Физика низких температур, 2006, т. 32, № 3, с. 360–370

Затухание ультразвука в цепочечном кристалле с резонансно-рассеивающими дефектами

Е.П. Чулкин

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

Статья поступила в редакцию 1 августа 2005 г., после переработки 4 октября 2005 г.

Исследована особенность частотного и низкотемпературного поведения решеточного коэффициента затухания ультразвука в цепочечном кристалле с резонансно-рассеивающими дефектами. Учтено влияние эффектов задержки и слабой локализации акустической колебательной моды, закон дисперсии которой имеет большой плоский участок. Определены параметры резонансного уровня, при которых процессы локализации проявляются слабо по сравнению с эффектом задержки. Обсуждается вопрос о возможном проявлении этих эффектов в экспериментах по поглощению ультразвука в квазиодномерных кристаллах $(Ta_{1-x}Nb_xSe_4)_2I$.

Досліджено особливість частотного й низькотемпературного поводження граткового коефіцієнта загасання ультразвуку у ланцюжковому кристалі з резонансно-розсіюючими дефектами. Враховано вплив ефектів затримки й слабкої локалізації акустичної коливальної моди, закон дисперсії якої має велику плоску ділянку. Визначено параметри резонансного рівня, при яких процеси локалізації проявляються слабко в порівнянні з ефектом затримки. Обговорюється питання про можливий прояв цих ефектів в експериментах по поглинанню ультразвуку у квазіодновимірних кристалах $(Ta_{1-x}Nb_xSe_4)_2I$.

PACS: **63.50.+x**

Ключевые слова: цепочечный кристалл, затухание ультразвука, резонансное рассеяние, эффект задержки

1. Введение

Первые работы по динамической теории неупорядоченных кристаллических решеток с пониженной размерностью и сильной анизотропией межатомного взаимодействия были выполнены в группах А.М. Косевича [1] и М.А. Иванова [2,3]. В этих и последующих работах (см., например, [4–9]) было обращено внимание на то, что в отличие от случая слабо анизотропных кристаллов в колебательном спектре низкоразмерных кристаллических решеток с диагональным беспорядком (т.е. с легкими или тяжелыми изотопическими примесями) условия образования локальных или квазилокальных мод существенно иные. Так, например, наличие достаточно тяжелой изотопической примеси не приводит к образованию хорошо определенного квазилокального уровня в области колебательного спектра, где решетка проявляет квазидвумерные или квазиодномерные динамические свойства. Вследствие этого в низкоразмерных решетках для фононных мод важными могут оказаться процессы обратного когерентного рассеяния в режиме слабой локализации [10—17].

С другой стороны, в действительности примесь иначе взаимодействует со своим окружением нежели атомы матрицы. Поэтому необходимо учитывать не только отличие массы атома примеси от массы атома матрицы, но и возмущение силовых параметров взаимодействия между отдельной примесью и ее окружением (недиагональный беспорядок). В ситуации резкого ослабления локальных силовых параметров для примесного атома в системах с пониженной размерностью стандартного типа квазилокальные моды могут возникать практически в любой области спектра [3–9,13]. Только в этом случае можно говорить о системе резонансно-рассеивающих примесных центров. Резонансное рассеяние характеризуется не только большим сечением рассеяния, но и большим временем задержки [18,19]. Поэтому вблизи квазилокального уровня существенно перенормируются групповая скорость и время упругого рассеяния фононной моды [20]. И как следствие этого может оказаться завуалированным эффект, связанный со слабой локализацией фононных мод. Применительно к звуковым волнам, распространяющимся в среде хаотично расположенных резонансно-рассеивающих примесных центров, эффект задержки звукового излучения проанализирован в [21], а применительно к фононным модам в слабоанизотропных кристаллах с тяжелыми изотопическими примесями в работе [22]. Было показано, что в условиях, когда отсутствует щель в колебательном спектре, процессы локализации проявляются слабо по сравнению с эффектом задержки [22]. Случай слоистого кристалла рассмотрен в [13].

Ниже обсуждается вопрос о влиянии слабой локализации низкоэнергетической колебательной моды, закон дисперсии которой имеет большой плоский участок, на низкотемпературное и частотное поведение решеточного коэффициента затухания звука в цепочечном кристалле с резонансно-рассеивающими дефектами.

Такая мода была обнаружена в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов в квазиодномерных монокристаллах $(TaSe_4)_2I$ и $(Ta_{1-x}Nb_xSe_4)_2I$ в направлении $(\zeta, \zeta, 0)$ и поляризованная вдоль направления цепочек [23–25]. Она очень быстро уплощается с ростом волнового вектора и остается в плоском режиме в большей части зоны Бриллюэна с характерной частотой ν_0. Плоский режим дисперсионной кривой для акустических фононов с поперечной поляризацией не чувствителен к температурному воздействию и сохраняется от самых низких температур ($T \sim 1$ К) вплоть до комнатных. 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. Поэтому из-за большого фазового объема квазиодномерного динамического поведения становятся важными локализационные эффекты (многократная интерференция на каждой цепочке), которые присущи низкоразмерным системам. В трехмерной системе они имели бы место лишь при достаточно сильном беспорядке [26–29].

Обратим внимание на теоретические работы [5–9], в которых методами атомной динамики и численного моделирования детально исследовалась структура колебательных спектров неупорядоченных линейных цепочек и слоистых кристаллов. Очень важным представляется вывод работы [7] о квазирасщеплении колебательных мод, поляризованных параллельно и перпендикулярно слоям в сильноанизотропном слоистом кристалле. По-видимому, это будет иметь место и для кристаллов цепочечного типа.

Отметим еще, что при анализе фононного спектра, который рассматривался во всей зоне Бриллюэна, в этих же кристаллах были обнаружены продольно поляризованные возбуждения (l-моды) и так называемые изгибные возбуждения (b-моды) [30,18]. Возможность локализации таких колебательных возбуждений в условиях диагонального беспорядка и ее влияние на решеточные коэффициенты низкотемпературной теплопроводности и затухания звука рассмотрены нами в работах [15–17].

Одним из обстоятельств, стимулирующих исследования структур цепочечного типа, является недавно открытая новая фаза углерода — карболайт [31]. Косвенным подтверждением квазиодномерной структуры карболайта может служить аномальное поведение его теплоемкости при низких температурах [32].

2. Постановка задачи и выбор модели

Рассмотрим кристалл с изолированными примесными атомами замещения. Будем описывать его динамические свойства стандартным гамильтонианом с учетом вкладов от ангармонизмов третьего и четвертого порядков.

$$H = H_0 + H_{\rm imp} + H_{\rm int} = H' + H_{\rm int}\,, \qquad (1)$$

где

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

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

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

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

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

Здесь H_0 — гамильтониан невозмущенной гармонической атомной решетки; $H_{\rm imp}$ — возмущение из-за примесей в этой системе; H' — гамильтониан гармонической неидеальной решетки; $H_{\rm int}$ 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 примесного атома и идеальной решетки (предполагается, что примесь тяжелая, 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» помечены параметры регулярной системы. Фактор c_n равен нулю, если в узле n находится атом матрицы, и единице, если в этом узле точечный дефект. Конфигурационное среднее $\langle c_n \rangle$ равно концентрации примесей c. Для простоты в дальнейшем предполагается, что матрицы силовых параметров диагональны по декартовым индексам. С целью сокращения записи совокупность узельного (n) и декартова (α) индексов обозначается как n. При проведении конкретных расчетов считается, что беспорядок является недиагональным, т.е. дефекты — это изолированные примесные атомы замещения. При этом мы 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, рассматривается только ангармонизм матрицы, и он считается слабым.

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, а a — параметр, определяющий расстояние между цепочками. Будем предполагать, 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 [23,24] для поперечной плоскодисперсионной акустической моды, распространяющейся в базисной плоскости и поляризованной вдоль оси z, был предложен простейший модельный закон дисперсии вида

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

Здесь $\omega(\mathbf{k}_{\|}) = \omega(k_x, k_y) \approx \omega_0$ — характерная частота, значение которой

$$\nu_0 = \frac{\omega_0}{2\pi} = k_{\|}^0 \frac{v_{\|}}{2\pi} = \eta k_{\|}^B \frac{v_{\|}}{2\pi} = \frac{\eta}{a}\sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \approx (0{,}1\text{–}0{,}2)\ \text{ТГц}$$

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 $k_{\|} > k_{\|}^0$. Значения величин сдвигового модуля упругости C_{44}, плотности ρ и параметра элементарной ячейки a приведены в работах [23,24].

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

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

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

$$g(\omega) = 2\omega g(\omega^2) = 2\omega \frac{a^2 b}{(2\pi)^3} 2 \int_{-\pi/a}^{\pi/a}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x dk_y \times$$

$$\times \int_0^{\pi/a} dk_{\perp} \delta(\omega^2 - \omega_0^2 - v_{\perp}^2 k_{\perp}^2) = \frac{1}{\omega_{\perp}} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\dfrac{\omega_0}{\omega}\right)^2}}. \tag{4}$$

Здесь $\omega_{\perp} = k_{\perp}^B v_{\perp} = \dfrac{\pi}{b}\sqrt{\dfrac{C_{33}}{\rho}}$. Используя данные работ [23,24], для модуля упругости C_{33} и параметра элементарной ячейки b вдоль оси z можно оценить частоту $\nu_{\perp} = \dfrac{\omega_{\perp}}{2\pi} \approx 1{,}7$ ТГц. Зная ν_0 и $\nu_{\perp}$, из условия нормировки спектральной плотности (3) и (4) оценим максимальную частоту $\nu_{\max} = \dfrac{\omega_{\max}}{2\pi}$. Имеем $\nu_{\max} \approx \sqrt{\nu_0^2 + \nu_{\perp}^2} \approx 1{,}71$ ТГц, т.е. $\omega_{\perp} \approx \omega_{\max}$.

Таким образом, в рассмотренном интервале частот функция плотности состояний поперечной плоскодисперсионной моды $g(\omega)$ слабо зависит от частоты. При $\omega_0^2 \ll \omega^2$ она совпадает с асимптотическим значением функции плотности состояний продольных мод [16].

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

3. Основные соотношения для массового оператора

Рассмотрим кристаллическую решетку цепочечного кристалла с примесными атомами замещения. Нас интересует качественная картина. Поэтому будем предполагать, что возмущение силовых параметров между отдельной примесью и ее окружением распространяется только на ближайшие координационные сферы. Концентрация дефектов c считается низкой. 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

$$\tilde{V}_{nn'} = \sum_{\mu} c_{\mu} V^{\mu}_{nn'}, \;\; V^{\mu}_{nn'} = \sum_{L,L'} \delta_{n,\mu+L_{\mu}} \delta_{n',\mu+L'_{\mu}} V_{LL'}, \tag{5}$$

$$V_{LL'} = M_0 \epsilon \omega^2 \delta_{LL'} + \Delta\Phi_{LL'}, \quad \epsilon = 1 - M/M_0. \tag{6}$$

В (5) 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 $\mu = d$ и по соседним с ним узлам.

Поскольку по условию концентрация дефектов c предполагается низкой (т.е. $c << 1$), то для определения массового оператора $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ удобно воспользоваться методом разложения по степеням концентрации, развитым в [33,34]. В импульсном представлении в условиях недиагонального беспорядка подобное разложение имеет вид [27]

$$\Sigma(\mathbf{k},\omega) = \sum_{L_{\mu} L_{\mu}'} \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{L}_{\mu}} \Bigg[c t^{\mu}_{L_{\mu} L_{\mu}'} \delta_{\mu\mu'} + c^2 \sum_{\mu\neq\mu'} \left(\frac{t^{\mu} G^{0\,\mu'}_{\mu} t^{\mu'} G^{0\,\mu}_{\mu'} t^{\mu}}{1 - G^{0\,\mu'}_{\mu} t^{\mu'} G^{0\,\mu}_{\mu'} t^{\mu'}} \right)_{L_{\mu} L_{\mu'}} \delta_{\mu\mu'} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{\mu} - \mathbf{R}_{\mu'})} + c^2 \sum_{\mu\neq\mu'} \left(\frac{t^{\mu} G^{0\,\mu'}_{\mu} t^{\mu'}}{1 - G^{0\,\mu}_{\mu'} t^{\mu} G^{0\,\mu'}_{\mu} t^{\mu'}} \right)_{L_{\mu} L_{\mu'}} \Bigg] \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{L}_{\mu'}}. \tag{7}$$

Фигурирующая в (7) t-матрица рассеяния на отдельной квазимолекуле определяется как

$$t^{\mu} = \frac{V^{\mu}}{1 - G^{0\,\mu}_{\mu} V^{\mu}}, \tag{8}$$

где $G^{0\,\mu'}_{\mu}$ — функция Грина идеальной решетки. Индексы μ и μ' означают, что первый узельный индекс принадлежит квазимолекуле μ, а второй — квазимолекуле μ'. При этом первое слагаемое в (7) 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.

При качественном описании фононных спектров в случае $c << 1$ практически достаточно учесть в (7) 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).

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

Перейдем к гриновской функции. Введем в рассмотрение одночастичную запаздывающую гриновскую функцию G^{+} [35], собранную на операторах динамических атомных смещений u_n:

$$G^{+}_{nn'}(t - t') = -i\theta(t - t') < [u_{n(t)}, u_{n'}(t')] >. \tag{9}$$

Символ <> означает статистическое усреднение с гамильтонианом H'.

Пространственная фурье-компонента конфигурационно усредненной запаздывающей функции Грина моды j-поляризации, отвечающая полному гармоническому гамильтониану, имеет вид

$$\overline{G}^{+}_{j}(\mathbf{k},\omega) = \left(\omega^2 - \omega^2_j(\mathbf{k}) - P_j(\mathbf{k},\omega) - i \frac{2\omega}{\tau^{j}_{i}}(\omega) \right)^{-1}, \tag{10}$$

где время жизни для упругих процессов $\tau^{j}_{i}(\omega)$ определяется мнимой частью массового оператора, а $P_j(\mathbf{k},\omega)$ его действительной частью.

В конкретных приложениях для $\overline{G}^{+}_{j}(\mathbf{k},\omega)$ вместо (10) ниже используется представление вида

$$\overline{G}^{+j}(\mathbf{k},\omega) = Q(\omega) \left[\omega^2 - \tilde{\omega}^2_j(\mathbf{k}) - i \frac{2\omega}{\tau'^{j}_{i}(\omega)} \right]^{-1}. \tag{11}$$

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

$$\tilde{\omega}_j^2(\mathbf{k}) - \omega_j^2(\mathbf{k}) - P_j(\tilde{\omega}_j(\mathbf{k})) = 0. \qquad (12)$$

Подразумевается, что $\omega \approx \tilde{\omega}_j(\mathbf{k})$. Фактор $Q(\omega)$ задается как

$$Q^{-1}(\omega) = 1 - \cos\Phi \frac{d\Sigma(\omega)}{d\omega^2} + \operatorname{Im}\Sigma(\omega)\frac{d\Phi(\omega)}{d\omega^2}. \qquad (13)$$

Зависимость резонансного фазового сдвига от частоты (энергии) падающей квазичастицы описывается функцией

$$\Phi(\omega) = \operatorname{arctg}\frac{\operatorname{Im}\Sigma(\omega)}{\operatorname{Re}\Sigma(\omega)}. \qquad (14)$$

Кроме того, считаем

$$\tau'^{j}_{i} = Q^{-1}\tau^{j}_{i}, \qquad (15)$$

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

При этом в узком интервале частот вблизи резонансной частоты (где $\operatorname{Re}\Sigma(\omega_R) = 0$) и на некотором удалении от нее вместо (13) приближенно имеем

$$Q^{-1}(\omega) \approx \begin{cases} 1 + \operatorname{Im}\Sigma(\omega)\dfrac{d\Phi(\omega)}{d\omega^2}, & |\omega^2 - \omega_R^2| < \Gamma_R, \\ 1 - \dfrac{dP(\omega)}{d\omega^2}, & |\omega^2 - \omega_R^2| > \Gamma_R, \end{cases} \qquad (16)$$

где Γ_R — ширина резонанса.

Подчеркнем, что при нахождении одноузельной матрицы рассеяния учтены 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 (11) 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 (16) (см., например, монографию [19]).

4. Модель квазилокального возмущения

Рассмотрим далее модель квазилокального возмущения со слабой связью. 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 соседних цепочках и двумя атомами в цепочке. 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

$$U^+ = \begin{pmatrix} 1 & 00000 & 0 \\ 0 & \sigma\sigma\sigma\sigma\sigma & \sigma \\ 0 & 0000y & y \end{pmatrix}.$$

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

С использованием явного вида матрицы U можно определить матрицы V и G^0 в симметризованных координатах. Опуская промежуточные вычисления запишем выражение для пространственно-временной компоненты t-матрицы рассеяния в области низких частот и малых значений квазиимпульса [3–7,13]

$$t(k,\omega) \approx t(\omega) = -z\gamma'_\perp \frac{\omega^2}{\dfrac{\gamma'_\perp}{(\varepsilon+\tau)\gamma_\perp}\omega_\perp^2 - \omega^2 - i\dfrac{\gamma'_\perp}{\gamma_\perp}\omega\omega_\perp} + $$
$$+ O\left[(k_\perp b)^4, \epsilon(k_\perp b)^2 \left(\frac{\omega}{\omega_\perp}\right)^2\right]. \qquad (17)$$

При выводе (17) пренебрегали взаимодействием между атомными цепочками ($\gamma_{||} = 0$, $\gamma'_{||} = 0$) и учитывали только межатомное взаимодействие в регулярных цепочках ($\gamma_\perp$) и взаимодействие примесного атома с двумя (z = 2) ближайшими соседями ($\gamma'_\perp$). В выражении (17) величина $\dfrac{\gamma'_\perp}{(\varepsilon+\tau)\gamma_\perp}\omega_\perp^2$ есть квадрат собственной частоты примеси ω_R^2. В случае слабой связи, когда $R = \dfrac{\gamma'_\perp}{\gamma_\perp} \to 0$, t-матрица имеет низкочастотный резонанс. Характерная частота

$$\omega_R = \sqrt{\frac{R}{\epsilon+\tau}}\omega_\perp.$$

Из приведенной формулы для t-матрицы (17) видно также, что выполняется условие $\omega_R \ll \omega_\perp$ и одновременно затухание уровня $\Gamma_R = R\omega_R\omega_\perp$ будет мало по сравнению с характерной резонансной частотой, если $\sqrt{R(\epsilon+\tau)} \ll 1$. Таким образом, резонансная мода является хорошо определенной в случае $R << \frac{1}{\epsilon+\tau}$.

Далее, что касается массового оператора, то напомним, что в соотношении общего вида для t-матрицы (8) фигурируют матрицы V и G. Мы ограничиваемся областью промежуточных частот $\omega_0^2 \le \omega^2 < \omega_\perp^2$, в которой закон дисперсии обладает квазиодномерными свойствами. В этом случае, если непосредственно перемножить указанные матрицы и перейти от координатного представления к импульсному с учетом (7), имеем (см. некоторые детали в [27])

$$\Sigma(\omega, \mathbf{k}) = ct(\omega)[1 + \Delta_c(\omega, \mathbf{k})],$$

$$\Delta_c(\omega, \mathbf{k}) = ct^2\left(-\frac{\partial G_0^0(\omega)}{\partial\omega^2} - G_0^{02}(\omega^2)\right) +$$

$$+c\sum_{\mathbf{s}} \frac{G_{\mathbf{s}}^{02}(\omega, \mathbf{k})t^3(\omega)e^{i\mathbf{ks}} + G_{\mathbf{s}}^{03}(\omega, \mathbf{k})t^4(\omega)}{1 - G_{\mathbf{s}}^{02}(\omega, \mathbf{k})t^2(\omega)} + \dots \,. \tag{18}$$

Критерий сходимости ряда для массового оператора задается соотношением

$$c\left|t^2(\omega)\frac{\partial G_0^0(\omega)}{\partial\omega^2}\right| << 1. \tag{19}$$

В условиях, когда t-матрица резонансного вида, нужно явно рассматривать перенормировку фононного спектра и учитывать частотную зависимость фактора Q. Конфигурационно усредненная одночастичная $\overline{G}^+(\omega, \mathbf{k})$-функция описывается соотношением в общей форме (11). Фактор Q вблизи и вдали от резонанса был определен выше (см. формулу (16)). Используя явный вид одноузельной t-матрицы (17) и представление для гриновской функции G_0^0, поперечной акустической моды с законом дисперсии (2)

$$G_0^0(\omega^2) \approx -\frac{\sqrt{2}}{\pi\omega_\perp^2} - \frac{i}{\sqrt{2}\omega_\perp\omega},$$

перепишем условие сходимости (19) для ситуации, когда имеет место хорошо определенный резонансный уровень ($\Gamma_R > |\omega^2 - \omega_R^2|$ и в то же время $\Gamma_R << \omega_R^2$) в низкочастотной области спектра $\omega_0^2 < \omega_R^2 << \omega_\perp^2$. Имеем

$$c << c_0 = \sqrt{\frac{R}{\epsilon+\tau}}.$$

5. Затухание ультразвука

Распространение звуковой волны с частотой ω, волновым числом k и поляризацией j зависит от упругих свойств кристаллической решетки. Ее затухание определяется мнимой частью поляризационного оператора одночастичной решеточной функции Грина:

$$\tilde{G}_j^{+-1}(\mathbf{k}, \omega) = \overline{G}_j^{+-1}(\mathbf{k}, \omega) - \Pi^j(\mathbf{k}, \omega). \tag{20}$$

Здесь функция Грина $\overline{G}_j^+(\mathbf{k}, \omega)$ определяется выражением (11), а $\Pi^j(\mathbf{k}, \omega)$ — поляризационный оператор.

Мы предполагаем, что основной причиной затухания звуковой волны является ее взаимодействие с низколежащей ветвью, закон дисперсии которой имеет большой плоский участок. Для определения зависящей от температуры части коэффициента затухания ультразвука надо найти с учетом ангармонического взаимодействия фононов мнимую часть поляризационного оператора. Можно показать, что в приближении кубического ангармонизма (см. [14,15])

$$\mathrm{Im}\,\Pi^j = \mathrm{Im}\Pi_1^j + \mathrm{Im}\Pi_2^j, \tag{21}$$

где

$$\mathrm{Im}\,\Pi_1^j(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\omega}{T}\sum_{\mathbf{k}_1} \Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2}, \mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}} \Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2}, \mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}} \times$$

$$\times\int_0^\infty \frac{d\omega_1}{2\pi} n(\omega_1)(n(\omega_1) + 1) \times,$$

$$\times \mathrm{Re}[\overline{G}^+_{\mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2}}(\omega_1 - \omega)\overline{G}^-_{\mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}}(\omega_1)],$$

$$\mathrm{Im}\,\Pi_2^j(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\omega}{T}\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2}, \mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}} \Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2}, \mathbf{k}_1-\frac{\mathbf{k}}{2}} \times$$

$$\times\int_0^\infty \frac{d\omega_1}{2\pi} n(\omega_1)(n(\omega_1) + 1)\,\mathrm{Re}[\overline{G}^+_{\mathbf{k}_1+\frac{\mathbf{k}}{2}}(\omega_1 - \omega) \times$$

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

Здесь $n(\omega)$ — равновесная планковская функция распределения фононов, а диффузионная вершина $U^j_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}(\omega, \omega_1) = U^j(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2; \omega, \omega_1) = U^j(\mathbf{q}; \omega, \omega_1)$ является суммой графиков «веерного» типа (см. ниже). Первое слагаемое в (21) описывает поправку к затуханию фононов из-за стандартного ангармонического взаимодействия между акустическими фононами в присутствии дефектов. Что касается второго слагаемого, то оно появилось в результате учета взаимодействия акустической моды с двухфоонными когерентными состояниями, которые определяют режим слабой локализации при выполнении условий

$$ql^j \ll 1,\ \omega\tau_i'^j \ll 1, \tag{22}$$

где $l^j = v^j\tau_i'^j$ — длина пробега фонона j-ой поляризации, ограниченная упругим рассеянием на примесях. При написании (21) мы выполнили первую итеррацию в уравнении Бете–Солпитера для двухчастичной решеточной функции Грина, т.е. $\operatorname{Im}\Pi^j(\mathbf{k},\omega)$ включает в себя посредством слагаемого $\operatorname{Im}\Pi_2^j(\mathbf{k},\omega)$ только первую диффузионную поправку.

В работе [16] 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 [16], 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

$$U(\mathbf{q};\omega_1,\omega) = \frac{2\omega_1^2}{\Pi\tau_i^2(\omega_1)g(\omega_1)}\frac{1}{D_\perp^0 q_\perp^2 - i\omega + \dfrac{1}{\tau_N(\omega_1)}}. \tag{23}$$

Здесь $D_\perp^0 = v_\perp^2(\omega_1)\tau_i'(\omega_1)$, $v_\perp^2 = Q^2(\omega_1)v_\perp^{02}(1 - \frac{\omega_0^2}{\omega_2^1})$, $\omega_1 > \omega_0$. В выражении (23) посредством $1/\tau_N$ 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 при этом по-прежнему важным. Уже учет слабого ангармонического затухания в диффузионной вершине может радикально видоизменить вклад локализационных поправок в затухание звука. Зададим параметр ангармонического взаимодействия Φ^3 в стандартном приближении:

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

$$\tilde{\gamma}_3 = \frac{\gamma_3}{(\gamma_\parallel^2\gamma_\perp)^{1/2}}. \tag{24}$$

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

$$\gamma_3^2\frac{\omega_{\max}}{\gamma_\parallel^2\gamma_\perp} = \tilde{\gamma}_3^2\omega_{\max} \approx 10\frac{\langle u^2\rangle}{a^2} = 10\delta_A, \tag{25}$$

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, [25]).

Отдельные члены поляризационного оператора, фигурирующие в (21), с учетом (23), (24) определяются следующим образом:

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

$$\times\sum_{\mathbf{k}_1}\omega^2(\mathbf{k}_1)n(\omega(\mathbf{k}_1))(n(\omega(\mathbf{k}_1))+1)Q^2(\omega(\mathbf{k}_1))\tau_i'^j(\omega(\mathbf{k}_1)), \tag{26}$$

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

$$\times\int_{\omega_0}^{\omega_{\max}}\frac{d\omega_1}{2\pi}g(\omega_1)n(\omega_1)(n(\omega_1)+1)\times$$

$$\times Q^4(\omega_1)\frac{\Pi}{4}\tau_i'^3(\omega_1)\sum_{\mathbf{q}}U(\mathbf{q};\omega_1,\omega). \tag{27}$$

При получении (26), (27) 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 (27) факторизовалось.

В области предельно низких температур сумма в (26) расходится. Она становится конечной, если учесть слабое ангармоническое затухание тепловых фононов и их рассеяние на границах образца. Механизм поглощения звука, описываемый выражением (26), существен в промежуточной области температур, где рассеяние тепловых фононов чувствительно к дефектам [36]. Что касается выражения для $\operatorname{Im}\Pi_2$, то оно справедливо в интервале частот $\omega_0 \le \omega < \omega_{\max}$, в котором закон дисперсии обнаруживает квазиодномерное поведение.

Рассмотрим звук, частота которого удовлетворяет условию $\omega\tau_i' \ll 1$. Зависящая от температуры часть коэффициента затухания звука с учетом (21) может быть представлена в форме

$$\Gamma(\omega) = \Gamma_1(\omega) + \Gamma_2(\omega) = \frac{\operatorname{Im}\Pi_1(\omega(\mathbf{k})) + \operatorname{Im}\Pi_2(\omega(\mathbf{k}))}{2\omega(\mathbf{k})}, \tag{28}$$

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

$$\tau_N^{-1} = \tilde{\gamma}_3^2 \omega_\perp \omega^2(\mathbf{k}) \frac{\omega_0^2}{\omega_\perp^3} e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} = \frac{\gamma_G^2(T)\hbar}{M_0 \omega_\perp a^2} \omega^2(\mathbf{k}) \frac{\omega_0^2}{\omega_\perp^3} e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}}, \qquad (29)$$

$\gamma_G(T)$ — параметр Грюнайзена, M_0 — масса атома, a — характерное межатомное расстояние. Конкретизируем формулу для времени упругой релаксации τ_i'. Согласно (15) и (17), имеем:

$$\Gamma_0 = \frac{1}{\tau_i'} = Q\tau_i^{-1} = c\left(\frac{\gamma'_\perp}{\gamma_\perp}\right)^2 \frac{\omega^2 \omega_\perp^3 Q(\omega)}{(\omega_R^2 - \omega^2)^2 + (\gamma'_\perp/\gamma_\perp)^2 (\omega\omega_\perp)^2}. \qquad (30)$$

Коэффициент Γ_0 определяет вклад в поглощение звука от рассеяния на дефектах. Его величина не зависит от температуры. Условие преобладания примесного рассеяния $\tau_i^{-1} >> \tau_N^{-1}$ выполняется, если

$$c\left(\frac{\gamma'_\perp}{\gamma_\perp}\right)^2 \frac{\omega_\perp^3}{(\omega_R^2 - \omega_1^2)^2 + (\gamma'_\perp/\gamma_\perp)^2 (\omega_1\omega_\perp)^2} >> \gamma_G^2(T) \frac{\hbar\omega_\perp}{M_0 v^2} \frac{\omega_0^2}{\omega_\perp^2} e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}}, \qquad (31)$$

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 [24,25].

Типичный эксперимент по поглощению звука проводится на частотах мегагерцевого диапазона. Принимая во внимание (29) и используя экспериментальные данные работ [24,25] 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

$$\frac{\tau_N^{-1}}{\omega} \approx 10^{-2} \frac{\omega}{\omega_\perp}, \qquad (32)$$

т.е. $\omega\tau_N >> 1$. Это неравенство демонстрирует слабую зависимость диффузионной вершины (23) от τ_N^{-1}. Запишем выражения для коэффициентов затухания звука G_1 и G_2, зависящих от температуры. После подстановки (4) и (23) в формулы (26)–(28) для квазиодномерной области колебательного спектра получим:

$$\Gamma_1(\omega, T) = \frac{\tilde{\gamma}_3^2 \omega}{2T\omega_\perp} \times \int_{\omega_0}^{\omega_{\max}} d\omega_1 \omega_1^2 n(\omega_1)(n(\omega_1)+1) Q^2(\omega_1) \omega \tau_i'(\omega_1), \qquad (33)$$

$$\Gamma_2(\omega, T) = \frac{\tilde{\gamma}_3^2 \omega}{32T\omega_\perp} \times \int_{\omega_0}^{\omega_{\max}} d\omega_1 \omega_1^2 n(\omega_1)(n(\omega_1)+1) Q(\omega_1) \sqrt{\omega \tau_i'(\omega_1)}. \qquad (34)$$

Особенностью выражений (33) и (34) является различная зависимость их от частоты звуковой волны ω и фактора Q. В окрестности резонансной частоты ω_R величина $Q < 1$ (см. ниже). Если сравнить между собой вклады в затухание звука от Γ_1 и Γ_2, то в приближении доминирующих фононов $\omega_1 \approx \omega_T = k_B T/\hbar$ результат будет иметь вид

$$\frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} = \frac{1}{16}\sqrt{\frac{1}{Q\tau_i \omega}}. \qquad (35)$$

Сделаем «буквенную» оценку для полного коэффициента затухания звука: $\Gamma = \Gamma_0 + \Gamma_1 + \Gamma_2$. В приближении доминирующих фононов из (30), (33) и (34) имеем:

$$\Gamma(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\omega_\perp}\left[c\epsilon^2 + \gamma_G^2 \frac{\omega_T^2}{2\omega_\perp} \tau_i' Q^2(\omega_T) \times \left(1 + \frac{1}{16}\sqrt{\frac{1}{Q(\omega_T)\tau_i(\omega_T)\omega}}\right)\right]. \qquad (36)$$

В интересующей нас области низких температур затухание в основном определяется вторым слагаемым выражения (36).

Определим ренормализационный фактор Q через параметры модели. Принимая во внимание (16) и определение одноузельной матрицы рассеяния в форме (17), для интервала частот вблизи резонансной частоты получаем:

$$Q^{-1}(\omega_1) \approx 1 + \frac{\tau_D}{\tau_i}.$$

Здесь τ_D — время задержки. Оно определяется выражением

$$\tau_D = \frac{d\Phi(\omega_1)}{d\omega_1} = \frac{2\gamma'_\perp}{\gamma_\perp}\omega_\perp \times$$

$$\times\left[\frac{\omega_R^2 + \omega_1^2}{(\omega_R^2 - \omega_1^2)^2 + (\frac{\gamma'_\perp}{\gamma_\perp}\omega_1\omega_\perp)^2}\right] \approx \frac{2}{\frac{\gamma'_\perp}{\gamma_\perp}\omega_\perp}.$$

При этом $\tau_i^{-1} = c\omega_\perp$. Так, что $\tau_D/\tau_i \approx \dfrac{2c}{\gamma'_\perp/\gamma_\perp}$. Одновременно должно выполняться условие: $\omega_R >> \tau_i^{-1}$ или $\sqrt{\gamma'_\perp/\epsilon\gamma_\perp} >> c$. На некотором удалении от резонансной частоты фактор $Q^{-1}(\omega_1)$ мало отличается от единицы. На самом деле:

$$Q^{-1}(\omega_1) \approx \frac{(\omega_R^2 - \omega_1^2)^2 + 2\gamma'_\perp c\omega_R^2/\gamma_\perp}{(\omega_R^2 - \omega_1^2)^2} \approx 1.$$

Приведем численную оценку выражения (35) для $T = 4$ К на некотором удалении от резонансной частоты $\omega_T << \omega_R$. В этом случае $Q^{-1}(\omega_T) \approx 1$ и $\tau_i^{-1} = c\epsilon^2\omega_T^2/\omega_\perp$. При $c\epsilon^2 \approx 10^{-2}$, $\omega/2\pi = 50$ МГц, получаем $\Gamma_2/\Gamma_1 \approx 0{,}08$. 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 $c \geq 5\%$. Оценим величину $Q^{-1}(\omega_T)$ вблизи резонансной частоты при $c = 5\%$ и отношении параметров силового взаимодействия $\gamma'_\perp/\gamma_\perp = 0{,}1$, получим $Q^{-1} = 2$. Обратим еще внимание на то, что механизм затухания для Γ_2 экспериментально можно идентифицировать по частотной зависимости: $\Gamma_2 \sim \omega^{3/2}$.

6. 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 [27,28,37] поляризационный оператор Π^4, отвечающий четырехфононным процессам взаимодействия, определяется выражением

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

$$\times\int_0^\infty \frac{d\omega_1}{2\pi}\operatorname{cth}\frac{\omega_1}{2T}[\overline{G}^+(\mathbf{k}_1,\omega_1) - \overline{G}^-(\mathbf{k}_1,\omega_1)]. \quad (37)$$

Ангармоническую вершину Φ^4 зададим в стандартном приближении:

$$\Phi^4_{\mathbf{k},-\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_1,-\mathbf{k}} = \tilde{\gamma}_4\omega^2(\mathbf{k})\omega^2(\mathbf{k}_1);\ \tilde{\gamma}_4 = \frac{\gamma_4}{\gamma_2^2}, \quad (38)$$

где γ_4 — эффективная ангармоническая силовая постоянная четвертого порядка. С учетом (11) и (38) после ряда преобразований из (37) получаем

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

$$\int_0^{\omega_{\max}} d\omega_1 g(\omega_1)Q(\omega_1)\omega_1\operatorname{cth}\frac{\omega_1}{2T} = \omega^2(\mathbf{k})\Delta(T). \quad (39)$$

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

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

$$= -\frac{Th}{8Mv^2}\left\{\gamma_G^2(T)C(T) - U(T)\left|\frac{\gamma_G^2(T)}{dT}\right|\right\}. \quad (40)$$

Здесь

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

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

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

Согласно (40), суммарная перенормировка скорости звука определяется двумя слагаемыми. При рассмотрении области низких температур в выражении (40) 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 $\gamma_G(T) \approx \text{const}$) и изменение $\Delta v/v$ будет определяться главным образом первым слагаемым (40). Пренебрежение в (40) эффектом задержки ($Q(\omega) \to 1$) приводит к увеличению $\Delta v/v$. Поскольку $Q(\omega) < 1$ только в частотной области вблизи резонансной частоты, следует ожидать несущественного влияния эффекта задержки на перенормировку скорости звука. Результаты экспериментального исследования перенормировки скорости звука в квазиодномерных системах отражены в работе [25]. Они свидетельствуют о существовании максимума в зависимости $\Delta v/v$ от температуры для системы $(Ta_{1-x}Nb_xSe_4)_2I$.

Наконец, что касается интерференционной поправки к скорости звука. Можно показать, что ее величина составляет $\sqrt{\omega\tau_i}$ от классического эффекта, описываемого выражением (40). Поэтому, согласно условию (22), ее вклад в изменение скорости звука не существен.

7. Заключение

Проведено исследование коэффициента затухания ультразвука в цепочечном кристалле с резонансно рассеивающими дефектами в режиме слабой локализации. Рассмотрено взаимодействие звуковой волны с доминирующей решеточной колебательной модой, для которой характерно наличие большого фазового объема квазиодномерного динамического поведения.

Проанализирован вклад поправок к затуханию звука от эффектов слабой локализации и пленения данной моды при ее резонансном рассеянии. Показано, что учет эффекта задержки приводит к ослаблению затухания звука и нивелирует поправку от слабой локализации. Физический смысл полученного результата прост. Его можно объяснить уменьшением частоты столкновений фононов в условиях их пленения резонансно-рассеивающими дефектами.

Необходимо отметить еще тот факт, что до самого последнего времени при обсуждении экспериментальных данных по поглощению звука и изменению его скорости в неупорядоченных квазиодномерных соединениях $(Ta_{1-x}Nb_xSe_4)_2I$ не обращалось внимание на влияние эффектов задержки и слабой локализации фононных мод. На основании оценок, проведенных для $(Ta_{1-x}Nb_xSe_4)_2I$, можно предположить, что вклад эффектов задержки и слабой локализации экспериментально можно обнаружить только при $x \geq 0{,}2$. Этот результат отвечает экспериментально обнаруженному отсутствию аномалий скорости и затухания звука в слабодопированных системах $(Ta_{1-x}Nb_xSe_4)_2I$ с $x \leq 0{,}012$.

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

1. Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **5**, 1069 (1979).
2. Д.М. Берча, М.Н. Ботвинко, Л.Ю. Германская, М.А. Иванов, *ФНТ* **12**, 287 (1986).
3. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, *ФТТ* **30**, 2965 (1990).
4. М.А. Иванов, А.М. Косевич, Е.С. Сыркин, И.А. Господарев, Ю.В. Скрипник, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **19**, 434 (1993).
5. Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **20**, 586 (1994).
6. М.А. Мамалуй, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **25**, 72 (1999).
7. В.И. Гришаев, М.А. Мамалуй, П.А. Минаев, Е.С. Сыркин, С.Б. Феодосьев, *ФНТ* **27**, 1287 (2001).
8. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, В.С. Молодид, *ФНТ* **30**, 217 (2004).
9. М.А. Иванов, В.С. Молодид, Ю.В. Скрипник, *ФНТ* **30**, 1086 (2004).
10. E. Akkermans and R. Maynard, *Phys. Rev.* **B32**, 7850 (1985).
11. M.P. Blencowe, *J. Phys.:Condens. Matter* **7**, 5177 (1995).
12. А.П. Жернов, Е.П. Чулкин, *ФТТ* **40**, 132 (1998).
13. А.П. Жернов, Е.П. Чулкин, *ЖЭТФ* **113**, 930 (1998).
14. Е.П. Чулкин, А.П. Жернов, Т.Н. Кулагина, *ФНТ* **25**, 1218 (1999).
15. Е.П. Чулкин, А.П. Жернов, Т.Н. Кулагина, *ФНТ* **26**, 173 (2000).
16. А.П. Жернов, Е.П. Чулкин, *ЖЭТФ* **117**, 350 (2000).
17. Е.П. Чулкин, *ЖЭТФ* **122**, 1022 (2002).
18. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки*, Вища школа, Харьков (1988).
19. Дж. Тейлор, *Теория рассеяния*, Москва, Мир (1979).
20. A.P. Zhernov, E.I. Salamatov, and E.P. Chulkin, *Phys. Status Solidi* **B165**, 355 (1991).
21. Ю.Н. Барабаненков, М.Ю. Барабаненков, *ЖЭТФ* **113**, 432 (1998).
22. A.L. Burin, L.A. Maksimov, and I.Ya. Polishchuk, *Physica* **B210**,49 (1995).
23. J.E. Lorenzo, R. Currat, A.J. Dianoux, P. Monceau, and F. Levy, *Phys. Rev.* **B53**, 8316 (1996).
24. J.E. Lorenzo, R. Currat, P. Monceau, et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 5039 (1998).
25. J.E. Lorenzo, R. Currat, P. Monceau, B. Hennion, H. Berger, and F. Levy, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 2021 (1996).
26. И.Я. Полищук, А.Л. Бурин, Л.А. Максимов, *Письма ЖЭТФ* **51**, 644 (1990).
27. A.P. Zhernov and E.P. Chulkin, *Phys. Status Solidi* **B193**, 67 (1996).
28. А.П. Жернов, Е.П. Чулкин, *ЖЭТФ* **109**, 602 (1996).
29. I.Ya. Polishchuk, L.A. Maksimov, and A.L. Burin, *Phys. Rep.* **288**, 205 (1997).
30. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **22**, 475 (1952).

31. S. Tanuma and A.V. Palnichenko, *J. Mater. Res.* **10**, 1120 (1995).
32. A.S. Gurov, V.N. Kopylov, K. Kusano, et al., *Phys. Rev.* **B56**, 11629 (1997).
33. М.А. Иванов, *ФТТ* **12**, 1985 (1970).
34. М.А. Иванов, Ю.Г. Погорелов, *ФНТ* **5**, 910 (1979).
35. Ю.М. Каган, *Материалы школы по теории дефектов в кристаллах*, Тбилиси (1969), т. 2, с. 93.
36. Р. Берман, *Теплопроводность твердых тел*, Мир, Москва (1979).
37. A.A. Maradudin and S. Califano, *Phys. Rev.* **B48**, 12628 (1993).

Ultrasound attenuation in a chained crystal with resonance scattering imperfections

E.P. Chulkin

The anomalies in the frequency and low-temperature behaviors of the ultrasound attenuation coefficient in a chained crystal with resonance scattering imperfections are investigated with due account of the effects of delay and weak localization of the acoustic mode the dispersion relations of which have a large feat portion. The resonance level parameters at which the localization processes are weaker compared to the delay effect have been determined. The point on some possible manifestation of the above effects in the experiments on ultrasound absorption in quasi-one-dimensional $(Ta_{1-x}Nb_xSe_4)_2I$ crystals is discussed.

Keywords: chained crystal, ultrasound attenuation, resonance scattering, delay effect