Физика низких температур, 2005, т. 31, № 10, с. 1163–1170

Низкотемпературная теплопроводность и затухание звука в неупорядоченном квазиодномерном кристалле со слабо диспергирующей ветвью колебаний

Е.П. Чулкин

Физико-технический институт Уральского отделения РАН, г. Ижевск, 426001, Россия
E-mail: chulkin@otf.pti.udm.ru

Статья поступила в редакцию 9 февраля 2005 г.

Рассмотрен вопрос о влиянии слабой локализации низкоэнергетической акустической колебательной моды, закон дисперсии которой имеет большой плоский участок, на распространение звука и тепла в неидеальном кристалле цепочечного типа. Для области низких температур получены аналитические выражения для коэффициентов теплопроводности и затухания звука. Проанализирована роль специфических интерференционных процессов рассеяния фононов на флуктуациях фононной плотности вблизи дефектов в условиях слабого взаимодействия между цепочками. Показано, что в области низких частот, где закон дисперсии рассматриваемой колебательной моды проявляет квазиодномерные свойства, перенормировка коэффициентов теплопроводности и затухания звука может быть выявлена экспериментально при атомной концентрации дефектов $c \geq 5\%$. Обсуждается нестандартная температурная зависимость скорости звука.

Розглянуто питання про вплив слабкої локалізації низькоенергетичної акустичної коливальної моди, закон дисперсії якої має велику плоску ділянку, на поширення звуку і тепла в неідеальному кристалі ланцюжкового типу. Для області низьких температур отримано аналітичні вираження для коефіцієнтів теплопровідності та загасання звуку. Проаналізовано роль специфічних інтерференційних процесів розсіювання фононів на флуктуаціях фононної щільності поблизу дефектів в умовах слабкої взаємодії між ланцюжками. Показано, що в області низьких частот, де закон дисперсії розглянутої коливальної моди виявляє квазіодновимірні властивості, перенормування коефіцієнтів теплопровідності та загасання звуку може бути виявлено експериментально при атомній концентрації дефектів $c \geq 5\%$. Обговорюється нестандартна температурна залежність швидкості звуку.

PACS: **63.50.+x**, **66.70.+f**

1. Введение

В последнее время значительное внимание исследователей привлекают системы с пониженной размерностью. В работах [1–3] исследована возможность слабой локализации акустических фононных мод в неидеальной кристаллической решетке цепочечного типа и ее влияние на низкотемпературные решеточные коэффициенты теплопроводности и затухания звука. Конкретно рассмотрены акустические моды с векторами смещений, ориентированными параллельно и перпендикулярно слабосвязанным цепочкам. Колебательные моды первого типа — это продольно поляризованные возбуждения, а моды второго типа — это так называемые изгибные возбуждения [4–6]. Такие моды обнаружены в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов в квазиодномерных монокристаллах $(\mathrm{TaSe}_4)_2\mathrm{I}$ и $(\mathrm{Ta}_{1-x}\mathrm{Nb}_x\mathrm{Se}_4)_2\mathrm{I}$ [7,8]. Данные кристаллы характеризуются заметным ангармонизмом колебаний атомов в направлении, перпендикулярном цепочкам, при температуре $T \leq 1$ K.

В этих же кристаллах была обнаружена аномальная низкоэнергетическая акустическая ветвь в направлении $(\zeta,\zeta,0)$ и поляризованная вдоль направления цепочек. Она очень быстро уплощается с ростом волнового вектора **k** и остается в плоском режиме в большей части зоны Бриллюэна с характерной частотой ν_0. Следует подчеркнуть, что плоский режим дисперсионной кривой для акустических поперечных фононов в большей части зоны Бриллюэна не чувствителен к температурному воздействию и сохраняется от самых низких температур ($T \sim 1$ K) вплоть до комнатных. Наличие такой аномальной колебательной моды существенно влияет на распространение тепла и звука в данных соединениях [9,10]. Отметим, что природа плоскодисперсионной моды пока точно не установлена. Возможно, она имеет просто гибридизационный характер (оптические ветви, соответствующие межцепочечному взаимодействию и поляризованные вдоль оси z, являются аномально низкими).

Необычное поведение закона дисперсии данных соединений отражает тот факт, что начиная с некоторой характерной частоты ν_0 колебания цепочек оказываются независимыми. Однако наличие слабого ангармонического взаимодействия между цепочками при этом остается принципиальным. Из-за большого фазового объема одномерного динамического поведения становятся важными локализационные эффекты (многократная интерференция на каждой цепочке), которые присущи низкоразмерным системам [1–3,11,12]. В трехмерной системе они имели бы место лишь при достаточно сильном беспорядке и анализировались в [13–16].

Цель работы — исследование вклада локализационных поправок в теплопроводность и затухание звука от акустической низкоэнергетической дисперсионной кривой с большим плоским участком. Что касается модели беспорядка, то ограничимся случаем диагонального беспорядка. Предполагается, что колебательные возбуждения упруго рассеиваются на дефектах точечного типа, а также друг на друге вследствие ангармонизма. Причем ангармоническое затухание считается много меньше их примесного затухания.

2. Постановка задачи

Рассмотрим кристалл с изолированными примесными атомами. Опишем его динамические свойства стандартным гамильтонианом с учетом вкладов ангармонизма третьего и четвертого порядков:

$$H = H_0 + H_{\text{imp}} + H_{\text{int}} = H' + H_{\text{int}}, \tag{1}$$

где

$$H_0 = \frac{1}{2M_0}\sum_{n,\alpha}(p_n^\alpha)^2 + \frac{1}{2}\sum_{\substack{n,n'\\ \alpha,\beta}}\Phi^{(0)\alpha\beta}_{n,n'}u_n^\alpha u_{n'}^\beta,$$

$$H_{\text{imp}} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{M} - \frac{1}{M_0}\right)\sum_{n,\alpha}c_n(p_n^\alpha)^2 + \frac{1}{2}\sum_{\substack{n,n'\\ \alpha,\beta}}\Delta\Phi^{\alpha\beta}_{nn'}u_n^\alpha u_{n'}^\beta,$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{6}\sum_{\substack{n,n',n''\\ \alpha,\beta,\gamma}}\Phi^{\alpha\beta\gamma}_{n,n',n''}u_n^\alpha u_{n'}^\beta u_{n''}^\gamma + $$

$$+\frac{1}{24}\sum_{\substack{n,n',n'',n'''\\ \alpha,\beta,\gamma,\delta}}\Phi^{\alpha\beta\gamma\delta}_{n,n',n'',n'''}u_n^\alpha u_{n'}^\beta u_{n''}^\gamma u_{n'''}^\delta,$$

$$\Delta\Phi^{\alpha\beta}_{nn'} = \Phi^{\alpha\beta}_{nn'} - \Phi^{(0)\alpha\beta}_{nn'}.$$

Здесь H_0 — гамильтониан невозмущенной гармонической атомной решетки; H_{imp} — возмущение, обусловленное примесями в системе; H' — гамильтониан гармонической неидеальной решетки; H_{int} описывает динамическое ангармоническое межионное взаимодействие. Как обычно, величины u_n^α и p_n^α — декартовы компоненты операторов смещения и импульса n-атома, M и M_0 — массы атомов соответственно примесного и идеальной решетки (предполагается, что примесь легкая, т.е. $M < M_0$), $\Phi_{nn'}$, $\Phi_{nn'n''}$ и $\Phi_{nn'n''n'''}$ — элементы матриц силовых параметров второго, третьего и четвертого порядков. Индексом «0» обозначены параметры регулярной системы. Фактор c_n равен нулю, если в узле n находится атом матрицы, и равен единице, если в этом узле — точечный дефект. Конфигурационное среднее $\langle c_n\rangle_n$ равно концентрации примесей c. Для простоты в дальнейшем предполагаем, что матрицы силовых параметров диагональны по декартовым индексам. Для сокращения записи совокупность узельного (n) и декартова (α) индексов обозначим n. При проведении конкретных расчетов считаем беспорядок диагональным, т.е. примеси рассматриваем как изотопические дефекты. При этом не делаем различия между $\Phi_{nn'n''}$ и $\Phi^{(0)}_{nn'n''}$, а также между $\Phi_{nn'n''n'''}$ и $\Phi^{(0)}_{nn'n''n'''}$. Таким образом, рассматриваем только ангармонизм матрицы и считаем его слабым. Полученные результаты можно обобщить на случай недиагонального беспорядка, когда $\Delta\Phi_{nn'} \neq 0$.

3. Описание модели

Рассмотрим простую динамическую модель цепочечного кристалла, решетка которого обладает тетрагональной симметрией с параметрами элементарной ячейки a, b. При этом b — параметр, который характеризует расстояние между атомами в цепочке, a — параметр, определяющий расстояние между цепочками. Предположим, что эффективное силовое взаимодействие между атомами вдоль тетрагональной оси $z(\perp)$ существенно сильнее, чем взаимодействие в базисной плоскости $xy(\|)$.

Опираясь на экспериментальные данные по неупругому рассеянию нейтронов в работе [7] для поперечной плоскодисперсионной акустической моды, распространяющейся в базисной плоскости и поляризованной вдоль оси z, был предложен простейший модельный закон дисперсии вида

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k}_{\|}, \mathbf{k}_{\perp}) =$$
$$= \begin{cases} v_{\|}^2 k_{\|}^2 + v_{\perp}^2 k_{\perp}^2, & 0 \le k_{\|} \le k_{\|}^0, \\ \omega^2(\mathbf{k}_{\|}) + v_{\perp}^2 k_{\perp}^2, & k_{\|}^0 < k_{\|} < k_{\|}^B. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь $\omega(\mathbf{k}_{\|}) = \omega(k_x, k_y) \approx \omega_0$ — характерная частота, значение которой $\nu_0 = \omega_0/2\pi \approx 0{,}1$–$0{,}2$ ТГц варьируется в зависимости от направления распространения в базисной плоскости и почти не зависит от температуры; $v_{\|}$ — скорость звука в базисной плоскости ($v_{\|} \approx 500$ м/с) и $v_{\perp}$ — скорость, очень близкая к продольной скорости звука v_{33} вдоль направления цепочки ($v_{\perp} \approx v_{33} = 4260$ м/с). Волновой вектор $k_{\|}^0 = \eta k_{\|}^B$ ($\eta \approx 0{,}3$) фиксирует переход от «распространяющегося» характера этой моды к «нераспространяющемуся» для волновых векторов $k_{\|} > k_{\|}^0$.

Определим функцию квадрата плотности фононных состояний в интервале частот $0 \le \omega^2 \le \omega_0^2$. Согласно (2), имеем

$$g(\omega^2) = \frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega^2 - \omega^2(\mathbf{k})) = \frac{a^2 b \omega}{4\pi^2 v_{\|}^2 v_{\perp}}, \quad (3)$$

т.е. зависимость имеет квазитрехмерный характер. В квазиодномерной области спектра $\omega_0^2 < \omega^2 \le \omega_{\max}^2$ плотность состояний выражается формулой

$$g(\omega) = 2\omega g(\omega^2) = \frac{\sqrt{2}}{\pi \omega_{\perp}} \frac{1}{\sqrt{1 - (\omega_0/\omega)^2}}. \quad (4)$$

Таким образом, в рассмотренном интервале частот функция плотности состояний поперечной плоскодисперсионной моды $g(\omega)$ слабо зависит от частоты. При $\omega_0^2 << \omega^2$ она совпадает с асимптотическим значением функции плотности состояний продольных мод [1].

Отметим, что посредством соотношений (3) и (4) функция $g(\omega)$ определена во всем интервале низких и промежуточных частот.

4. Затухание низкочастотного звука

Распространение звука зависит от упругости кристаллической решетки. Его затухание определяется мнимой частью поляризационного оператора одночастичной решеточной гриновской функции. Введем в рассмотрение одночастичную запаздывающую гриновскую функцию G^+ [17], собранную на операторах динамических атомных смещений u_n:

$$G_{nn'}^+(t - t') = -i\theta(t - t')\langle [u_n(t), u_{n'}(t')] \rangle. \quad (5)$$

Символ $\langle \rangle$ означает статистическое усреднение с гамильтонианом H'. В импульсном представлении усредненная по примесным конфигурациям функция Грина моды j-й поляризации определяется выражением

$$(\tilde{G}_j^+)^{-1}(\mathbf{k},\omega) = (\overline{G}_j^+)^{-1}(\mathbf{k},\omega) - \Pi^j(\mathbf{k},\omega). \quad (6)$$

Здесь $\overline{G}_j^+(\mathbf{k},\omega)$ — конфигурационно усредненная запаздывающая одночастичная функция Грина, отвечающая полному гармоническому гамильтониану H'; $\Pi^j(\mathbf{k},\omega)$ — поляризационный оператор. При этом

$$\overline{G}_j^+(\mathbf{k},\omega) = \left(\omega^2 - \omega_j^2(\mathbf{k}) - i\frac{\omega}{\tau_i^j(\omega)} \right)^{-1}, \quad (7)$$

где время жизни для упругих процессов

$$\tau_i^j(\omega) = \left[\frac{\pi}{2} c\varepsilon^2 \omega^2 g_j(\omega) \right]^{-1}; \quad (8)$$

$g_j(\omega)$ — спектральная парциальная функция плотности состояний колебательной моды j-й поляризации; $\varepsilon = (M_0 - M)/M_0$; c — концентрация изотопических дефектов ($c << 1$). Величина параметра $c\varepsilon^2$ определяет меру беспорядка.

Для определения зависящей от температуры части коэффициента затухания низкочастотного звука необходимо с учетом ангармонического взаимодействия фононов найти мнимую часть поляризационного оператора Π^j одночастичной решеточной функции Грина. Можно показать, что в приближении кубического ангармонизма (см. [2,19])

$$\operatorname{Im}\Pi^j = \operatorname{Im}\Pi_1^j + \operatorname{Im}\Pi_2^j, \quad (9)$$

где

$$\operatorname{Im}\Pi_1^j(\mathbf{k},\omega) = \frac{\omega}{T}\sum_{\mathbf{k}_1} \Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2},\mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}} \Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2},\mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}} \int_0^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} n(\omega_1)[n(\omega_1)+1] \operatorname{Re}\left[\overline{G}^+_{\mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2}}(\omega_1 - \omega) \overline{G}^-_{\mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}}(\omega_1) \right],$$

$$\operatorname{Im}\Pi_2^j(\mathbf{k},\omega)=\frac{\omega}{T}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}\Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2},\mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}}\Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2},\mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}}\int_0^\infty\frac{d\omega_1}{2\pi}n(\omega_1)[n(\omega_1)+1]\times$$

$$\times\operatorname{Re}\left[\overline{G}^{+}_{\mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2}}(\omega_1-\omega)\overline{G}^{-}_{\mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}}(\omega_1)U^j_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}(\omega,\omega_1)\overline{G}^{+}_{\mathbf{k}_2+\frac{\mathbf{k}}{2}}(\omega_1-\omega)\overline{G}^{-}_{\mathbf{k}_2-\frac{\mathbf{k}}{2}}(\omega_1)\right].$$

Здесь $n(\omega)$ — равновесная планковская функция распределения фононов, а диффузионная вершина $U^j_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}(\omega,\omega_1)=U^j(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2;\,\omega,\omega_1)=U^j(\mathbf{q};\omega,\omega_1)$ — сумма графиков «веерного» типа (см. ниже). Первое слагаемое в (9) описывает поправку к затуханию фононов из-за стандартного ангармонического взаимодействия между акустическими фононами в присутствии дефектов. Второе слагаемое появилось в результате учета взаимодействия акустической моды с двухфононными когерентными состояниями, которые определяют режим слабой локализации при выполнении условий

$$ql^j \ll 1,\quad \omega\tau_i^j \ll 1\,, \tag{10}$$

где $l^j=v^j\tau_i^j$ — длина пробега фонона j-й поляризации, ограниченная упругим рассеянием на примесях. При написании (9) мы выполнили первую итерацию в уравнении Бете—Солпитера для двухчастичной решеточной функции Грина, т.е. $\operatorname{Im}\Pi^j(\mathbf{k},\omega)$ посредством слагаемого $\operatorname{Im}\Pi_2^j(\mathbf{k},\omega)$ включает в себя только первую диффузионную поправку.

В работе [1] получены выражения для вершины U^j в случае продольных и изгибных мод колебаний. Вклады этих мод в вершину U^j при вычислениях считались независимыми. Опираясь на результаты работы [1], можно показать, что выражение для вершины U (индекс j в дальнейшем будем опускать) в области относительно низких частот, где колебательный спектр проявляет квазиодномерные свойства в случае пренебрежения поперечной дисперсией, имеет вид

$$U(\mathbf{q};\omega_1,\omega)=\frac{2\omega_1^2}{\pi\tau_i^2(\omega_1)g(\omega_1)}\,\frac{1}{D_\perp^0q_\perp^2-i\omega+\dfrac{1}{\tau_N(\omega_1)}}\,. \tag{11}$$

Здесь $D_\perp^0=v_\perp^2(\omega_1)\tau_i(\omega_1)$, $v_\perp^2=\overset{\circ}{v}{}_\perp^2(1-\omega_0^2/\omega_1^2)$, $\omega_1>\omega_0$. В выражении (11) с помощью слагаемого $1/\tau_N$ мы учли делокализующую роль нормальных ангармонических процессов. При низких температурах рассеяние фононов происходит в основном на примесях: $\tau_i^{-1}(\omega_T)\gg\tau_N^{-1}(\omega_T)$ ($\omega_T=k_BT/\hbar$ — характерная частота фононов). Однако наличие фонон-фононного рассеяния остается по-прежнему важным. Учет слабого ангармонического затухания в диффузионной вершине может радикально видоизменить вклад локализационных поправок в затухание звука и теплопроводность. Зададим параметр ангармонического взаимодействия Φ^3 в стандартном приближении

$$\Phi^3(\mathbf{k},\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)=-i\tilde{\gamma}_3\omega(\mathbf{k})\,\omega(\mathbf{k}_1)\,\omega(\mathbf{k}_2)\,,$$

$$\tilde{\gamma}_3=\frac{\gamma_3}{(\gamma_{||}^2\gamma_\perp)^{1/2}}\,. \tag{12}$$

Здесь $\gamma_{||}$, $\gamma_\perp$ ($\gamma_\perp\gg\gamma_{||}$) и γ_3 — эффективные гармонические и ангармонические силовые постоянные. Заметим, что по порядку величины

$$\frac{\tilde{\gamma}_3^2\omega_{\max}}{\gamma_{||}^2\gamma_\perp}=\tilde{\gamma}_3^2\omega_{\max}\approx10\,\frac{\langle u^2\rangle}{a^2}=10\delta_A, \tag{13}$$

где $\langle u^2\rangle$ — средний квадрат атомных смещений, $\omega_{\max}\approx\omega_{3(\perp)}$ — максимальная частота в акустическом спектре, a — характерное межатомное расстояние, δ_A — параметр ангармоничности. Его величина может быть порядка 10^{-1}–10^{-2}, а не 10^{-3} (см., например, [10]).

Отдельные члены поляризационного оператора, фигурирующие в (9), с учетом (12) определяются следующим образом:

$$\operatorname{Im}\Pi_1(\mathbf{k},\omega)=2\tilde{\gamma}_3^2\omega^2(\mathbf{k})\frac{\omega}{T}\times$$

$$\times\sum_{\mathbf{k}_1}\omega^2(\mathbf{k}_1)n(\omega(\mathbf{k}_1))[n(\omega(\mathbf{k}_1))+1]\tau_i(\omega(\mathbf{k}_1))\,, \tag{14}$$

$$\operatorname{Im}\Pi_2(\mathbf{k},\omega)=\tilde{\gamma}_3^2\omega^2(\mathbf{k})\frac{\omega}{T}\times$$

$$\times\int_{\omega_0}^{\omega_{\max}}\frac{d\omega_1}{2\pi}g(\omega_1)n(\omega_1)[n(\omega_1)+1]\sum_{\mathbf{q}}U(\mathbf{q};\,\omega_1,\omega)\,. \tag{15}$$

При получении (14), (15) мы пренебрегли малыми слагаемыми $\mathbf{k}$ и $\mathbf{q}$ в аргументах функций Грина и ангармонической вершине Φ^3. После этого интегрирование по $d\omega_1$ и суммирование по $\mathbf{q}$ в (15) факторизовалось.

В области предельно низких температур сумма в (14) расходится. Она становится конечной, если учесть слабое ангармоническое затухание тепловых фононов и их рассеяние на границах образца. Механизм поглощения звука, описываемый выражением (14), существен в промежуточной области температур, где рассеяние тепловых фононов чувствительно к дефектам [18]. Выражение для $\mathrm{Im}\,\Pi_2$ справедливо в интервале частот $\omega_0 \le \omega < \omega_{\max}$, в котором закон дисперсии обнаруживает квазиодномерное поведение.

Рассмотрим звук, частота которого удовлетворяет условию $\omega\tau_i \ll 1$. Зависящую от температуры часть коэффициента затухания звука с учетом (9) представим в форме

$$\Gamma(\omega) = \Gamma_1(\omega) + \Gamma_2(\omega) = \frac{\mathrm{Im}\,\Pi_1(\omega(\mathbf{k})) + \mathrm{Im}\,\Pi_2(\omega(\mathbf{k}))}{2\omega(\mathbf{k})}, \tag{16}$$

полагая $\omega \approx \omega(\mathbf{k})$. Рассмотрим ситуацию, когда в неидеальном кристалле можно пренебречь стандартным ангармоническим взаимодействием тепловых фононов. Выясним, при каком условии это возможно. Если провести вычисления для $\mathrm{Im}\,\Pi_1$, используя пространственные фурье-компоненты функций Грина идеальной решетки, то для затухания фононов τ_N^{-1} вследствие N-процессов в нулевом по ангармоническому взаимодействию фононов приближению получим

$$\tau_N^{-1} = \tilde{\gamma}_3^2\omega_\perp\omega^2(\mathbf{k})\frac{\omega_0^2}{\omega_\perp^3}\exp\left(-\hbar\omega_0/k_BT\right) = $$

$$= \frac{\gamma_G^2(T)h}{M_0\omega_\perp a^2}\omega^2(\mathbf{k})\frac{\omega_0^2}{\omega_\perp^3}\exp\left(-\hbar\omega_0/k_BT\right), \tag{17}$$

$\gamma_G(T)$ — параметр Грюнайзена, M_0 — масса атома. Тогда с учетом (8) неравенство $\tau_i^{-1} \gg \tau_N^{-1}$ выполняется, если

$$c\varepsilon^2 \gg \gamma_G^2(T)\frac{\hbar\omega_\perp}{M_0 v^2}\frac{\omega_0^2}{\omega_\perp^2}\exp\left(-\hbar\omega_0/k_BT\right), \tag{18}$$

v — средняя скорость звука.

Отметим, что параметр Грюнайзена при низких температурах для рассматриваемой колебательной моды весьма существенно зависит от температуры и возрастает как $\gamma_G(T) \sim T^{-2}$ при уменьшении температуры. Он оценивается величиной порядка 10^2 при $T = 1$ К [9,10].

Типичный эксперимент по поглощению звука проводится на частотах мегагерцового диапазона. Принимая во внимание (17) и используя экспериментальные данные работ [7–10] для соединения $(\mathrm{Ta}_{1-x}\mathrm{Nb}_x\mathrm{Se}_4)_2\mathrm{I}$ ($M_0 \approx 10^{-25}$ кг, $\omega_\perp/2\pi \approx 10^{12}$ Гц, $a \approx 10$ Å, $T = 4$ К, $\gamma_G \approx 20$, $\omega_0/2\pi \approx 10^{11}$ Гц), получаем

$$\frac{\tau_N^{-1}}{\omega} \approx 10^{-2}\frac{\omega}{\omega_\perp}, \tag{19}$$

т.е. $\omega\tau_N \gg 1$. Это неравенство демонстрирует слабую зависимость диффузионной вершины (11) от τ_N^{-1}. Оценим, насколько реалистичен вклад эффекта слабой локализации в затухание звука. Сопоставим Γ_1 и Γ_2. Опуская промежуточные вычисления, в приближении доминирующих фононов из (14) и (15) с учетом (11), (16), (19) имеем

$$\frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} = \frac{1}{8}\sqrt{\frac{1}{2\tau_i\omega}}. \tag{20}$$

Приведем численную оценку выражения (20) для $T = 4$ К. При $c\varepsilon^2 \approx 10^{-2}$, $\omega/2\pi = 50$ МГц получаем $\Gamma_1/\Gamma_2 \approx 0{,}16$. Можно сделать вывод, что вклад эффекта слабой локализации плоскодисперсионной акустической колебательной моды в коэффициент затухания звука в низкотемпературной области становится заметным при атомной концентрации дефектов $c \ge 5\%$. Обратим внимание на то, что механизм затухания для Γ_2 экспериментально можно идентифицировать по частотной зависимости $\Gamma_2 \sim \omega^{3/2}$.

5. Зависимость скорости ультразвука от температуры

Другой характеристикой, связанной с распространением звука, является его скорость. Ее температурная зависимость определяется действительной частью поляризационного оператора, отвечающего динамическому ангармоническому межионному взаимодействию четвертого порядка (второе слагаемое в гамильтониане H_{int}). В первом порядке ангармонической теории возмущений с учетом примесного рассеяния [20–22] поляризационный оператор Π^4, отвечающий четырехфононным процессам взаимодействия, определяется выражением

$$\Pi^4 = -\frac{i}{4}\sum_{\mathbf{k}_1}\Phi^4_{\mathbf{k},-\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_1,-\mathbf{k}} \times$$

$$\times\int_0^\infty \frac{d\omega_1}{2\pi}\,\mathrm{cth}\,\frac{\omega_1}{2T}\left[\overline{G}^{\,+}(\mathbf{k}_1,\omega_1) - \overline{G}^{\,-}(\mathbf{k}_1,\omega_1)\right]. \tag{21}$$

Ангармоническую вершину Φ^4 зададим в стандартном приближении

$$\Phi^{\mathbf{4}}_{\mathbf{k},-\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_1,-\mathbf{k}} = \tilde{\gamma}_4\omega^2(\mathbf{k})\omega^2(\mathbf{k}_1);\ \tilde{\gamma}_4 = \frac{\gamma_4}{\gamma_2^2}, \tag{22}$$

где γ_4 — эффективная ангармоническая силовая постоянная четвертого порядка. С учетом (7) и (22) после ряда преобразований из (21) получаем

$$\Pi^4(\omega,\mathbf{k}) = \frac{\tilde{\gamma}_4}{8}\omega^2(\mathbf{k}) \times$$

$$\times \int_0^{\omega_{\max}} d\omega(\mathbf{k}_1) g(\omega(\mathbf{k}_1))\omega(\mathbf{k}_1)\,\mathrm{cth}\,\frac{\omega(\mathbf{k}_1)}{2T} = \omega^2(\mathbf{k})\Delta(T). \tag{23}$$

В эксперименте обычно измеряют температурную зависимость относительного изменения скорости ультразвуковой волны

$$\frac{v(T) - v(T_0 = 0)}{v(T_0 = 0)} = \frac{\Delta v(T)}{v}.$$

В низшем порядке теории возмущений по ангармоническому взаимодействию Φ^4 величина $\Delta v/v$ в рамках модельного закона дисперсии (2) определяется соотношением

$$\frac{\Delta v}{v} = \frac{\Delta v_\perp}{v_\perp} = \frac{\Delta v_{||}}{v_{||}} = \frac{d\Delta(T)}{dT}T =$$

$$= -\frac{Th}{8Mv^2}\left\{\gamma_G^2(T)C(T) - U(T)\left|\frac{\gamma_G^2(T)}{dT}\right|\right\}. \tag{24}$$

Здесь

$$C(T) = \frac{1}{T^2}\int_0^{\omega_{\max}} d\omega\, g(\omega)\,\omega^2 n(\omega)[n(\omega) + 1],$$

$$U(T) = \frac{1}{2}\int_0^{\omega_{\max}} d\omega\, g(\omega)\,\omega\,\mathrm{cth}\,\frac{\omega}{2T},$$

$$|\tilde{\gamma}_4(T)|\omega_{\max} \approx \frac{\gamma_G^2(T)h}{M\omega_{\max}a^2}.$$

Согласно (24), суммарная перенормировка скорости звука определяется двумя слагаемыми. При рассмотрении области низких температур в выражении (24) существенным оказывается поведение второго слагаемого. Оно приводит к росту $\Delta v/v$ при увеличении T. Однако при некоторой температуре его роль становится второстепенной (так как $\gamma_G(T) \approx \mathrm{const}$) и изменение $\Delta v/v$ будет определяться главным образом первым слагаемым в (24). Результаты экспериментального исследования перенормировки скорости звука в квазиодномерных системах отражены в работе [10]. Они свидетельствуют о существовании максимума в зависимости $\Delta v/v$ от температуры для системы $(Ta_{1-x}Nb_xSe_4)_2I$.

6. Решеточная теплопроводность

С помощью стандартной формулы Кубо определим статический тензор теплопроводности $\chi_{\alpha\alpha'}$ для интервала низких температур, в котором длина свободного пробега диктуется упругим рассеянием фононов дефектами. Случай слоистого кристалла подробно обсуждался в работах [11,12].

В случае цепочечного кристалла решетка обладает осевой симметрией и тензор $\chi_{\alpha\alpha'}$ имеет два главных значения, которые обозначаем $\chi_{||}$ и $\chi_\perp$. Они характеризуют теплопроводность соответственно в плоскости xy и вдоль оси z. Согласно [1], в одномодовом приближении имеем

$$\chi_{\alpha\alpha'} = \frac{1}{NT^2}\sum_{\mathbf{k}}\omega^2(\mathbf{k})n(\omega(\mathbf{k}))[n(\omega(\mathbf{k})) + 1]D_{\alpha\alpha'}(\omega(\mathbf{k})) \tag{25}$$

(N — число атомов решетки на единицу объема). В (25) через $D_{\alpha\alpha'}$ обозначен тензор коэффициента диффузии; α — декартов индекс. Величина $D_{\alpha\alpha'}(\omega_1)$ имеет вид

$$D_{\alpha\alpha'}(\omega_1) = \frac{4}{\pi g(\omega_1)} \times$$

$$\times \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} v_\alpha(\mathbf{k})v_{\alpha'}(\mathbf{k}')\omega(\mathbf{k})\omega(\mathbf{k}')G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}';\,\omega_1). \tag{26}$$

Напомним, что в выражениях (25), (26) величины $\omega(\mathbf{k})$ и $v = \partial\omega(\mathbf{k})/\partial\mathbf{k}$ — закон дисперсии и групповая скорость фононной моды с квазиимпульсом $\mathbf{k}$. Пространственная фурье-компонента двухчастичной гриновской функции G_2 выражается через одночастичные гриновские функции:

$$G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}';\omega_1) = \lim_{\omega\to 0}\langle G^+_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega)G^-_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega_1 - \omega)\rangle_c, \tag{27}$$

где символ $\langle\ldots\rangle_c$ означает усреднение по различным примесным конфигурациям. В общем случае (см. работы [1,20,23,24]) в импульсном представлении уравнение для G_2 представляется в форме уравнения Бете—Солпитера:

$$G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}';\omega_1) = \lim_{\omega\to 0}\{\tilde{G}^+_{\mathbf{k}}(\omega_1)\tilde{G}^-_{\mathbf{k}'}(\omega_1 - \omega) \times$$

$$\times [\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}_1} U(\mathbf{k},\mathbf{k}_1;\,\omega_1,\omega)G_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}';\,\omega_1,\omega)]\}. \tag{28}$$

Мы рассматриваем роль процессов обратного когерентного рассеяния (некоторых специфических интерференционных процессов, возникающих при рассеянии фононов на флуктуациях фононной плотности состояний вблизи дефектов). Как отмечено выше, они определяют режим слабой локализации, реализующийся при выполнении условий (10). В интересующем нас случае фигурирующая в (28) вершинная часть U определяется соотношением (11).

Определим главное значение тензора $D_\perp$ в ситуации, когда выполнены условия (10). Используя представление для гриновской функции (7) с учетом соотношений (26) и (28), имеем

$$D_\perp(\omega_1) = D_\perp^0(\omega_1)\left(1 - \frac{\tau_i^2(\omega_1)}{2\omega_1^2}\sum_{\mathbf{q}} U(\mathbf{q};\,\omega_1)\right). \quad (29)$$

После подстановки в (29) выражения для вершины (11), в котором учтено слабое ангармоническое взаимодействие тепловых фононов (N-процессы), получаем представление для $D_\perp$ в форме

$$D_\perp(\omega_1) = D_\perp^0(\omega_1)\left(1 - \frac{1}{8\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\tau_N}{\tau_i}}\right). \quad (30)$$

Подчеркнем, что отклонение $D_\perp(\omega_1)$ от $D_\perp^0(\omega_1)$ связано с влиянием процессов обратного когерентного рассеяния. Из рассмотрения выражения (30) непосредственно следует, что картина фононного транспорта существенно зависит от соотношения времен упругой и неупругой релаксаций. Представление для $D_\perp(\omega_1)$ в форме (30) справедливо в области температур, для которой выполняется условие (18), т.е. $\tau_i^{-1} >> \tau_N^{-1}$.

Оценим величину τ_N/τ_i для двух температур. Пусть параметр беспорядка $c\varepsilon^2 \approx 10^{-2}$. При $T = 1\,\text{К}$ $(\gamma_G \approx 10^2)$ получаем $\tau_N/\tau_i \approx 8$, а при $T = 4{,}2$ К $(\gamma_G \approx 20)$ эта величина порядка 10.

7. Заключение

В настоящей работе проанализировано влияние эффекта слабой локализации низкоэнергетической акустической колебательной моды с большим плоским участком на низкотемпературные решеточные коэффициенты теплопроводности и затухание ультразвука в неидеальной ангармонической сильно анизотропной кристаллической решетке цепочечного типа. Установлено, что при малой концентрации примесей наличие большого фазового объема квазиодномерного динамического поведения не приводит к существенным изменениям в распространении звука и тепла. Согласно полученным численным оценкам, в случае теплопроводности это связано с заметным ограничением процессов упругой релаксации процессами неупругой релаксации: при гелиевых температурах и атомной концентрации дефектов ($\sim 1\%$) не выполняется строго неравенство $\tau_i << \tau_N$.

Наиболее информативным явилось бы сопоставление с экспериментом качественных предсказаний теории — частотной зависимости коэффициента затухания звука $\Gamma_2 \sim \omega^{3/2}$, связанного с рассмотренным выше эффектом. Однако экспериментально такая частотная зависимость не наблюдалась, по-видимому, из-за недостаточной разупорядоченности реально существующих слабодопированных образцов. Для наблюдения данной частотной зависимости пригодны образцы $(\mathrm{Ta}_{1-x}\mathrm{Nb}_x\mathrm{Se}_4)_2\mathrm{I}$ с $x \ge 0{,}2$, если используемая в экспериментах частота ультразвука $\omega/2\pi \le 10$ МГц. Поведение $\Delta v(T)/v$ в широкой температурной области качественно можно объяснить влиянием ангармонических процессов четвертого порядка.

Таким образом, вклад локализационных эффектов в распространение звука и тепла в системах $(\mathrm{Ta}_{1-x}\mathrm{Nb}_x\mathrm{Se}_4)_2\mathrm{I}$ экспериментально можно обнаружить при атомных концентрациях дефектов $c \ge 5\%$.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты 03-02-16233, 04-02-16680).

1. А.П. Жернов, Е.П. Чулкин, *ЖЭТФ* **117**, 350 (2000).
2. Е.П. Чулкин, А.П. Жернов, Т.Н. Кулагина, *ФНТ* **26**, 173 (2000).
3. Е.П. Чулкин, *ЖЭТФ* **122**, 1022 (2002).
4. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **22**, 475 (1952).
5. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Вища школа, Харьков (1988).
6. Е.Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, *ЖЭТФ* **61**, 2429 (1971).
7. J.E. Lorenzo, R. Currat, A.J. Dianoux, P. Monceau, and F. Levy, *Phys. Rev.* **B53**, 8316 (1996).
8. J.E. Lorenco, R. Currat, P. Monceau, B. Hennion, H. Berger, and F. Levy, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 5039 (1998).
9. R. Maynard, A. Smontara, and J.C. Lasjaunias, *Physica* **B263–264**, 678 (1999).
10. M. Saint-Paul, S. Holtmeier, P. Monceau, R. Currat, and F. Levy, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 2021 (1996).
11. А.П. Жернов, Е.П. Чулкин, *ЖЭТФ* **113**, 930 (1998).
12. А.П. Жернов, Е.П. Чулкин, *ФТТ* **40**, 132 (1998).
13. И.Я. Полищук, А.Л. Бурин, Л.А. Максимов, *Письма в ЖЭТФ* **51**, 644 (1990).
14. A.P. Zhernov, E.I. Salamatov, and E.P. Chulkin, *Phys. Status Solidi* **B165**, 355 (1991).
15. А.П. Жернов, Е.П. Чулкин, *ЖЭТФ* **109**, 602 (1996).
16. I.Y. Polishchuk, L.A. Maksimov, and A.L. Burin, *Phys. Rep.* **288**, 205 (1997).
17. Ю.М. Каган, *Материалы школы по теории дефектов в кристаллах*, Тбилиси (1969), т. 2, с. 93.
18. Р. Берман, *Теплопроводность твердых тел*, Мир, Москва (1979).
19. Е.П. Чулкин, А.П. Жернов, Т.Н. Кулагина, *ФНТ* **25**, 1218 (1999).
20. A.A. Maradudin and S. Califano, *Phys. Rev.* **B48**, 12628 (1993).
21. А.П. Жернов, Е.П. Чулкин, *ФТТ* **36**, 2302 (1994).
22. A.P. Zhernov and E.P. Chulkin, *Phys. Status Solidi* **B193**, 67 (1996)

23. E. Akkermans and R. Maynard, *Phys. Rev.* **B32**, 7850 (1985).
24. Qian-Jin Chu and Zhao-Qing Zhang, *Phys. Rev.* **B38**, 4906 (1988).

Low-temperature heat conduction and sound damping in a disordered quasi-one-dimensional crystal with a weakly dispersing oscillation branch

E.P. Chulkin

The effect of weak localization of the low-energy acoustic oscillation mode, the dispersion law of which has a large flat region, on sound and heat propagation in a chain-type nonideal crystal is considered. Analytical expressions of heat conductivity and sound damping coefficients for low temperature are derived. The role of specific interference processes of phonon scattering by phonon density fluctuations near defects is analyzed for the conditions of weak interchain interaction. It is shown that in a low-frequency region, where the dispersion law of the oscillation mode exhibits quasi-one-dimensional properties, the renormalization of the heat conductivity and sound damping coefficients may be revealed experimentally at atomic defect concentration $c \geq 5\%$. The nontypical temperature dependence of sound velocity is discussed.