ $A(T) \approx \sqrt{t}\,\Omega_0^{-3/2} \exp(-\Omega_0/t)$. Как качественно, так и количественно (при выборе $\Omega_0 \equiv \Omega_0(Q^*) \sim 0{,}2$) имеется согласие с экспериментом [4]. Представляет интерес область, где доминируют прямые процессы релаксации; так: если $\Delta < \Omega_s$ (зеемановской частоты) $\tau_{\text{пр}}^{-1} \sim (\Omega_s^2 - \Delta^2)^{-1/2}$.

"Ротонный" участок спектра дает следующий вклад в электросопротивление:

$$r(T) = \frac{\rho_d(T) - \rho_d(0)}{\rho_d(0)} \approx a\frac{t}{\Delta}\,\Gamma\left(\frac{5}{2}, \frac{\Delta}{t}\right) \tag{6}$$

(влияние длинноволновой части спектра исследовано в [3]). Для добавки к теплоемкости имеем при $t > \Delta$

$$C_d \approx 3N_d\Delta \tag{7}$$

(N_d – число дефектных атомов). Из (7) и (4) следует, что отношение атомных теплоемкостей для дефекта и матрицы $\sim 15\pi^{-4}[\Delta_0/_a t^2]^{-1} >> 1$ при достаточно низких температурах.

Авторы глубоко благодарны Д.Е.Хмельницкому за многочисленные обсуждения и полезные советы, а также М.И.Каганову, А.М.Косевичу и В.Л.Покровскому за ценные замечания.

Институт физики твердого тела
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
2 апреля 1979 г.

Литература

[1] А.М.Косевич. Основы механики кристаллической решетки, М., изд. Наука, 1972.

[2] В.Г.Вакс. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков, М., изд. Наука, 1973.

[3] В.М.Винокур, В.Я.Кравченко. ЖЭТФ, **74**, 702, 1978.

[4] V.A.Grazhulis, V.V.Kveder, Yu. A.Ossipyan. Proc. of XX Ampere Congress., Tallin, 1978.

[5] Я.А.Иосилевский. ФТТ, **10**, 2531, 1968.