

ЛОКАЛИЗАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОД В СЛОИСТОЙ РЕШЕТКЕ С ДИАГОНАЛЬНЫМ И НЕДИАГОНАЛЬНЫМ БЕСПОРЯДКОМ

*А. П. Жернов**

*Российский научный центр «Курчатовский институт»,
Институт сверхпроводимости и физики твердого тела
123182, Москва, Россия*

Е. П. Чулкин

*Физико-технический институт
426000, Ижевск, Россия*

Поступила в редакцию 24 апреля 1997 г.

Рассматривается возможность слабой локализации фононных мод в неидеальной гармонической кристаллической решетке, отдельные слои которой слабо связаны между собой. Получено выражение для тензора коэффициента диффузии D . Исследована роль процессов обратного когерентного рассеяния. Установлено, что за счет таких процессов в условиях сильного диагонального беспорядка в области относительно низких частот, где закон дисперсии фононных мод проявляет двумерные свойства, может иметь место существенная перенормировка коэффициента диффузии D . Проанализирована ситуация, реализующаяся в условиях недиагонального беспорядка в случае наличия в решетке резонансно рассеивающих примесных центров. Обсуждается вопрос о возможной природе низкотемпературного плато в теплопроводности слоистых кристаллов BSCCO и BSYCO.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в литературе широко обсуждается проблема распространения и рассеяния квазичастиц в неупорядоченных средах в условиях, когда существенными оказываются процессы когерентного многократного рассеяния. Особый интерес здесь вызывают явления, связанные с эффектом когерентного обратного рассеяния. Этот эффект был предсказан теоретически и обнаружен в начале 80-х годов для электронов в неупорядоченных металлах. Подчеркнем, что для электронов проблема локализации достаточно широко изучена и интерес к ней сохраняется неизменным на протяжении длительного времени (см., например, монографию [1], обзоры [2, 3]).

Сейчас сформировалось как самостоятельное направление явление локализации электромагнитных волн, распространяющихся в неупорядоченных средах. Относительно проявления когерентных явлений при рассеянии света см., например, обзор [4]. Сравнительно недавно возникла дискуссия по поводу экспериментов амстердамской группы [5]. В них исследовались скорости переноса излучения в образцах с порошком TiO_2 в воздухе, и было обнаружено существенное различие в величинах между скоростью v_E переноса энергии и фазовой скоростью. Аналогичные результаты получены

*E-mail: ZHERNOV@KURM.POLUN.KIAE.SU

в [6] для случая пористых стекол. Для объяснения этих фактов в ряде работ были использованы представления о существовании в среде хаотично расположенных резонансно рассеивающих примесных центров [7, 8].

Что касается проблемы слабой локализации фононных мод и звуковых волн в неупорядоченных системах, то ситуация следующая. Проводятся исследования для стандартных трехмерных решеток. Число работ невелико. Заметный интерес вызывают системы с резонансно рассеивающими примесными центрами. Рассмотрен случай гармонического кристалла с изотопическими дефектами в приближении одноузельного когерентного потенциала в условиях кроссового расщепления спектра [9, 10]. В наших работах [11, 12] была проанализирована ситуация в общем случае недиагонального беспорядка при учете взаимного влияния примесей. В [13] обсуждался вопрос о критерии Июффе–Регеля. Кроме того, в нескольких работах анализировался вопрос о перенормировках фононного спектра из-за проявления эффектов когерентного обратного рассеяния в ангармонических процессах. В [14] впервые были рассмотрены подобные особенности спектра квазичастиц вблизи порогов локализации, изучалась некая гипотетическая ситуация. Мы исследовали для систем с резонансно рассеивающими дефектами температурные и концентрационные особенности спектров вблизи порогов [15], а также в ультразвуковом пределе [16, 17]. Согласно полученным нами результатам, в ультразвуковом пределе в стандартной трехмерной ангармонической решетке процессы когерентного обратного рассеяния приводят к существенным перенормировкам групповой скорости и времени жизни фононов. Данный механизм релаксации может преобладать над рэлеевским и традиционным ангармоническим механизмами релаксации.

В случае фононов ситуация исследована далеко не столь полно, как для электронов и электромагнитного излучения. Подчеркнем, что до настоящего времени практически не обсуждался в литературе вопрос о влиянии когерентных эффектов при распространении и многократном рассеянии фононных мод на частотное и низкотемпературное поведение кинетических коэффициентов в низкоразмерных соединениях. По сравнению со стандартными трехмерными соединениями в низкоразмерных системах локализационные явления должны проявляться более выражено. Поэтому представляется интересным проведение теоретических исследований локализации колебательных мод именно в слоистых и квазидномерных соединениях. Рассмотрение сформулированной проблемы для слоистых кристаллов является целью нашей работы.

Ниже обсуждается возможность слабой локализации колебательных возбуждений в некоторых неидеальных сильноанизотропных гармонических решетках. Принимается, что отдельные слои таких решеток слабо связаны между собой и проявляют двумерные свойства. Мы рассматриваем случаи сильного диагонального и недиагонального беспорядков. Простоты ради используется скалярная модель решетки. Конкретно исследуется частотное поведение тензора коэффициента диффузии. При определении коэффициента диффузии для квазичастиц фононов мы основываемся на строгом выражении типа Кубо для решеточной теплопроводности. Опираясь на такое выражение, можно получить аналог уравнения Бете–Солпитера для двухчастичной гриновской функции, через которую выражается коэффициент диффузии. Подчеркнем, что усредненная по примесным конфигурациям двухчастичная решеточная гриновская функция определяется с учетом процессов когерентного обратного рассеяния.

Отметим, что в слоистых решетках с диагональным беспорядком (т. е. с тяжелыми дефектами) в области, где система обнаруживает квазидвумерные свойства, практически не возникают хорошо определенные квазилокальные моды [18–20]. При этом

сравнительно слабой оказывается перенормировка групповой скорости фононов (но не времени жизни). Стандартного типа квазилокальные моды возникают, однако, в условиях недиагонального беспорядка, т. е. резкого ослабления локальных силовых параметров для примесного атома [20–28]. И только в этом случае можно говорить о системе резонансно рассеивающих примесных центров.

В рамках развиваемой теории обсуждаются экспериментальные данные по нестандартной температурной зависимости теплопроводности монокристаллов слоистых систем ВТСП $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$ (BSCCO) и его диэлектрического аналога $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{YCu}_2\text{O}_8$ (BSYCO).

2. МОДЕЛЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Обсудим в первую очередь модель кристаллической решетки, отдельные слои которой слабо связаны между собой. В качестве такой модели в работе используется решетка с тетрагональной симметрией. Предполагается, что динамически взаимодействуют только ближайшие соседние атомы. Считается, что эффективное взаимодействие между атомами в базисной плоскости xy намного сильнее, чем вдоль оси симметрии четвертого порядка z .

В принятой модели решетки закон дисперсии для колебательной моды с квазиимпульсом \mathbf{k} записывается в виде

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega_{\parallel}^2 \left(\sin^2 \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_y}{2} \right) + \omega_{\perp}^2 \sin^2 \frac{bk_z}{2}. \quad (1)$$

Здесь $\{a, b\}$ — компоненты трансляционного вектора решетки. Через ω_{\parallel}^2 и ω_{\perp}^2 обозначены величины

$$\omega_{\parallel}^2 = \frac{4\gamma_{\parallel}}{M_0}, \quad \omega_{\perp}^2 = \frac{2\gamma_{\perp}}{M_0},$$

где M_0 — масса атома решетки-матрицы. По определению, силовые параметры γ_{\parallel} и γ_{\perp} ($\gamma_{\parallel}, \gamma_{\perp} > 0$) характеризуют взаимодействие в плоскости xy и вдоль оси z . Согласно сказанному выше, $\gamma_{\parallel} > \gamma_{\perp}$.

В пределе длинных волн, когда выполнены условия

$$ak_{x(y)} \ll 1, \quad bk_z \ll 1, \quad (2)$$

соотношение (1) упрощается:

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \dot{v}_{\parallel}^2 k_{\parallel}^2 + \dot{v}_{\perp}^2 k_{\perp}^2, \quad k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2.$$

Фигурирующие здесь величины \dot{v}_{\parallel} и \dot{v}_{\perp} суть скорости звука, причем

$$\dot{v}_{\parallel} = \frac{a\omega_{\parallel}}{2}, \quad \dot{v}_{\perp} = \frac{b\omega_{\perp}}{\sqrt{2}}.$$

В рассматриваемой ситуации, когда закон дисперсии отвечает случаю трехмерной решетки, спектральная функция квадрата плотности фононных состояний $g(\omega^2)$ определяется цепочкой равенств:

$$g(\omega^2) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega^2 - \dot{v}_{\parallel}^2 k_{\parallel}^2 - \dot{v}_{\perp}^2 k_{\perp}^2) = \frac{a^2 b}{(2\pi)^2} \frac{\omega}{\dot{v}_{\parallel}^2 \dot{v}_{\perp}^2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{\omega}{\omega_{\parallel}^2 \omega_{\perp}}. \quad (3)$$

При относительно низких частотах,

$$0 < \omega^2 \leq 2\omega_{\perp}^2,$$

возможна ситуация, когда для величины $k_{x(y)a}$ условие типа (2) еще выполняется, однако для составляющей волнового вектора вдоль направления перпендикулярного слоям оно нарушено. Тогда имеем

$$\omega^2(\mathbf{k}) = v_{\parallel}^2 k_{\parallel}^2 + 2\omega_{\perp}^2 \sin^2 \frac{k_{\perp} b}{2}. \quad (1')$$

С учетом (1') представим плотность состояний $g(\omega^2)$ в форме

$$g(\omega^2) = \frac{a^2 b}{2\pi^2} \frac{1}{b\omega_{\perp}^2} \int dk_{\parallel} k_{\parallel} \int \frac{d \cos(bk_{\perp})}{\sin(bk_{\perp})} \delta \left(\cos(bk_{\perp}) - \frac{\omega_{\perp}^2 - \omega^2 + v_{\parallel}^2 k_{\parallel}^2}{\omega_{\perp}^2} \right).$$

Откуда после элементарных преобразований получаем

$$g(\omega^2) = \frac{1}{\pi^2 \omega_{\parallel}^2} \arccos \frac{\omega_{\perp}^2 - \omega^2}{\omega_{\perp}^2}.$$

Обратим внимание на следующий принципиальный факт. А именно, если частота фононной моды лежит в интервале

$$\bullet \quad 2\omega_{\perp}^2 < \omega^2 < \omega_{\parallel}^2,$$

то она слабо зависит от k_z , вследствие чего закон дисперсии (1') должен приближенно отвечать случаю двумерной решетки. При этом имеем

$$g(\omega^2) = a^2 b \int \frac{dk_{\perp}}{2\pi} \int \frac{d(k_{\parallel}^2 v_{\parallel}^2)}{2(2\pi)v_{\parallel}^2} \delta \left(\omega^2 - v_{\parallel}^2 k_{\parallel}^2 - 2\omega_{\perp}^2 \sin^2 \frac{bk_{\perp}}{2} \right) = \frac{1}{\pi \omega_{\parallel}^2}. \quad (4)$$

Таким образом, в рассмотренном интервале частот функция плотности квадрата фононных состояний, $g(\omega^2)$, не зависит от частоты.

Отметим, что в работе предполагается наличие сильной анизотропии силового межатомного взаимодействия. Одновременно считается, что параметры элементарной ячейки могут иметь разный порядок величины. Мы рассматриваем оба случая: $a \approx b$ и $a \ll b$. Подробнее относительно модели см., например, монографию [21].

3. РЕШЕТОЧНАЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ И КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ В АНИЗОТРОПНОМ НЕРЕГУЛЯРНОМ ГАРМОНИЧЕСКОМ КРИСТАЛЛЕ

3.1. Коэффициент диффузии

Как хорошо известно, компонента тензора решеточной теплопроводности $\kappa_{\alpha\alpha'}$ выражается в терминах корреляционной функции операторов потока энергии \mathbf{f} . Имеем [22]

$$\kappa_{\alpha\alpha'} = \frac{1}{2T^2V} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \langle f_{\alpha}(t), f_{\alpha'}(0) \rangle \rangle_c, \quad (5)$$

где T — температура и V — объем элементарной ячейки решетки. Символы $\langle \dots \rangle$ и $\langle \dots \rangle_c$, означают соответственно операции усреднения по равновесному термодинамическому распределению с гамильтонианом гармонического кристалла и по реализующимся примесным конфигурациям. Фигурирующая в (5) величина f_α определяется как

$$f_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} \Phi_{\alpha\alpha'}^{ss'} \mathbf{u}_s^\alpha \frac{P_{s'}^\alpha}{M_{s'}} R_\alpha^{ss'}, \quad R_\alpha^{ss'} = R_s^\alpha - R_{s'}^\alpha, \quad (6)$$

Здесь величины u_s^α и p_s^α — декартовы компоненты операторов смещения и импульса s -атома (s — узельный индекс), M_s — масса атома в s -узле, $\Phi_{\alpha\alpha'}^{ss'}$ — элементы матриц силовых параметров второго порядка. Через R_s^α обозначена компонента радиус-вектора s -го узла решетки.

С учетом (6) выражение (5) можно представить в форме

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2, \quad (7)$$

$$\kappa_1 = \frac{1}{6\pi T^2} \sum_{\substack{s,s', \\ s_1, s'_1}} (\Phi^0 R)_{ss'} (\Phi^0 R)_{s_1 s'_1} \int_0^\infty d\omega \omega^2 n(\omega) [n(\omega) + 1] \langle G_{ss_1}^+(\omega) G_{s'_1 s'}^-(\omega) \rangle_c, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \kappa_2 = & \frac{1}{3\pi T^2} \sum_{\substack{s,s', \\ s_1, s'_1}} [(2\Phi^0 R)_{ss'} ((\Delta\Phi R)_{s_1 s'_1} + (\Delta\Phi R)_{ss'} (\Delta\Phi R)_{s_1 s'_1}) \times \\ & \times \int_0^\infty d\omega \omega^2 n(\omega) [n(\omega) + 1] \langle \text{Im} G_{ss_1}^+(\omega) \text{Im} G_{s'_1 s'}^+(\omega) \rangle_c. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь через $G_{ss'}^\pm$ обозначены запаздывающая и опережающая решеточные одночастичные гриновские функции (G -функции). Эти G -функции «собраны» на операторах динамических атомных смещений \mathbf{u}_s .

В приведенном выражении для κ (7) первый член κ_1 (8) описывает вклад в теплопроводность стандартных фоновых мод, которые рассеиваются на динамически возмущенных областях. Как показано в Приложении, второй член κ_2 (9) связан с примесными модами. При этом в области низких температур поведение κ определяется κ_1 .

Принимая во внимание сказанное, представим κ в виде

$$\kappa_{\alpha\alpha'} \approx \frac{1}{3\pi T^2} \int_0^\infty d\omega \omega^2 n(\omega) [n(\omega) + 1] \sum_j g_j(\omega) D_{\alpha\alpha'}^j(\omega), \quad (10)$$

где по определению g_j и D^j суть плотность колебательных состояний и коэффициент диффузии j -й колебательной моды; $n(\omega) = [\exp(\omega/T) - 1]^{-1}$.

Мы рассматриваем слоистый кристалл. Его решетка обладает осевой симметрией. При этом тензор κ имеет два главных значения, которые обозначаем как κ_{\parallel} и κ_{\perp} . Простоты ради ограничимся одномодовым приближением и предположим, что матрицы силовых параметров диагональны по декартовым индексам. С целью сокращения

записи совокупность узельного s и декартова α индексов обозначается как s . При этом имеем

$$D_{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{1}{\pi g(\omega)} \sum_{s,s'} \sum_{s_1,s'_1} R_{\alpha}^{ss'} R_{\alpha}^{s_1s'_1} \Phi_{s,s'}^0 \Phi_{s_1,s'_1}^0 \langle G_{ss_1}^+(\omega) G_{s'_1s'}^-(\omega) \rangle_c. \quad (11)$$

Заметим, что величина $G_2 = \langle G^+ G^- \rangle_c$ является двухчастичной решеточной гриновской функцией.

Перейдем в (11) из узельного представления в импульсное. После ряда преобразований получаем

$$D_{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{1}{\pi g(\omega)} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \dot{v}_{\alpha}(\mathbf{k}) \dot{v}_{\alpha}(\mathbf{k}') \omega(\mathbf{k}) \omega(\mathbf{k}') G_2(\mathbf{k}; \mathbf{k}'; \omega), \quad (12)$$

$$G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \lim_{\Omega \rightarrow 0} \langle G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^+(\omega) G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^-(\omega - \Omega) \rangle_c. \quad (13)$$

Напомним, что $\omega(\mathbf{k})$ и $v(\mathbf{k}) = \partial\omega(\mathbf{k})/\partial\mathbf{k}$ — закон дисперсии и групповая скорость фоновой моды с квазиимпульсом \mathbf{k} . Выражение для коэффициента диффузии в форме типа (12), (13) см. также в [11].

В случае диэлектриков в области предельно низких температур длины пробега l_{ph} фононов определяются геометрическими размерами образца. При сравнительно высоких температурах величина l_{ph} диктуется ангармоническими процессами рассеяния с перебросом. В промежуточной области длина пробега чувствительна к дефектам [23]. Соотношения (10) и (12), (13) с разумной точностью описывают поведение κ именно в интервале промежуточных температур.

3.2. Двухчастичная гриновская функция и уравнение Бете–Солпитера

В простейшем приближении примеси являются изотопическими дефектами. Но реально примесь иначе взаимодействует со своим окружением, нежели атомы матрицы. Нас интересует качественная картина. Поэтому будем предполагать, что возмущение силовых параметров взаимодействия между отдельной примесью и ее окружением распространяется только на ближайшие координационные сферы. Концентрация дефектов c считается низкой. Полное возмущение представляется как сумма вкладов от отдельных дефектов. Можно сказать, что в кристалле возникают специфические квазимолекулы, каждая из которых образована примесью и динамически взаимодействующими с ней атомами матрицы. Оператор возмущения в узельном представлении имеет вид

$$\tilde{V}_{s_1s_2} = \sum_{\mu} c_{\mu} V_{s_1s_2}^{\mu}, \quad V_{s_1s_2}^{\mu} = \sum_{L,L'} \delta_{s_1, \mu+L_{\mu}} \delta_{s_2, \mu+L'_{\mu}} V_{LL'}^{\mu}, \quad (14)$$

$$V_{LL'} = M_0 \epsilon \omega^2 \delta_{LL'} + \Delta\Phi_{LL'}, \quad \epsilon = 1 - M_d/M_0. \quad (15)$$

В (14) через V^{μ} обозначено возмущение, вносимое отдельным расположенным в μ -узле дефектом; суммирование по L и L' осуществляется по узлам, занимаемым атомами квазимолекулы, т. е. по узлу $\mu = \mathbf{d}$ и по соседним с ним узлам.

В импульсном представлении для неидеальной гармонической кристаллической решетки в общем случае имеет место уравнение вида

$$G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \lim_{\Omega \rightarrow 0} \langle G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^+(\omega) G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^-(\omega - \Omega) \rangle_c = \\ = \lim_{\Omega \rightarrow 0} \bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}}^-(\omega - \Omega) (\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}_1} U(\mathbf{k}\mathbf{k}_1; \omega, \Omega) \langle G_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}', \omega, \Omega) \rangle_c), \quad (16)$$

где $\bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega)$ - фурье-компонента одночастичной функции $G_{ss'} = \langle G_{ss'} \rangle_c$ для неидеальной гармонической системы и $U(\mathbf{k}\mathbf{k}_1; \omega, \Omega)$ — вершинная часть. Соотношения типа (16) и называют уравнениями Бете-Солпитера.

Мы принимаем здесь и в дальнейшем, что в вершинную часть $U(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega, \Omega)$ вносят вклад только верные диаграммы, которые описывают процессы обратного когерентного рассеяния и определяют режим слабой локализации [4, 11, 14]. Имеем

$$U(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega, \Omega) = \frac{\Gamma}{N} \left[1 - \frac{\Gamma}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} \bar{G}_{\mathbf{k}_1}^+(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}}^-(\omega - \Omega) \right]^{-1}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'. \quad (17)$$

В (17) затравочная вершина $\Gamma = ct^+t^-$, т. е. определяется через одноузельные t -матрицы рассеяния.

Перейдем к одночастичной гриновской функции. Положим

$$\bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega) = \left[\omega^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2 - P(\omega) - i \frac{\omega}{\tau_i(\omega)} \right]^{-1}, \quad (18)$$

где $P(\omega)$ и $\omega/\tau_i(\omega)$ — действительная и мнимая части массового оператора Σ , соответствующего упругому взаимодействию фононов с дефектами.

В конкретных приложениях для $G_{\mathbf{k}}^+(\omega)$ вместо (18) ниже используется представление вида

$$\bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega) = Q(\omega) \left[\omega^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{k}}^2 - i \frac{\omega}{\tau'_i(\omega)} \right]^{-1}. \quad (19)$$

Здесь $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}$ — перенормированный закон дисперсии, причем выполняется соотношение

$$\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2 - P(\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}) = 0. \quad (20)$$

Фактор $Q(\omega)$ задается как

$$Q^{-1}(\omega) = 1 - \cos \Phi \frac{\partial |\Sigma(\omega)|}{\partial \omega^2} + \text{Im} \Sigma(\omega) \frac{\partial \Phi(\omega)}{\partial \omega^2}. \quad (21)$$

При этом для резонансной части фазового сдвига имеем

$$\Phi(\omega) = \arctg \frac{\text{Im} \Sigma(\omega)}{\text{Re} \Sigma(\omega)} \quad (22)$$

(см. вывод (21), (22) в Приложении 2). Кроме того, мы положили

$$\tau'_i = Q^{-1} \tau_i, \quad (23)$$

где τ'_i — время жизни квазичастиц для неидеальной гармонической системы.

При этом в узком интервале частот вблизи резонансной частоты (где $\text{Re } \Sigma(\omega_R) = 0$) и на некотором удалении от нее вместо (21) приближенно имеем

$$Q^{-1}(\omega) \approx \begin{cases} 1 + \text{Im } \Sigma(\omega) \frac{\partial \Phi}{\partial \omega^2}, & |\omega^2 - \omega_R^2| < \Gamma_R, \\ 1 - \frac{\partial P(\omega)}{\partial \omega^2}, & |\omega^2 - \omega_R^2| > \Gamma_R, \end{cases} \quad (24)$$

где Γ_R — ширина резонанса.

Подчеркнем, что при нахождении одноузельной матрицы рассеяния мы учли процессы многократного рассеяния на примесном узле. При этом действительная часть массового оператора непосредственно вблизи резонанса имеет сильную дисперсию. При определении одночастичной фононной гриновской функции в форме (19) подобная дисперсия учтена была посредством введения Q -фактора. Вместе с тем в стандартной теории сечение рассеяния выражается через фазовые сдвиги. При этом в случае резонансного рассеяния сечение выражается посредством формулы Брейта–Вигнера. В то же время сечение пропорционально квадрату модуля t -матрицы. Следовательно, есть связь между резонансной частью фазового сдвига и компонентами массового оператора. Отражением этого факта и является выражение Q -фактора вблизи резонанса через производную от резонансной части фазового сдвига (24) (см., например, монографию [24]).

Опираясь на выражение для закона дисперсии (20), для компонент вектора групповой скорости имеем

$$v_{\parallel}^2 = v_{\parallel}^2 Q^2(\omega) \left[1 - \frac{P(\omega)}{\omega^2} - 2 \frac{\omega_{\perp}^2}{\omega^2} \sin^2 \frac{k_{\perp} b}{2} \right],$$

$$v_z = v_{\perp} = Q(\omega) \frac{\omega_{\perp}^2 b}{2\omega} \sin(k_{\perp} b).$$

Обратим внимание на сильную угловую дисперсию групповой скорости.

Поскольку по условию концентрация дефектов c предполагается низкой (т. е. $c \ll 1$), то для определения массового оператора $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ удобно воспользоваться методом разложения по степеням концентрации, развитом в [25, 26]. В импульсном представлении в условиях недиагонального беспорядка подобное разложение имеет вид [11]

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) \approx \sum_{L_{\mu} L_{\mu_1}} e^{-ikL_{\mu}} \left[c t_{L_{\mu} L_{\mu_1}}^{\mu} \delta_{\mu\mu_1} + c^2 \sum_{\mu_1 \neq \mu} \left(\frac{t^{\mu} G_{\mu}^{0\mu_1} t^{\mu_1} G_{\mu_1}^{0\mu} t^{\mu}}{1 - G_{\mu}^{0\mu_1} t^{\mu_1} G_{\mu_1}^{0\mu} t^{\mu}} \right)_{L_{\mu} L_{\mu_1}} \right] \times$$

$$\times \delta_{\mu\mu_1} e^{ikL_{\mu_1}} + c^2 \sum_{\mu_1 \neq \mu} \left(\frac{t^{\mu} G_{\mu}^{0\mu_1} t^{\mu_1}}{1 - G_{\mu_1}^{0\mu} t^{\mu} G_{\mu}^{0\mu_1} t^{\mu_1}} \right)_{L_{\mu} L_{\mu_1}} e^{-ik(R_{\mu} - R_{\mu_1})} \dots \quad (25)$$

Фигурирующая выше t -матрица рассеяния на отдельной квазимолекуле определяется как

$$t^{\mu} = \frac{V^{\mu}}{1 - G_{\mu}^{0\mu} V^{\mu}}, \quad (26)$$

где $G_{\mu}^{0\mu_1}$ — гриновская функция идеальной решетки. Индексы μ и μ_1 означают, что первый узельный индекс принадлежит квазимолекуле μ , а второй — квазимолекуле μ_1 .

При этом первое слагаемое в (25) описывает рассеяние фононов на изолированных примесных квазимолекулах, а второе — на всех группах из двух квазимолекул. Опущенные слагаемые описывают рассеяние группами из трех и более примесных квазимолекул.

В [27] с использованием теоремы Бине–Коши показано, что в узельном представлении элементы матрицы рассеяния определяются выражением

$$t_{ss'} = \frac{V_{ss'} + \sum_{p=1}^I (-1)^p \sum_{i_i k_i} V \binom{s i_1 \dots i_p}{s' k_1 \dots k_p} \dot{G} \binom{k_1 \dots k_p}{i_1 \dots i_p}}{1 + \sum_{p=1}^I (-1)^p \sum_{i_i k_i} V \binom{i_1 \dots i_p}{k_1 \dots k_p} \dot{G} \binom{k_1 \dots k_p}{i_1 \dots i_p}}.$$

Здесь $A \binom{s i_1 \dots i_p}{s' k_1 \dots k_p}$ — минор матрицы (G, V) размерности $L \times L$, который составлен из элементов, находящихся на пересечении строк $L_p = (i_1 \dots i_p)$ и столбцов $L'_p = (k_1 \dots k_p)$. Каждый индекс в наборах L_p и L'_p может встречаться только один раз. При любой перестановке индексов величина $A \binom{s i_1 \dots i_p}{s' k_1 \dots k_p}$ изменяет знак.

При качественном описании фононных спектров в случае $c \ll 1$ практически достаточно учесть в (25) члены до второго порядка по концентрации включительно. Влияние взаимодействия фононов с группами из более чем двух примесей из-за ангармонизма должно быть выражено слабо. Предполагается, что разложение по группам взаимодействующих примесей сходится в асимптотическом смысле. Иначе говоря, такой ряд считается сходящимся, если для нескольких первых его членов значение каждого последующего меньше предыдущего (расходимость вблизи особых точек можно формально устранить, учтя ангармоническое затухание). К вопросу о сходимости ряда мы вернемся при обсуждении конкретных моделей.

В конкретных расчетах нужно учитывать, что функция Грина G^0 обладает симметрией кристалла, а возмущение V — симметрией квазимолекулы. При этом удобно использовать методы теории представлений групп.

Что касается затравочной вершины Γ , то она, как можно показать, определяется соотношением вида

$$\Gamma = c \sum_{L_\mu L'_\mu L_{\mu^{(1)}} L'_{\mu^{(1)}}} \exp(-i\mathbf{k}_1 L_\mu) \tilde{t}_{L_\mu L'_\mu}^{(+)\mu} \exp(i\mathbf{k}_2 L'_\mu) \exp(i\mathbf{k}_3 L_{\mu^{(1)}}) \tilde{t}_{L_{\mu^{(1)}} L'_{\mu^{(1)}}}^{(-)\mu^{(1)}} \times \\ \times \exp(-i\mathbf{k}_4 L'_{\mu^{(1)}}) = c \tilde{t}^{(+)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \tilde{t}^{(-)}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4). \tag{27}$$

При этом одноузельная матрица \tilde{t} выражается через V^μ (14), (15) и $\bar{G}_k(\omega)$ (19).

4. СЛУЧАЙ ДИАГОНАЛЬНОГО БЕСПОРЯДКА

4.1. Особенности поведения t -матрицы и Σ -оператора

Рассмотрим для слоистого кристалла случай диагонального беспорядка, когда силовые параметры не возмущаются и величина $\Delta\Phi=0$. Проанализируем поведение одноузельной t -матрицы рассеяния, а также массового оператора $\Sigma(\omega)$. Во-первых, используя тождество

$$\sum_{s \neq 0} G_{0s}^{02}(\omega) = -\frac{\partial G_{00}^0}{\partial \omega^2} - G_{00}^{02}(\omega),$$

вместо (25) получаем

$$\Sigma(\omega) = c t(\omega) [1 + \Delta_c(\omega)], \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \Delta_c(\omega) = c t^2(\omega) \left[-\frac{\partial G_{00}^0}{\partial \omega^2} - G_{00}^{02}(\omega) \right] + \\ + \frac{c}{2} \sum_{s \neq 0} G_{0s}^{02}(\omega) t^2(\omega) \left(\frac{1 + e^{iks}}{1 - t(\omega) G_{0s}^0} - 2 \right) + \frac{c}{2} \sum_{s \neq 0} G_{0s}^{02} t^2(\omega) \frac{1 - e^{iks}}{1 + t(\omega) G_{0s}^0} + \dots \end{aligned} \quad (28')$$

($G_{00}^0(\omega) = G_{0s=0}^0(\omega)$). При этом t -матрица (26) определяется как

$$t^{-1}(\omega) = \frac{V}{1 - V G_{00}^0(\omega^2)}, \quad V = +\epsilon \omega^2. \quad (28'')$$

Отметим еще, что в (28) обе суммы быстро сходятся. Критерий сходимости ряда для $\Sigma(\omega)$, согласно [18, 19], такой:

$$\left| t^2(\omega) \frac{\partial \dot{G}_{00}(\omega)}{\partial \omega^2} \right| \ll 1 \quad (29)$$

Что касается гриновской функции $G_{00}^0(\omega^2)$ идеального кристалла, то в области частот, где решетка проявляет квазидвумерные свойства, в соответствии с (4)

$$\text{Im } G_{00}^0(\omega^2) = \pi g(\omega^2) \approx \frac{1}{\omega_{\parallel}^2},$$

где ω_{\parallel}^2 — квадрат максимальной частоты колебаний в плоскости. С использованием соотношения Крамера–Кронига получаем

$$\text{Re } G_{00}^0(\omega^2) = \int_0^{\infty} \frac{d\omega'^2}{\pi} P \frac{1}{\omega^2 - \omega'^2} \text{Im } G_{00}^0(\omega'^2) \approx \frac{1}{\pi \omega_{\parallel}^2} \ln \frac{\omega_{\parallel}^2}{\omega^2}.$$

Следовательно,

$$G_{00}^0(\omega^2) \approx -\frac{1}{\pi \omega_{\parallel}^2} \ln \frac{\omega_{\parallel}^2}{\omega^2} - i\pi g(\omega^2) \approx -\frac{1}{\pi \omega_{\parallel}^2} \ln \frac{\omega_{\parallel}^2}{\omega^2} - \frac{i}{\omega_{\parallel}^2}. \quad (30)$$

С учетом явного вида гриновской функции G_{00}^0 (30) и диагонального оператора возмущения V (14), (15) находим, что знаменатель t -матрицы (28''), определяется как

$$1 - V G_{00}^0(\omega^2) \approx 1 + \frac{\epsilon \omega^2}{\pi \omega_{\parallel}^2} \ln \frac{\omega_{\parallel}^2}{\omega^2} + i \frac{\epsilon \omega^2}{\omega_{\parallel}^2},$$

откуда непосредственно видно, что действительная часть t -матрицы в случае весьма тяжелых примесей, вообще говоря, может обращаться в нуль при значениях частоты, которая является корнем уравнения

$$1 + \frac{\epsilon \omega_R^2}{\pi \omega_{\parallel}^2} \ln \frac{\omega_{\parallel}^2}{\omega_R^2} = 0. \quad (31)$$

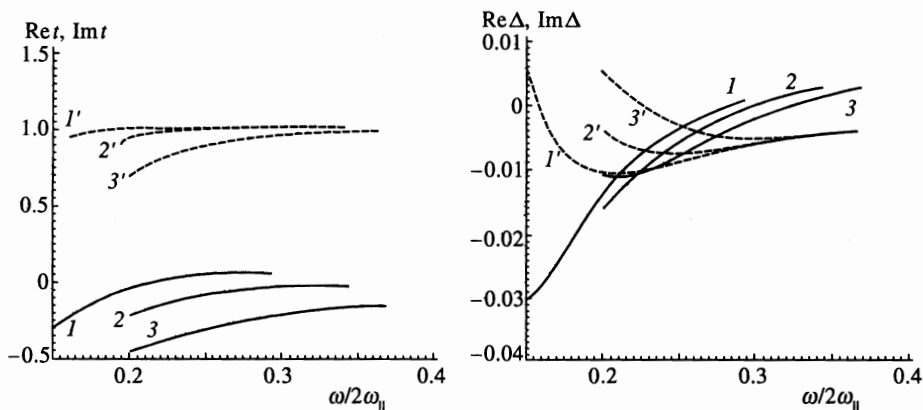


Рис. 1. Зависимость величин $\text{Re } t(\omega)$, $\text{Im } t(\omega)$ и $\text{Re } \Delta_c(\omega)$, $\text{Im } \Delta_c(\omega)$ от $\omega/2\omega_{\parallel}$. В случае t -матрицы $I(I')$, $2(2')$, $3(3')$ — кривые, отвечающие значениям параметра ϵ^2 последовательно равным 5, 7, 10; для фактора Δ_c $I(I')$, $2(2')$, $3(3')$ — кривые, отвечающие значениям параметра $c\epsilon^2$ последовательно равным 0.5, 0.75, 1. Индексы со штрихом используются для маркировки мнимых частей t и Δ_c .

При этом уширение подобного уровня порядка величины

$$\Gamma_R \approx |\epsilon| \omega_R^2.$$

Таким образом, если в рассматриваемой области частот для разумных значений параметра ϵ уравнение (31) и удовлетворяется, то не выполняется условие $\Gamma_R / \omega_R^2 \ll 1$, в результате чего практически не имеет смысла говорить о квазилокальных колебаниях, существующих в узком интервале частот, а также о резонансного типа рассеянии на таких модах. В подтверждение сказанного на рис. 1 приводятся графики для действительной и мнимой частей одноузельной t -матрицы (28'') для трех значений параметра ϵ .

Подчеркнем, что если в слабоанизотропных кристаллах наличие тяжелых примесей всегда приводит к появлению квазилокальных мод, то в низкоразмерных кристаллах возникновение подобных мод, как впервые было показано в работах [18, 19], затруднено. Однако такие моды возникают в случае слабосвязанных примесей (см. разд. 5).

Обсудим теперь вопрос о квадратичных по концентрации поправках к массовому оператору фононов, т. е. о величине Δ_c (28). В случае сильного беспорядка, когда $c \ll 1$ и одновременно $\epsilon^2 c \leq 1$, в интервале частот $|\omega - \omega_R| / \omega_R < 1$, с одной стороны, выполняются соотношения

$$\frac{\text{Re } t}{\omega_{\parallel}^2} \ll 1, \quad \frac{\text{Im } t}{\omega_{\parallel}^2} \approx 1.$$

С другой стороны, решеточная гриновская функция, согласно (30), порядка ω_{\parallel}^{-2} , в результате чего имеем

$$\Delta_c \approx c \epsilon^2 \frac{\omega^2}{\omega_{\parallel}^2} (1 + i).$$

Поскольку $\omega_R^2 \ll \omega_{\parallel}^2$, то $\Delta_c \ll 1$. В подтверждение сказанному на том же рис. 1 приводятся графики для действительной и мнимой частей фактора Δ_c для нескольких значений параметра диагонального беспорядка $c\epsilon^2$.

Из всего сказанного выше в этом разделе следует, что даже в условиях сильного диагонального беспорядка в некоторой достаточно широкой области частот вблизи ω_R можно пренебречь перенормировкой частот фононных мод. Что касается затухания, то достаточно учесть в выражении для Σ только член линейный по концентрации. В результате конфигурационно усредненная одночастичная гриновская функция фононной моды с квазиимпульсом \mathbf{k} может быть представлена в форме

$$\bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega) \approx \left[\omega^2 - \omega^2(\mathbf{k}) - i \frac{\omega}{\tau_i(\omega)} \right]^{-1}. \quad (32)$$

Здесь $\omega/\tau_i(\omega)$ — мнимая часть поляризационного оператора, т. е. *с. т.* При этом [23]

$$\frac{1}{\tau_i(\omega)} = \sigma_m \omega^2 g(\omega), \quad \sigma_m = \frac{\pi}{2} c \left(\frac{M_d - M_0}{M_0} \right)^2 = \frac{\pi}{2} c \epsilon^2.$$

В рассматриваемом случае затравочная вершина Γ в уравнении Бете–Солпитера непосредственно удовлетворяет тождеству типа Уорда. А именно,

$$t^+(\omega) - t^-(\omega) = \frac{\Gamma}{N} \sum_{\mathbf{k}} [G_{\mathbf{k}}^+(\omega) - G_{\mathbf{k}}^-(\omega)],$$

откуда с учетом (32) и (1') получаем

$$1 = \frac{\Gamma}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\omega^2 - k_{\parallel}^2 v_{\perp}^2 - 2\omega_{\perp}^2 \sin^2 \frac{bk_{\perp}}{2} \right)^2 + \left(\frac{\omega}{\tau_i(\omega)} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (33)$$

В области низких частот $0 \leq \omega^2 \ll \omega_{\parallel}^2$ вместо (33) имеем

$$\Gamma = \frac{\omega \omega_{\parallel}^2}{\tau_i(\omega)} = \frac{\omega}{\pi \tau_i(\omega) g_{\parallel}(\omega^2)}. \quad (34)$$

С использованием явных выражений для фононной гриновской функции (32) и затравочной вершины Γ (34) определим теперь диффузионную вершину и затем компоненты тензора коэффициента диффузии (12).

4.2. Диффузионная вершина

Получим выражение для вершины $U(\mathbf{q}; \omega; \Omega)$ в режиме слабой локализации, когда

$$ql \ll 1, \quad \Omega \tau_i \ll 1 \quad (35)$$

($l = v \tau_i(\omega)$ — длина пробега фонона). Ограничимся областью частот, при которых закон дисперсии фононов проявляет двумерные свойства.

Учитывая сказанное, рассмотрим выражение

$$J = \frac{\Gamma}{N} \sum_{\mathbf{k}} \bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega) \bar{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^-(\omega + \Omega). \quad (36)$$

Перейдем в (36) от суммирования по \mathbf{k} к интегрированию по $d\mathbf{k}$. Сумму $\sum_{\mathbf{k}}$ заменим на

$$\frac{a^2 b}{(2\pi)^3 2v_{\parallel}} \int_{-\pi/b}^{\pi/b} dk_{\perp} \int_0^{2\pi} d\varphi \int d(v_{\parallel}^2 k_{\parallel}^2) \dots \quad (37)$$

Воспользуемся для гриновских функций, фигурирующих в (37), представлением в форме (32), и возьмем интеграл по dk_{\parallel}^2 через вычеты. Получаем

$$J = \Gamma \frac{a^2 \tau_i(\omega)}{16\pi^2 \omega v_{\parallel}^2} \int_{-\pi/b}^{\pi/b} dk_{\perp} \int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ 1 - i\Omega \tau_i - i \frac{\tau_i(\omega)}{\omega} E(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \omega) \right\}^{-1},$$

$$E = q_{\parallel} v_{\parallel} \sqrt{\omega^2 - 2\omega_{\perp}^2 \sin^2 \frac{bk_{\perp}}{2} + \omega_{\perp}^2 \sin \frac{q_{\perp} b}{2} \sin bk_{\perp}}.$$

Учтем условие (35), которое фактически идентифицирует процессы когерентного обратного рассеяния. Если это условие выполнено, можно разложить в ряд подынтегральное выражение для J в фигурных скобках, после чего легко выполняются интегрирования по $d\varphi$ и dk_{\perp} . Находим

$$J = 1 + \tau_i(\omega) [i\Omega - R(\mathbf{q}, \omega)],$$

$$R(\mathbf{q}, \omega) = \frac{q_{\parallel}^2 v_{\parallel}^2}{2} \left(1 - \frac{\omega_{\perp}^2}{\omega^2} \right) + \frac{\omega_{\perp}^4}{2\omega^2} \sin^2 \frac{q_{\perp} b}{2}.$$

В результате оказывается, что

$$U(\mathbf{q}; \omega; \Omega) \approx \frac{\omega \omega_{\parallel}^2}{\tau_i^2(\omega)} \frac{1}{-i\Omega + R(\mathbf{q}, \omega) \tau_i(\omega)}. \quad (38)$$

Отметим, что при выполнении условия $\omega^2 \ll \omega_{\perp}^2$ фактор $R\tau_i$ имеет стандартный вид для квазитрехмерной системы и равен $v_{\parallel}^2 q_{\parallel}^2 \tau_i(\omega)/2 + v_{\perp}^2 q_{\perp}^2 \tau_i(\omega)$.

4.3. Определение коэффициента диффузии в режиме слабой локализации

Найдем главные значения тензора D в ситуации, когда выполнены условия (35). С учетом соотношений (13) и (16) имеем

$$\{D_{\parallel}, D_{\perp}\} = \{D_{\parallel}^{(1)}, D_{\perp}^{(1)}\} - \{D_{\parallel}^{(2)}, D_{\perp}^{(2)}\}, \quad (39)$$

где

$$\{D_{\parallel}^{(1)}, D_{\perp}^{(1)}\} = \frac{1}{2\pi g(\omega)} \lim_{\Omega \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \{2v_{\parallel}^2 k_{\parallel}^2, \omega_{\perp}^4 b^2 \sin^2(k_{\perp} b)\} \bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}}^-(\omega + \Omega), \quad (40)$$

$$\{D_{\parallel}^{(2)}, D_{\perp}^{(2)}\} = \frac{1}{2\pi g(\omega)} \lim_{\Omega \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{q}} U(\mathbf{q}; \omega, \Omega) \sum_{\mathbf{k}} \{2v_{\parallel} v_{\parallel} k_{\parallel}^2, \omega_{\perp}^4 b^2 \sin^2(k_{\perp} b)\} \times \\ \times \bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}}^-(\omega + \Omega) \bar{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^-(\omega + \Omega). \quad (41)$$

Первое слагаемое (40) в (39) представляет собой коэффициент диффузии без учета процессов обратного когерентного рассеяния. Второе слагаемое (41) определяет изменение величины коэффициента диффузии из-за вклада от подобных специфических интерференционных процессов рассеяния вблизи дефектов. В решетках с сильноанизотропным межзатонным силовым взаимодействием суммирование по \mathbf{q} ограничено сверху двумя малыми величинами $q_{\parallel, \perp} \approx \pi/l_{\parallel, \perp}(\omega)$. При этом если $a \approx b$, то длины пробега $l_{\parallel, \perp} = \dot{v}_{\parallel, \perp} \tau_i(\omega)$. Если же параметры элементарной ячейки a и b сильно различаются, т. е. $a \ll b$, то может реализоваться ситуация, когда $q_{\perp} \approx \pi/b$.

Ограничимся далее статическим случаем, когда $\Omega \rightarrow 0$. Рассмотрим сначала область частот $0 < \omega^2 < 2\omega_{\perp}^2$, когда плотность состояний трехмерная (ей соответствует индекс «1»). С использованием (32), (38) и с учетом явного вида закона дисперсии (1') имеем

$$\{D_{\parallel}^{(1)}, D_{\perp}^{(1)}\}_1 \approx \frac{\omega_{\perp}^2 \tau_i(\omega)}{2\pi g(\omega)\omega\omega_{\parallel}^2} \left\{ 2\dot{v}_{\parallel}^2 G_{\parallel} \left(\frac{\omega^2}{\omega_{\perp}^2} \right), \dot{v}_{\perp}^2 G_{\perp} \left(\frac{\omega^2}{\omega_{\perp}^2} \right) \right\}, \quad (42)$$

где

$$G_{\parallel}(x) = (x-1) \arccos(1-x) + \sqrt{2x-x^2},$$

$$G_{\perp}(x) = \arccos(1-x) - (1-x)\sqrt{2x-x^2}.$$

В пределе $\omega \rightarrow 0$ с учетом определения $g(\omega \rightarrow 0)$ (3) и соотношений

$$\arccos x = \arcsin \sqrt{1-x^2}, \quad \arcsin x \simeq x + \frac{x^3}{6}, \quad |x| < 1$$

получаем для продольной компоненты коэффициента D обычное выражение вида

$$\{D_{\parallel}^{(1)}, D_{\perp}^{(1)}\}_1 \cong \tau_i(\omega) \{ \dot{v}_{\parallel}^2/2, \dot{v}_{\perp}^2 \}.$$

Что касается интерференционной поправки к $D_{\parallel}^{(1)}$, то, как показано в [11], она порядка величины

$$1 - \frac{3}{2\pi^2 g(\omega) \tau_i^2(\omega) \dot{v}_{\parallel}^3}.$$

В условиях трехмерного длинноволнового фононного спектра роль подобной поправки, вообще говоря, несущественная. Только при наличии в системе резонансно рассеивающих примесных центров и кроссового расщепления колебательной ветви, когда близкой к нулю оказывается групповая скорость, ситуация может быть другой. Этот случай подробно ранее рассмотрен нами в [12].

Определим коэффициент диффузии D в области частот $2\omega_{\perp}^2 \leq \omega^2 < \omega_{\parallel}^2$, в которой закон дисперсии колебательных мод является квазидвумерным (этой области соответствует индекс «2»). С этой целью, во-первых, в (40), переходя от суммирования к интегрированию, можно осуществить интегрирование по dk_{\parallel} через вычет и затем по dk_{\perp} непосредственно. Имеем

$$\{D_{\parallel}^{(1)}, D_{\perp}^{(1)}\}_2 \approx \frac{1}{2\pi g(\omega)} \frac{\tau_i(\omega)}{\omega\omega_{\parallel}} \{ 2\dot{v}_{\parallel}^2(\omega^2 - \omega_{\perp}^2), \omega_{\perp}^4 b^2 \}. \quad (43)$$

Перейдем к интерференционному слагаемому (39). После проведения вычислений, аналогичных описанным выше, получаем

$$\{D_{\parallel}^{(2)}, D_{\perp}^{(2)}\}_2 \approx \frac{1}{2\pi g(\omega)} \frac{\tau_i^3(\omega)}{2\omega^3\omega_{\parallel}^2} \sum_{\mathbf{q} \leq \mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\perp}} U(\mathbf{q}; \omega; 0) \{2\dot{v}_{\parallel}^2(\omega^2 - \omega_{\perp}^2), \omega_{\perp}^4 b^2\}.$$

Затем с учетом явного вида диффузионной вершины (38) находим

$$\{D_{\parallel}^{(2)}, D_{\perp}^{(2)}\}_2 \approx \frac{1}{2\pi g(\omega)\omega^2} \sum_{\mathbf{q} \leq \mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\perp}} \frac{1}{R(\mathbf{q}, \omega)} \{4\dot{v}_{\parallel}^2(\omega^2 - \omega_{\perp}^2), \omega_{\perp}^4 b^2\}. \quad (44)$$

Получим явное выражение для величины $\sum_{\mathbf{q}} R^{-1}$, фигурирующей в (44). Если $b \ll l_{\perp}$, то

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{q} \leq \mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\perp}} \frac{1}{R(\mathbf{q}, \omega)} &= \frac{a^2 b}{(2\pi)^2} \int_{-\pi/l_{\perp}}^{\pi/l_{\perp}} dq_{\perp} \int_0^{\pi/l_{\parallel}} dq_{\parallel}^2 \left[q_{\parallel}^2 \frac{\dot{v}_{\parallel}^2}{2} \left(1 - \frac{\omega_{\perp}^2}{\omega^2}\right) + \frac{\omega_{\perp}^4 \tau_i(\omega)}{2\omega^2} \sin^2 \frac{q_{\perp} b}{2} \right]^{-1} \approx \\ &\approx \frac{2a^2}{\pi^2} \left[\dot{v}_{\parallel}^2 \tau_i(\omega) \left(1 - \frac{\omega_{\perp}^2}{\omega^2}\right) \right]^{-1} \frac{b}{l_{\perp}} \ln \left(2\sqrt{2} \frac{l_{\perp}}{b} \frac{\omega}{\tau_i \omega_{\perp}^2} \right) \end{aligned} \quad (44')$$

(здесь и ниже $l_{\parallel} = l_{ph,\parallel}$, $l_{ph,\perp} = l_{\perp}$). Объединим слагаемые стандартного и интерференционного типов, (43) и (44). Учтем представление для $g(\omega)$ в форме (4). При этом учтем также, что $\tau_i^{-1}(\omega) = (\pi/2)\epsilon\epsilon^2\omega^2 g(\omega)$. В результате для промежуточной области частот получаем следующую формулу для тензора коэффициента диффузии:

$$\{D_{\parallel}, D_{\perp}\}_2 = \left\{ \frac{\dot{v}_{\parallel}^2 \tau_i(\omega)}{2} \left(1 - \frac{\omega_{\perp}^2}{\omega^2}\right), \frac{b^2 \omega_{\perp}^4 \tau_i(\omega)}{8\omega^2} \right\} F(\omega), \quad (45)$$

$$F(\omega) = 1 - \frac{2}{\pi} \epsilon\epsilon^2 \frac{\omega^2}{\omega_{\parallel}^2} \frac{1}{(1 - \omega_{\perp}^2/\omega^2)} \frac{b}{l_{\perp}} \ln \left(\sqrt{2\pi} \frac{l_{\perp}}{b} \epsilon\epsilon^2 \frac{\omega^4}{\omega_{\perp}^2 \omega_{\parallel}^2} \right) \quad (46)$$

(при $l_{\perp} \approx b$ соотношения (45), (46) также остаются справедливыми).

Прокомментируем полученные выражения для тензора коэффициента диффузии D . Из соотношений (45), (46) прямо следует, что в случае сильного недиагонального беспорядка, когда параметр $\epsilon\epsilon^2$ порядка нескольких десятых и больше, за счет интерференционного механизма значения коэффициента диффузии D могут существенно изменяться. Подчеркнем также, что формулы (43) и (45), (46) позволяют исследовать процессы слабой локализации в проблеме низкотемпературной теплопроводности.

С целью иллюстрации влияния специфических примесных интерференционных процессов на коэффициент диффузии в режиме слабой локализации мы выполнили численные расчеты факторов F (46). Рассмотрен был интервал частот, в котором частоты колебательных мод слабо зависят от поперечной составляющей квазиимпульса k_{\perp} . Предполагалось также, что $l_{ph,\perp} \approx b$. В расчетах варьировался параметр $\epsilon\epsilon^2$ от 0.25 до 1. Его величина определяется мерой беспорядка. Кроме того, варьировались значения параметра $\omega_{\perp}/\omega_{\parallel}$. Его величина зависит от соотношения между силовыми параметрами, характеризующими взаимодействие вдоль оси z и в плоскости xy . Результаты

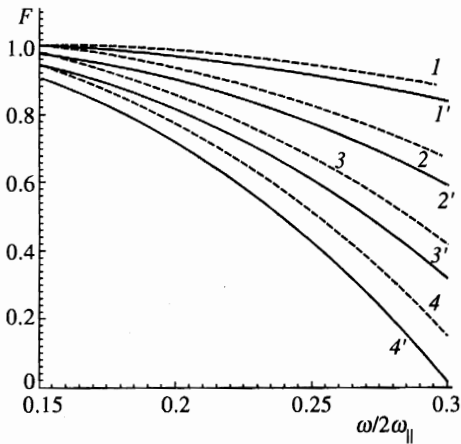


Рис. 2. Зависимость фактора F от $\omega/2\omega_{||}$. Кривые 1(1'), 2(2'), 3(3') и 4(4') отвечают значениям параметра $c\epsilon^2$ последовательно равным 0.25, 0.5, 0.75 и 1. В случае штриховых кривых, помеченных нештрихованными индексами, параметр $\omega_{\perp}/\omega_{||}$ равен 0.15. Для сплошных кривых со штрихованными индексами $\omega_{\perp}/\omega_{||} = 0.1$

расчетов представлены на рис. 2, откуда видно, что, во-первых, в случае сильного недиагонального беспорядка в областях, где система проявляет квазидвумерные свойства, значения парциальных коэффициентов диффузии могут весьма ощутимо изменяться. В принципе, при $c\epsilon^2 > 1$ в спектре $D(\omega)$ появляется щель. Во-вторых, при ослаблении взаимодействия между слоями перенормировка коэффициента диффузии усиливается.

5. СЛУЧАЙ НЕДИАГОНАЛЬНОГО БЕСПОРЯДКА

В этом разделе будем рассматривать только область промежуточных частот $2\omega_{\perp}^2 \leq \omega^2 < \omega_{||}^2$, в которой закон дисперсии обладает квазидвумерными свойствами. Как отмечалось, в слоистой решетке в случае недиагонального беспорядка в условиях резкого ослабления локальных силовых постоянных вблизи примесного центра возникает резонансного типа колебательная мода. При некотором критическом значении концентрации c_{cr} в колебательном спектре возникает щель. Проанализируем особенности поведения коэффициента диффузии при $c > c_{cr}$. Начнем с модели квазилокального возмущения.

5.1. Модель квазилокального возмущения в случае слабой связи

Предположим, что флуктуационное возмущение силовых параметров взаимодействия между отдельной примесью замещения и ее окружением распространяется на нулевую и первую координационные сферы. В рассматриваемом случае тетрагональной решетки дефект взаимодействует с четырьмя атомами (1–4) в плоскости слоя и двумя атомами (5, 6) в соседних слоях. Тогда на занятом примесью узле и соседних узлах 1–6 «примесной квазимолекулы» реализуются представления $3A_{1g} + 2E_u + B_{1g} + A_{2u}$. На самом примесном узле реализуются представления $A_{2u} + E_u$.

Унитарная матрица U для представлений $A_{2u} + E_u$ определяется как

$$U^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & w & w & w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & y & y \end{pmatrix}.$$

Выше принято, что $w = 1/\sqrt{4}$, $y = 1/\sqrt{2}$.

С использованием явного вида матрицы U можно определить матрицы V и G^0 в симметризованных координатах. Во-первых, имеем

$$V^+ = \begin{pmatrix} 4\tau_{\parallel}\gamma_{\parallel} + 2\tau_{\perp}\gamma_{\perp} + M_0\epsilon\omega^2 & -2\tau_{\parallel}\gamma_{\parallel} & 0 \\ -2\tau_{\parallel}\gamma_{\parallel} & \tau_{\parallel}\gamma_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & -\tau_{\perp}\gamma_{\perp} \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Здесь положено

$$\tau_{\parallel} = 1 - \frac{\gamma'_{\parallel}}{\gamma_{\parallel}}, \quad \tau_{\perp} = 1 - \frac{\gamma'_{\perp}}{\gamma_{\perp}}.$$

Имеем также

$$\bar{G}^0 = \begin{pmatrix} G_{00}^0 & 2G_{01}^0 & 0 \\ 2G_{01}^0 & G_{00}^0 + G_{12}^0 + 2G_{13}^0 & 0 \\ 0 & 0 & G_{00}^0 + G_{56}^0 \end{pmatrix}. \quad (48)$$

С целью дальнейшего упрощения пренебрежем взаимодействием между атомными плоскостями. При этом $\gamma_{\perp} = 0$. Воспользуемся также следующими соотношениями между гриновскими функциями в случае плоской решетки:

$$4\gamma_{\parallel}(G_{00}^0 - G_{01}^0) = 1 + M_0\omega^2 G_{00}^0,$$

$$4\gamma_{\parallel}G_{01}^0 - \gamma_{\parallel}(G_{00}^0 + G_{12}^0 + G_{13}^0) = M_0\omega^2 G_{01}^0.$$

При этом в области низких частот $\omega \sim 0.1\omega_{\parallel}$

$$\text{Re } G_{00}^0 \approx 2 \text{Re } G_{01}, \quad \text{Im } G_{00}^0 \approx \text{Im } G_{01}.$$

Подставляя (47), (48) в (26) и учитывая три последних соотношения для гриновских функций, получаем

$$t_{A_{2n}} = \frac{\hat{t}}{Z}, \quad \hat{t} = \begin{pmatrix} M_0\omega^2\epsilon + z\tau\gamma(1 - M_0\omega^2\epsilon G_{01}^0) & \tau\gamma\sqrt{z}(1 - M_0\omega^2\epsilon G_{01}^0) \\ \tau\gamma\sqrt{z}(1 - M_0\omega^2\epsilon G_{01}^0) & -\tau\gamma(1 - M_0\omega^2\epsilon G_{01}^0) \end{pmatrix} \quad (49)$$

$$Z = 1 - \tau_{\parallel} - M_0\epsilon\omega^2 \text{Re } G_{00}^0(1 - \tau_{\parallel}/2) - iM_0\epsilon\omega^2(1 - \tau_{\parallel}) \text{Im } G_{00}^0.$$

При этом для пространственно-временной фурье-компоненты t -матрицы (49) рассеяния в области низких частот и малых значений квазиимпульса имеем

$$t(\mathbf{k}, \omega) \approx -\frac{z\gamma'_{\parallel}\omega^2}{\omega_{\parallel}^2\gamma'_{\parallel}/|\epsilon|\gamma_{\parallel} - \omega^2 - i\omega^2\sqrt{z}\gamma'_{\parallel}/\gamma_{\parallel}} + O\left[(k_{\parallel}a)^4, \epsilon(k_{\parallel}a)^2\frac{\omega^2}{\omega_{\parallel}^2}\right]. \quad (50)$$

Здесь z — число ближайших соседей в плоскости xy .

Отсюда видно, что в случае слабой связи, когда $R = \gamma'_{\parallel}/\gamma_{\parallel} \rightarrow 0$, t -матрица имеет низкочастотный резонанс. Характерная частота

$$\omega_R = \sqrt{\frac{R}{|\epsilon|}}\omega_{\parallel}.$$

Из приведенной формулы для t -матрицы (50) видно также, что выполняется условие $\omega_R^2 \ll \omega_{\parallel}^2$ и одновременно затухание уровня $\Gamma_R = \sqrt{4R}\omega^2$ мало по сравнению с характерной резонансной частотой. Таким образом, резонансная мода является хорошо определенной.

Далее, что касается массового оператора, то напомним, что в соотношении общего вида для t -матрицы (26) фигурируют матрицы V и G . Мы ограничиваемся областью низких частот и малых значений квазиимпульса. В этом случае, если непосредственно перемножить указанные матрицы и перейти от координатного представления к импульсному с учетом (27), имеем (см. некоторые детали в [11])

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega, \mathbf{k}) &= c t(\omega, \mathbf{k}) [1 + \Delta_c(\omega, \mathbf{k})], \\ \Delta_c(\omega, \mathbf{k}) &= c t^2(\omega, \mathbf{k}) \left(-\frac{\partial G_0^0(\omega)}{\partial \omega^2} - G_0^{02}(\omega) \right) + \\ &+ c \sum_{\mathbf{s} \neq 0} \frac{G_s^{02}(\omega, \mathbf{k}) t^3(\omega, \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{s}} + G_s^{03}(\omega, \mathbf{k}) t^4(\omega, \mathbf{k}) \dots}{1 - G_s^{02}(\omega) t^2(\omega, \mathbf{k})} \dots \end{aligned} \quad (51)$$

Условие сходимости ряда снова задается соотношением вида (29) [19, 20].

В условиях, когда t -матрица резонансного вида, нужно явно рассматривать перенормировку фононного спектра и учитывать частотную зависимость фактора Q . Конфигурационно усредненная одночастичная $G_{\mathbf{k}}^+$ -функция \mathbf{k} -моды описывается соотношением в общей форме (19). Фактор Q вблизи и вдали от резонанса определен был выше (см. формулу (23)).

5.2. Случай кроссового расщепления колебательного спектра

В случае слабосвязанных примесных атомов в безразмерных переменных t -матрица определяется как

$$t(x) = -\frac{c\sqrt{z}\Gamma_R}{x_R - x - i\Gamma_R},$$

где положено

$$\Gamma_R = \sqrt{z}Rx, \quad x = \frac{\omega^2}{\omega_{\parallel}^2}, \quad x_R = \frac{\omega_R^2}{\omega_{\parallel}^2}.$$

Здесь ω_{\parallel} — максимальная частота колебаний в плоскости и $R = \gamma'_{\parallel}/\gamma_{\parallel} \ll 1$.

Будем считать, что концентрация дефектов относительно высокая и в некотором интервале частот вблизи ω_R выполняются следующие неравенства:

$$|x - x_R| > \Gamma_R, \quad x_{\mathbf{k}} > |\operatorname{Re} ct(x)|. \quad (52)$$

Тогда оказывается, что одночастичная гриновская функция $\bar{G}(\omega)$ в окрестности x_R имеет не один, а два полюса резонансного типа. При этом фактически происходит расщепление дисперсионной кривой фононов на частоте x_R и возникает запрещенная полоса в колебательном спектре [28, 29]. Принимая во внимание сказанное, функцию Грина можно представить в виде

$$\bar{G}_{1,2}^+(\mathbf{k}, x) = Q(x) [x - \tilde{x}_{1,2}(\mathbf{k}) + i\sqrt{x}/\tau_R]^{-1}.$$

Здесь фактор

$$Q(x) = \left(1 - \frac{\partial P}{\partial x}\right)^{-1} = \frac{(x_R - x)^2}{(x_R - x)^2 + cR x_R}$$

и через $\tilde{x}_{1,2}(\mathbf{k})$ обозначен перенормированный закон дисперсии:

$$\tilde{x}_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[x_R + cR + x_k \mp \sqrt{(x_k + x_R + cR)^2 - 4x_k x_R} \right]$$

($x(\mathbf{k}) = \omega_k^2/\omega_{\parallel}^2$). Он отвечает двум зонам, которые образуются в результате описанного выше кроссового расщепления. Верхняя граница первой зоны x_- близка к x_R , а ширина щели между зонами равна $(x_+ - x_- = cR$ (x_+ — нижняя граница второй зоны).

Заметим, что о существовании щели размера $\Delta = cR$ между двумя ветвями имеет смысл говорить, если она больше уширения. Иными словами, должны выполняться неравенства $\Delta > \Gamma$ или $cR > R x_R$. Основываясь на этих неравенствах, можно оценить значение параметра концентрации, при котором происходит кроссовое расщепление спектра. Имеем

$$c_{cr} \approx x_R = \omega_R^2/\omega_{\parallel}^2.$$

Еще отметим, что в рассматриваемом случае

$$\left| t^2(\omega) \frac{\partial \dot{G}_{00}(\omega)}{\partial \omega^2} \right| \approx \frac{c R^2 x}{(x - x_R)^2} \approx \frac{c R^2 x_R}{(c R)^2} = \frac{x_R}{c} = \frac{R}{\epsilon c}.$$

Поскольку $c > c_{cr}$, то выполняется условие (29) сходимости ряда (51).

Принимая во внимание сказанное, в условиях, когда одновременно есть хорошо определенное квазилокальное состояние и щель в колебательном спектре, можно показать, что компоненты коэффициента диффузии определяются посредством формулы вида

$$D_{\parallel, \perp}(\omega) = \dot{D}_{\parallel, \perp}(\omega) - \sum_q \dot{D}_{\parallel, \perp}(\omega) \left[-i\Omega + \dot{D}_{\parallel}^{(q)}(\omega) q_{\parallel}^2 + \dot{D}_{\perp}(\omega) \frac{2}{b^2} \sin^2 \left(q_{\perp} \frac{b}{2} \right) \right]^{-1}, \quad (53)$$

где

$$\dot{D}_{\parallel}(\omega) = \frac{v_{\parallel}^2 \tau_i(\omega)}{2}, \quad \dot{D}_{\perp}(\omega) = \frac{\omega_{\perp}^4 b^2 \tau_i(\omega)}{4\omega^2} Q^2(\omega). \quad (53')$$

Групповая скорость v_{\parallel} определяется соотношением

$$v_{\parallel}^2(x) = Q^2(x) \left(1 - \frac{P(x)}{x} - \frac{x_{\perp}}{x} \right). \quad (54)$$

При этом второе слагаемое (53') в (53) описывает влияние процессов обратного когерентного рассеяния.

Интегрирование по dq в (53) можно выполнить. В результате получаем

$$D_{\parallel, \perp}(\omega) = \dot{D}_{\parallel, \perp}(\omega) F(\omega). \quad (55)$$

Фактор F задается соотношением

$$F(\omega) \approx 1 - \frac{a^2}{\pi^2 g(\omega)} \frac{1}{v_{\parallel}^2 \tau_i'(\omega)} \ln \frac{\sqrt{2\pi} \omega}{\tau_i(\omega) \omega_{\perp}^2}. \quad (56)$$

С использованием соотношений (55), (56) рассмотрим теперь вопрос о порогах локализации. Пороговые частоты ω_{tl} находятся из решения уравнения

$$F(\omega_{tl}) = 0.$$

Определим фигурирующие в (56) время релаксации, плотность состояний и групповую скорость. С учетом определения t -матрицы легко находим, что

$$\text{Im } t(x) = - \frac{zcR^2 x^2 \sqrt{z}}{(x_R - x)^2 + zR^2 x^2}.$$

Так как мы рассматриваем ситуацию, когда выполнено условие (52), то приближенно

$$\text{Im } t(x) \approx - \frac{z^{3/2} c(Rx)^2}{(x_R - x)^2}.$$

Теперь непосредственно получаем, что

$$\tau_i^{-1} = - \frac{\text{Im } t(x)}{\sqrt{zx}} = zcR^2 \frac{x^{3/2}}{(x_R - x)^2}.$$

Эффективное время релаксации с учетом явного вида Q приближенно равно

$$\tau_i^{-1} = Q^{-1}(x) \tau_i(x) \approx \frac{(x_R - x)^2 + cR x_R}{(x_R - x)^2} \frac{(x_R - x)^2}{zcR^2 x^{3/2}} = \frac{(x_R - x)^2 + cR x_R}{zcR^2 x^{3/2}}. \quad (57)$$

Заметим, что в области проявления квазидвумерных свойств оказывается второстепенной квадратичная по c^2 поправка к времени жизни фонона (и мы ей пренебрегаем), в то время как в трехмерном случае ее роль существенна [11, 12]. Для плотности состояний в первой области квазидвумерия, исключая щель, приближенно при $\omega_{\perp}^2 < \omega_R^2 \ll 1$ имеем

$$\begin{aligned} \bar{g}(\omega^2) &\approx \frac{a^2 b}{2(2\pi)^2 v_{\parallel}^2} \int_{-\pi/b}^{\pi/b} dk_{\perp} \left\{ \int_0^{(k_{\parallel}^{min} v_{\parallel})^2} dk_{\parallel} v_{\parallel}^2 \left[k_{\parallel}^2 v_{\parallel}^2 - \left(\omega^2 - \Sigma_R(\omega) - 2\omega_{\perp}^2 \sin^2 \frac{k_{\perp} b}{2} \right) \right] + \right. \\ &+ \left. \int_{(k_{\parallel}^{max} v_{\parallel})^2}^{\omega^2} dk_{\parallel} v_{\parallel}^2 \left[k_{\parallel}^2 v_{\parallel}^2 - \left(\omega^2 - \Sigma_R(\omega) - 2\omega_{\perp}^2 \sin^2 \frac{k_{\perp} b}{2} \right) \right] \right\} \approx \\ &\approx \frac{1}{\pi \omega_{\parallel}^2} \left[\eta(\omega_R^2 - \omega^2) + \eta(\omega^2 - \omega_R^2 - cR\omega_{\parallel}^2) \right]. \end{aligned}$$

По определению, между k_{\parallel}^{max} и k_{\parallel}^{min} лежит область «аномальной» дисперсии. Ей отвечает запрещенная область частот для плотности колебательных состояний. Вне этой области в безразмерных переменных

$$\bar{g}(\sqrt{x}) = \frac{\sqrt{x}}{\pi}. \quad (58)$$

Наконец, нами рассматривается случай, когда $x_R > x_{\perp} = \omega_{\perp}^2 / \omega_{\parallel}^2$, т.е. принимается, что частота ω_R лежит в квазидвумерной области спектра. Поэтому групповая скорость определяется как

$$v_{\parallel}^2 \approx Q^2(x) \left(1 - \frac{P(x)}{x} \right). \tag{54'}$$

Воспользуемся соотношениями (57), (58) и (54') для τ_i , \tilde{g} и v_{\parallel} и упростим выражение (65) для фактора F в области частот вблизи пороговой частоты. Имеем

$$F(x) = 1 - \frac{z}{\pi} \frac{cR^2 x}{(x_R - x)^3} \frac{(x - x_R)^2 + cRx_0}{x_R - x + cR} \ln \frac{\sqrt{2}zcR^2 x^2}{x_{\perp}(x_R - x)^2}. \tag{59}$$

Опираясь на соотношение (59), в первую очередь покажем, что вдали от щели, т.е. при $x \ll x_R$ и $x \gg x_R + cR$, в рассматриваемом случае нет локализации. Действительно, если $x \ll x_R$, то второе слагаемое ΔF в выражении для фактора F равно

$$|\Delta F| = \left| \frac{zc^2 Rx}{\pi x_R^2} \ln \frac{zcR^2 x^2}{x_{\perp} x_R^2} \right| \ll 1.$$

Очевидным образом, ΔF стремится к нулю при $R = \gamma'_{\parallel} / \gamma_{\parallel} \ll 1$. Затем, если $x \gg x_0 + cR$, то

$$|\Delta F| = \left| \frac{zc^2 R}{\pi x_0} \ln \frac{zcR^2}{x_{\perp}} \right| \ll 1.$$

Снова $\Delta F \rightarrow 0$ при $R \ll 1$. Следовательно, в обоих случаях уравнение $F(\omega_{il}) = 0$ не удовлетворяется.

Проанализируем теперь поведение фактора F вблизи краев щели в спектре возбуждений. С этой целью еще раз преобразуем формулу (59). Положим

$$x_+ = x_R + cR + \delta_r,$$

где $\delta_r \ll cR$ — некоторый малый интервал частот справа от щели. Положим также

$$x_- = x_R - \delta_l.$$

Здесь $\delta_l \ll x_R$ — малый интервал частот слева от щели. После простых вычислений находим

$$F(x) = 1 - \begin{cases} \frac{zcR^2 x^2}{\pi \delta_l^3} \ln \frac{zx_-^2 cR}{x_{\perp} \delta_l^2} \gg 1, & x_- < x_R, \\ \frac{zx_+ x_R}{\pi c \delta_r} \ln \frac{x_+^2 z}{x_{\perp} c} > 1, & x_+ > x_R + cR. \end{cases} \tag{60}$$

Из полученных выражений для коэффициента диффузии D (53) и фактора F (60) непосредственно следует, что на левом и на правом краях щели возникают области локализованных состояний. При этом область локализованных состояний на левом краю щели существенно больше, чем на правом. Заметим еще, что в случае диагонального беспорядка локализационные эффекты в принципе могут проявляться в некоторой достаточно широкой области высоких частот. Если беспорядок недиагональный, то локализация имеет место вблизи краев низкочастотной щели в спектре возбуждений, как и в случае трехмерной решетки.

6. К ВОПРОСУ О ПРИРОДЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ПЛАТО В ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ СОЕДИНЕНИЙ BSCCO И BSYCO

В литературе обсуждается вопрос о необычной температурной зависимости теплопроводности монокристалла BSCCO слоистых систем ВТСП и его диэлектрического аналога BSYCO [30–32]. Принято считать, что в названных системах в широкой области температур от 10 до 100 К перенос тепла осуществляется преимущественно фононами. Весьма интересен здесь факт наличия плато в теплопроводности BSCCO и BSYCO в интервале температур $10 \text{ K} \leq T \leq 30 \text{ K}$ (подобное плато в зависимости $\kappa(T)$ отсутствует для трехмерных относительно фононных свойств сверхпроводников 1–2–3, причем в названном интервале температур κ монотонно возрастает [32]). Иными словами, теплопроводность имеет черты, характерные для теплопереноса в аморфных диэлектриках. Авторы экспериментальной работы [23] отмечают также сильную катионную разупорядоченность в реальных кристаллах из-за катионной нестехиометрии в слоях, содержащих висмут и стронций.

Вместе с тем хорошо известно, что висмутовые купраты $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{4+2n}$, где $n = 1, 2, 3$, обладают кристаллической решеткой с псевдотетрагональной симметрией $I4/mmm - D_{4h}^{17}$ и представляют собой блочные структуры. Они состоят из чередующихся слоев типа каменной соли — $\text{BiO}-\text{SrO}$ и дефектного по кислороду перовскита — $\text{Ca}-\text{CuO}_2$. Отличительная черта соединений на основе Bi — слабая связь $\text{Bi}-\text{O}$ слоев из-за относительно большого расстояния $\approx 30 \text{ \AA}$ между ними. Это свойство делает висмутовые соединения подобными слюде. В частности, авторы работ [33–35] рассмотрели их оптические спектры и пришли к заключению о квазидвумерном характере фононной подсистемы. В [36] на основе анализа спектров неупругого некогерентного рассеяния нейтронов, полученных методом изотопического контраста, сделан вывод о слабости взаимодействия между структурными блоками $\text{BiO}-\text{SrO}$ и $\text{Ca}-\text{CuO}_2$.

В разд. 4 и 5 установлено, что в области низких частот в условиях сильного беспорядка за счет специфических интерференционных процессов может иметь место существенная перенормировка коэффициента диффузии. Из-за подобной перенормировки коэффициента диффузии очевидным образом может возникать плато в низкотемпературной зависимости теплопроводности [12].

Таким образом, учитывая все сказанное, можно предположить, что в соединениях BSCCO и BSYCO в области низких температур фононная подсистема в теплопереносе обнаруживает двумерные свойства. Основываясь на результатах настоящей работы, можно качественно объяснить экспериментально наблюдаемое для нерегулярных монокристаллов BSCCO и BSYCO плато в температурной зависимости теплопроводности как результат действия специфических примесных интерференционных процессов когерентного обратного рассеяния. При этом вопрос относительно модели беспорядка требует специального рассмотрения.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы обсудили вопрос о слабой локализации акустических колебательных мод в неидеальной сильноанизотропной гармонической кристаллической решетке. Принималось, что слои решетки слабо связаны между собой и проявляют двумерные свойства. Опираясь на формулу Кубо для теплопроводности, для области температур, в которой

длины пробега фононов определяются упругим рассеянием на точечных дефектах, в режиме слабой локализации мы получили выражение для тензора коэффициента диффузии.

Проанализированы особенности частотного поведения коэффициента диффузии в частотном интервале, где закон дисперсии акустических фононных мод обладает двумерными свойствами. В первую очередь был рассмотрен случай диагонального беспорядка, при котором в области, где система проявляет квазидвумерные свойства, примесные моды квазилокального типа не возникают. Тем не менее в условиях сильного беспорядка, как оказалось, только за счет процессов обратного когерентного рассеяния может иметь место существенная перенормировка коэффициента диффузии D . При этом при ослаблении взаимодействия между слоями перенормировка коэффициента диффузии усиливается. При $c\epsilon^2 > 1$ в спектре $D(\omega)$ появляется щель, причем при частотах сравнимых с характерной частотой спектра.

В случае недиагонального беспорядка и слабой связи в колебательном спектре в области, где система проявляет квазидвумерные свойства, существуют квазилокальные моды. Иными словами, возникает система резонансно рассеивающих примесных центров. При этом мы показали, что если концентрация больше критической c_{cr} и в колебательном спектре возникает низкочастотная щель, то на левом и на правом края такой щели возникают области фононных локализованных состояний.

Мы признательны Н. М. Плакиде и Х. Шоберу (Н. Schober) за поддержку.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Выше обсуждались вопросы, относящиеся к теплопереносу, связанному со стандартными фононными модами. В случае недиагонального беспорядка, когда $\Delta\Phi \neq 0$, следует рассмотреть также член κ_2 . Принимая во внимание сказанное, рассмотрим выражение вида

$$Y = \sum_{\substack{\mu LL' \\ \mu_1 L_1 L'_1}} c_\mu c_{\mu_1} (\Delta\Phi\mathbf{R})_{\mu+L, \mu+L'} (\Delta\Phi\mathbf{R})_{\mu_1+L_1, \mu_1+L'_1} \text{Im } G_{\mu+L, \mu_1+L_1} \text{Im } G_{\mu_1+L'_1, \mu+L'} + \\ + \sum_{\substack{\mu LL' \\ ss'}} (c_\mu \Delta\Phi\mathbf{R})_{\mu+L, \mu+L'} (\Phi^0\mathbf{R})_{ss'} \text{Im } G_{\mu+L', s'} \text{Im } G_{s, \mu+L}. \quad (\text{П.1})$$

Простоты ради ограничимся однопримесным приближением. Будем полагать, что примесь находится в узле $\mu = \mathbf{d}$. Результирующее выражение умножим на концентрацию дефектов. При этом вместо (П.1) имеем

$$Y = Y_1 + Y_2 = c \sum_{L \dots L'_1} (\Delta\Phi\mathbf{R})_{LL'} (\Delta\Phi\mathbf{R})_{L_1 L'_1} \text{Im } \tilde{G}_{LL_1} \text{Im } \tilde{G}_{L'_1 L'} + \\ + c \sum_{\substack{ss' \\ LL'}} (\Delta\Phi\mathbf{R})_{\mathbf{d}+L, \mathbf{d}+L'} (\Phi^0\mathbf{R})_{ss'} \text{Im } \tilde{G}_{s, \mathbf{d}+L} \text{Im } \tilde{G}_{\mathbf{d}+L', s'}. \quad (\text{П.2})$$

Будем учитывать взаимодействие только между атомами в слоях и при этом ограничимся случаем, когда взаимодействуют только соседние атомы. Что касается первого члена

в (П.2), то можно непосредственно просуммировать по узлам, занимаемым атомами примесной квазимолекулы. Получаем

$$Y_1 = 8c(\tau_{\parallel}\gamma_{\parallel}^0 a)^2 \operatorname{Im} \tilde{G}_{dd} (\operatorname{Im} \tilde{G}_{d+a, d+a} - \operatorname{Im} \tilde{G}_{d+a, d-a}). \quad (\text{П.3})$$

Здесь a — постоянная решетки, $\mathbf{d} \pm \mathbf{a}$ — радиус-вектор одного из ближайших соседей примеси. Заметим, что явные выражения для функций \tilde{G}_{dd} и $\tilde{G}_{ds'}$ можно получить, опираясь на результаты, приведенные, например, в [37].

Выражение для слагаемого Y_2 также упрощается. С использованием явного вида матрицы $(\Delta\Phi R)_{d+L, d-L}$ можно выполнить суммирование по узлам $\mathbf{L}\mathbf{L}'$. Имеем

$$Y_2 = 4c\tau_{\parallel}\gamma_{\parallel}^0 a \sum_{ss'} (\Phi^0 \mathbf{R})_{ss'} \operatorname{Im} \tilde{G}_{ds'} (\operatorname{Im} \tilde{G}_{d+a, s} - \tilde{G}_{d-a, s}).$$

Так как $(\Phi^0 \mathbf{R})_{ss'} \operatorname{Im} \tilde{G}_{ds'} \sim (1 - \delta_{ss'})(-1)^{s'-s}$, имеем $Y_2 = 0$. Таким образом, вклад в теплопроводность, обозначенный как κ_2 , определяется слагаемым Y_1 (П.3).

В пределе низких температур только вклад от низких частот существен. В квазидвумерном случае при $\omega \rightarrow 0$ имеем $\operatorname{Im} \tilde{G}_{dd} \sim \text{const}$, $\operatorname{Im} [\tilde{G}_{d+a, d+a}(\omega) - \tilde{G}_{d+a, d-a}(\omega)] \sim \omega^2$, следовательно $Y_1 \sim \omega^2$. В результате находим, что

$$\kappa_2 \sim c a v_{\parallel} \tau_{\parallel}^2 \gamma_{\parallel} (T/\theta_{\parallel})^3$$

(θ_{\parallel} — температура Дебая плоской решетки). Заметим, что величина κ_2 мала по сравнению с

$$\kappa_1 \sim \frac{v_{\parallel} L}{2} \left(\frac{T}{\theta_{\parallel}} \right)^2,$$

которая определяется граничным рассеянием (L — характерный геометрический размер образца).

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

В общем случае выражение для массового оператора можно представить в форме

$$\Sigma(\omega) = \operatorname{Re} \Sigma(\omega) + i \operatorname{Im} \Sigma(\omega) = |\Sigma(\omega)| e^{i\Phi(\omega)},$$

где

$$|\Sigma(\omega)| = \sqrt{[\operatorname{Re} \Sigma(\omega)]^2 + [\operatorname{Im} \Sigma(\omega)]^2}, \quad \Phi(\omega) = \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{Im} \Sigma(\omega)}{\operatorname{Re} \Sigma(\omega)}. \quad (\text{П.4})$$

Отсюда для действительной части массового оператора имеем

$$P(\omega) = \Sigma_R(\omega) = |\Sigma(\omega)| \cos \Phi. \quad (\text{П.5})$$

Если частота ω близка к частоте фоновой моды с квазиимпульсом $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}$, то оператор P определяется формулой вида

$$P(\omega) = P(\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}) + (\omega^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{k}}^2) \frac{\partial P(\omega)}{\partial \omega^2}. \quad (\text{П.6})$$

С использованием соотношений (П.4) и (П.5) вместо (П.6) имеем

$$\begin{aligned}
 P(\omega) &= P(\tilde{\omega}_k) + (\omega^2 - \tilde{\omega}_k^2) \left[\frac{\partial |\Sigma(\omega)|}{\partial \omega^2} \cos \Phi - |\Sigma(\omega)| \frac{\partial \Phi}{\partial \omega^2} \sin \Phi \right] = \\
 &= P(\tilde{\omega}_k) + (\omega^2 - \tilde{\omega}_k^2) \left[\frac{\partial |\Sigma(\omega)|}{\partial \omega^2} \cos \Phi - \frac{\partial \Phi}{\partial \omega^2} \operatorname{Im} \Sigma(\omega) \right]. \quad (\text{П.7})
 \end{aligned}$$

Опираясь на соотношение (П.7) и определение одночастичной гриновской функции (15), можно непосредственно получить выражение для фактора Q в форме (21).

Литература

1. B. L. Altshuler, A. G. Aronov, A. G. Khmel'nitskii, and A. I. Larkin, *Quantum Theory of Solids*, ed. by I. M. Lifshits, Mir, Moscow (1992).
2. B. Kramer and A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1479 (1993).
3. Г. В. Олемский, УФН **165**, 152 (1996).
4. В. Л. Кузьмин, В. П. Романов, УФН **166**, 248 (1996).
5. M. P. van Albada, J. F. de Boer, and A. Lagendijk, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 3132 (1991).
6. S. Kawato, T. Hattori, T. Takemori, and H. Nakatsuka, *Phys. Rev. B* **49**, 90 (1994).
7. B. A. van Tiggelen, A. Lagendijk, M. P. van Albada, and A. Tip, *Phys. Rev. B* **45**, 12233 (1992).
8. B. A. van Tiggelen, A. Lagendijk, and A. Tip, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1284 (1993).
9. Qian-Jin Chu and Zhao-Qing Zhag, *Phys. Rev. B* **38**, 4906 (1988); *Phys. Rev. B* **72**, 234 (1992).
10. P. Allen and J. L. Feldman, *Phys. Rev. B* **48**, 12581 (1993).
11. A. P. Zhernov, E. I. Salamatov, and E. P. Chulkin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **165**, 355 (1991).
12. A. P. Zhernov, E. I. Salamatov, and E. P. Chulkin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **168**, 81 (1991).
13. Ping Sheng, Minyao Zhou, and Zhao-Qing Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 234 (1994).
14. E. Akkermans and R. Maynard, *Phys. Rev. B* **32**, 7860 (1985).
15. А. П. Жернов, Е. П. Чулкин, ФТТ **30**, 2302 (1994).
16. А. П. Жернов and E. P. Chulkin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **193**, 67 (1996).
17. А. П. Жернов, Е. П. Чулкин, ЖЭТФ **109**, 456 (1996).
18. М. А. Иванов, Ю. В. Скрипник, ФТТ **32**, 2965 (1990).
19. М. А. Иванов, Ю. В. Скрипник, УФЖ **35**, 1856 (1990).
20. М. А. Иванов, А. М. Косевич, Е. С. Сыркин, Ю. В. Скрипник, И. А. Господарев, С. Б. Феодосьев, ФНТ **19**, 434 (1993).
21. А. М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Вища школа, Харьков (1988).
22. H. Bettger, in *Principles of the Theory of Lattice Dynamics*, Akademie-Verlag, Berlin (1983).
23. Р. Берман, *Теплопроводность твердых тел*, Москва, Мир (1979).
24. Э. Тэйлор, *Теория рассеяния*, Москва, Мир (1979).
25. М. А. Иванов, ФТТ **12**, 1285 (1970).
26. М. А. Иванов, Ю. Г. Погорелов, ФНТ **5**, 1979 (1979).
27. А. П. Жернов, Т. А. Мамедов, ФММ **62**, 457 (1986).
28. М. А. Иванов, ФТТ **12**, 1895 (1970).
29. А. П. Жернов, Т. Н. Кулагина, ФТТ **17**, 1459 (1975).
30. P. V. Allen, X. Du, L. Mihaly, and L. Forgo, *Phys. Rev. B* **49**, 9073 (1994).
31. В. Б. Ефимов, Л. П. Межов-Деглин, Письма в ЖЭТФ **62**, 934 (1995).
32. А. Н. Талденков, А. В. Инюшкин, С. Ю. Шабанов, СФХТ **7**, 1502 (1994).
33. А. А. Буш, И. Н. Гончарук, Ю. Э. Китаев, ЖЭТФ **102**, 1587 (1992).
34. Yu. Kitaev, M. F. Limonov, and A. G. Panfilov, *Phys. Rev. B* **49**, 9933 (1994).
35. Ю. Э. Китаев, И. Ф. Лимонов, А. П. Миргородский, ФТТ **36**, 865 (1994).
36. П. П. Паршин, М. Г. Землянов, А. В. Иродова, ФТТ **32**, 2134 (1996).
37. А. П. Жернов, Г. Р. Аугст, ФТТ **9**, 2196 (1967).