Физика низких температур, 1996, т. 22, № 4, с. 432–437 УДК 538.9

Вклад колебательных состояний примесных двухатомных молекул в низкотемпературную теплоемкость кристалла

Е. И. Саламатов

Физико-технический институт УрО РАН, Россия, 426001, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

Статья поступила в редакцию 14 июля 1995 г., после переработки 31 октября 1995 г.

Теоретическое исследование динамики примесных немагнитных линейных молекул, находящихся в кристаллической матрице, проведено в рамках простой модели, которая позволяет связать туннельные состояния, обусловленные вращением молекулы, с колебаниями ее центра масс. Взаимодействие между случайно расположенными примесными молекулами приводит к концентрационной зависимости функции распределения низкоэнергетических возбуждений, ответственных за аномальное поведение теплоемкости таких дефектных кристаллов при низких температурах. Полученные результаты качественно согласуются с экспериментальными данными.

Теоретичне дослідження динаміки домішкових немагнітних лінійних молекул, що знаходяться в кристалічній матриці, проведено в межах простої моделі, яка дозволяє пов'язати тунельні стани, обумовлені обертанням молекули, з коливаннями її центра мас. Взаємодія між випадково розташованими домішковими молекулами приводить до концентраційної залежності функції розподілу низькоенергетичних збуджень, відповідальних за аномальну поведінку теплоємності таких дефектних кристалів при низьких температурах. Одержані результати якісно узгоджуються з експериментальними даними.

Введение

В последние годы появилось немало теоретических работ, посвященных объяснению стеклоподобного поведения теплоемкости отвердевших растворов инертных газов с примесными молекулами, обладающими вращательными степенями свободы [1–3]. Как правило, в таких исследованиях исходят из свободного ротатора, уровни энергии которого расщепляются кристаллическим полем. Величина расщепления имеет порядок 1 K, что приводит к появлению избыточной теплоемкости в области низких температур, наблюдаемой экспериментально [4–7]. При учете взаимодействия между примесными атомами расщепление низколежащих уровней становится случайной величиной с непрерывной функцией распределения. Вид этой функции можно связать с распределением полей напряжений, обусловленных наличием дефектов структуры. При диполь-дипольном взаимодействии между случайно расположенными точечными дефектами такой подход позволяет удовлетворительно описать экспериментально наблюдаемые результаты.

При сильных кристаллических полях выбор свободного ротатора в качестве начального приближения вряд ли оправдан. Решение проблемы в этом случае целесообразно начинать с изучения малых колебаний примесной молекулы вблизи равновесного положения. Отметим, что динамика точечных дефектов, являющихся линейными молекулами — собственными атомами внедрения в расщепленной конфигурации, — интенсивно изучалась в 70-е годы в связи с проблемой радиационной стойкости облученных материалов (см., например, [8]). Понятно, что в случае металлов квантовыми эффектами можно было пренебрегать. Поэтому принципиальным моментом данной работы является введение в модель туннельных состояний примесной молекулы и определение их связи с колебательными степенями свободы.

Ограничимся исследованием кристаллов с немагнитными примесными молекулами, внутренние (либрационные) степени свободы которых связаны со смещением атомов в реальном пространстве. Это позволяет использовать стандартный метод исследования динамики дефектной решетки — метод двухвременных функций Грина, определенных на операторах смещения [9]. В этом подходе вклад отдельного дефекта в решеточную теплоемкость неупорядоченного кристалла может быть вычислен по формуле

$$C_d = k_B \int d\omega\, g_d(\omega)(\hbar\omega/2k_B T)^2/\mathrm{sh}^2(\hbar\omega/2k_B T)\ . \quad (1)$$

Здесь все обозначения общеприняты, а функция плотности колебательного состояния $g_d(\omega)$ связана с усредненной по конфигурациям примесей функцией Грина системы соотношением [10]

© Е. И. Саламатов, 1996

$$g_d(\omega) = 2\omega \operatorname{Im} \langle G_{dd}(\omega) M_d \rangle / \pi \ , \qquad (2)$$

где символ $\langle \ldots \rangle$ обозначает конфигурационное усреднение. Если в системе содержатся дефекты различных типов, то при расчете вклада в теплоемкость, приходящегося на один дефект, мы должны заменить функцию $g_d(\omega)$ на $\bar{g}(\omega)$, где черта обозначает усреднение по сортам дефектов [11]:

$$\bar{g}(\omega) = \int ds\, \rho(s) g_d(\omega, s) \ . \qquad (3)$$

Здесь $\rho(s)$ — функция распределения по типам дефектов, которые характеризуются в общем случае многомерным параметром s.

Параметр s должен определять как малые колебания молекулы около положения равновесия, так и туннельные состояния. Целью работы является выбор удобного параметра s и нахождение его функции распределения.

Модельные представления

Рассмотрим одноатомный кристалл, содержащий примесные двухатомные молекулы типа N_2, не обладающие собственным магнитным моментом. Как уже отмечалось, в этом случае вращательные степени свободы связаны со смещением атомов молекул в реальном пространстве, и при описании такой системы можно ограничиться только решеточной частью гамильтониана. Выделим из полного гамильтониана системы гамильтониан «активной» подрешетки примесных молекул [12]:

$$H = \sum_i (T_i + V(\mathbf{r}_{i,\{\alpha\}})) + 1/2 \sum_{\substack{i \neq j \\ \alpha,\beta}} \Phi(\mathbf{r}_{i\alpha} - \mathbf{r}_{j\beta}) \ , \qquad (4)$$

$\mathbf{r}_{i\alpha}$ ($\alpha = 1, 2$) — радиус-вектор атома α i-й молекулы; T_i — ее кинетическая энергия; $V(\mathbf{r}_{i,\{\alpha\}})$ — эффективный решеточный потенциал молекулы, сформированный атомами матрицы; $\Phi(\mathbf{r}_{i\alpha} - \mathbf{r}_{j\beta})$ описывает парное взаимодействие между примесями.

Несмотря на уже сделанные при записи гамильтониана упрощения, при решении задачи возникают существенные трудности. В случае трансляционно-симметричной «активной» подрешетки это сделать в принципе возможно, однако при случайном расположении примесей такая задача представляется невыполнимой. Поэтому уже на данном этапе требуется ввести дополнительные модельные упрощения.

В настоящей работе основным является предположение о возможности использования при решении данной задачи скалярной модели решетки [13], в которой гамильтониан (4) становится полностью вырожденным по декартовым индексам. Эта модель часто применяется при изучении динамики неупорядоченных решеток и позволяет получать правильные качественные и — в случае описания интегральных характеристик кристаллов — количественные результаты (см., например, [10]). Понятно, что при рассмотрении в такой модели сложных объектов, каковыми являются кристаллы с примесными молекулами, обладающими вращательными степенями свободы, мы вправе рассчитывать только на качественное описание явления. Используемая модель должна быть достаточно простой, чтобы можно было дать ясную интерпретацию полученных промежуточных и конечных результатов. При этом важно оставаться в рамках сделанных приближений на всех этапах исследования, что позволит в конце концов оценить адекватность модели реальной физической ситуации.

Изолированная примесная молекула

Основной задачей данного раздела статьи является введение в модель низкоэнергетических туннельных состояний и нахождение их связи с другими степенями свободы изолированной молекулы.

Используемая в работе скалярная модель не позволяет описать произвольный ротатор. Поэтому мы ограничимся рассмотрением плоского ротатора, полагая, что $|\mathbf{r}_{i\alpha} - \mathbf{r}_{i\beta}| = 2r_0 = \text{const}$ и либрационные колебания возможны только в одной плоскости. В скалярной модели решетки гамильтониан изолированной молекулы имеет вид

$$H_i = p_i^2/(2M) + L_i^2/(2I) + V(\varphi_i, X_i) \ , \qquad (5)$$

где P_i, X_i — операторы импульса и координаты центра масс i-й молекулы; $L_i = -i\hbar\, \partial/\partial\varphi_i$ — оператор углового момента i-й молекулы; φ_i — угол поворота молекулы в плоскости вращения; M — приведенная масса; I — момент инерции.

Запишем разложение потенциала $V(\varphi, X)$ в ряд по степеням малых отклонений φ и X от положения равновесия. Поскольку $\varphi \sim (r_1 - r_2)$, а $X \sim (r_1 + r_2)$, члены разложения, пропорциональные нечетным степеням φ, не симметричны по индексам «1» и «2», что противоречит предположению о тождественности атомов молекулы, и мы их будем опускать. Кроме того, в рассмотренном интервале температур можно пренебречь собственным ангармонизмом молекул, так что имеем

$$V(\varphi, X) = \tilde{\Omega}^2 I \varphi^2/2 + \omega_0^2 M X^2/2 + \varepsilon X^2 \varphi^2/2 \ . \qquad (6)$$

В этом разделе индекс i будем опускать. Из выражения (6) видно, что в случае малых отклонений от положения равновесия движение молекулы

представляет собой два связанных гармонических колебания с частотами ω_0 и $\tilde{\Omega}$. Будем считать $\tilde{\Omega} << \omega_D$ (ω_D — характерная дебаевская частота идеального кристалла), что позволяет записать мнимую часть функции Грина молекулы, соответствующую обобщенной координате φ, в виде Лоренцевой кривой с центром в точке $\tilde{\Omega}$ и шириной $\Gamma_{ph} << \tilde{\Omega}$, пропорциональной плотности фононных состояний. Как правило, частоты либрационных колебаний меньше частот поступательных колебаний [8]. Пусть выполняется условие $\omega_0 \geq \omega_D >> \tilde{\Omega}$, что позволяет уже на данном этапе произвести усреднение по быстрым переменным P и X и тем самым учесть влияние поступательного движения центра масс молекулы на либрационные колебания. (Ниже мы покажем, что сильное условие $\omega_0 >> \tilde{\Omega}$ не обязательно при описании низкоэнергетических возбуждений.)

Чтобы описать вращения примесной молекулы, перейдем от переменной φ^2 к четной периодической функции $\varphi^2 \to (1 - 2\cos(m\varphi)/m^2)$, где m — число минимумов этой функции на периоде 2π. После усреднения по быстрым переменным и несложных преобразований можно при любом m записать уравнение Шредингера движения изолированной частицы вдоль координаты φ в виде уравнения Матье [14]. При рассмотрении в нашей модели не важно конкретное значение числа m, и мы ограничимся случаем $m = 2$, для которого имеем

$$(\hbar^2/2I)\partial^2\psi/\partial\varphi^2 - [E - E_b(1 - \cos(2\varphi)]\psi = 0 \ . \quad (7)$$

Здесь $E_b = (\tilde{\Omega}^2 I + \varepsilon x^2)/2$ — высота энергетического барьера между двумя положениями равновесия по координате φ; x^2 — коррелятор среднеквадратичного смещения из положения равновесия центра масс молекулы. Перенормированная быстрыми поступательными колебаниями основная частота либрационных колебаний связана с E_b соотношением $\Omega^2 = 2E_b/I$.

Зависимость собственных значений уравнения Матье от параметра E_b хорошо известна [15]. При $E_b = 0$ уравнение (7) представляет собой уравнение Шредингера для свободного плоского ротатора с невырожденным основным и дважды вырожденными остальными энергетическими уровнями. При конечных значениях E_b вырождение снимается. Из физических соображений понятно, что при достаточной больших значениях E_b нижние энергетические уровни уравнения Матье должны приближенно соответствовать нижним энергетическим уровням гармонических колебаний молекулы вблизи равновесного значения угла $\varphi = 0$ (или $\varphi = \pi$). На возможность туннельного перехода из одного равновесного положения в другое указывает наличие узкой щели $\Delta << \hbar\Omega$ между n-м четным и следующим нечетным состоянием [15].

Таким образом, мы ввели в модель двухуровневые системы последовательным путем, выгодно отличающимся от постулирования их в этих материалах, как это сделано, например, в работе [3]. В нашем случае наличие туннельных состояний, с одной стороны, следует из точного решения уравнения Матье, а с другой — имеет простой физический смысл, позволяющий понять, как эти состояния связаны с другими степенями свободы системы.

Для получения явного вида этой связи ограничимся квазиклассическим приближением [16] при вычислении величины расщепления Δ основного уровня. При этом результат будет выражаться через эллиптические функции. Еще более упростим задачу, аппроксимируя потенциальную энергию $V(\varphi)$ вблизи вершины параболической функцией $V(\varphi) \cong E_b(1 - \varphi^2/2)$. Тогда получаем

$$\Delta \cong \Omega\hbar \exp(-\pi(\Omega I/\hbar - 1)) \ . \quad (8)$$

Поскольку именно эта энергетическая величина будет определять низкотемпературную теплоемкость, становится понятным правомочность проведенного ранее усреднения по быстрым переменным, так как условие $\Delta << \omega_0$ заведомо выполняется.

Появление нового энергетического масштаба приводит к возникновению дополнительного пика в мнимой части функции Грина на частоте $\Delta/\hbar$, интенсивность которого уменьшается с температурой. Это уменьшение связано с выравниванием заселенности двух нижних энергетических уровней, и для функции плотности колебательных состояний дефекта в области низких частот можно записать

$$g_d(\omega, T) = \text{th}(\omega\hbar/2k_B T)\delta(\omega - \Delta/\hbar) + \delta(\omega - \Omega) \ . \quad (9)$$

В этой области частот $\Gamma_{ph} << \omega$, и в данном выражении мы заменили узкие Лоренцевы пики δ-функциями.

Поскольку в сделанных приближениях величины Δ и Ω связаны между собой соотношением (8), для определения низкоэнергетического состояния данного дефекта требуется только один независимый параметр, в качестве которого мы выбрали величину Ω.

При низких температурах вклад в коррелятор дают только нулевые колебания центра масс молекулы, и можно записать простое соотношение

$$\Omega^2 = \tilde{\Omega}^2 + \varepsilon x^2/I = \tilde{\Omega}^2 + \varepsilon\hbar/2MI\omega_0 \ , \quad (10)$$

связывающее Ω с x^2 и ω_0, которые также могут быть использованы как независимые параметры модели.

Значение независимого параметра определяется взаимодействием молекулы как с атомами матрицы, так и с другими примесными молекулами. Поскольку окружение примесной молекулы в реальном кристалле случайно, и этот параметр — случайная величина. Следующий раздел посвящен определению функций распределения этой случайной величины.

Учет взаимодействия между примесями

Обратимся к последнему члену гамильтониана (4), описывающему взаимодействие между примесями. Будем считать, что потенциал взаимодействия не зависит от либрационного состояния молекул и при его разложении по малым смещениям из положения равновесия можно ограничиться только квадратичными членами (гармоническое приближение).

Начнем обсуждение со случая, когда «активная» подрешетка обладает трансляционной симметрией с постоянной решетки R_0. При этом вблизи локальной частоты ω_0 образуется оптическая зона, ширина которой ($\Delta\omega^2$) определяется силовыми константами связи второго порядка между молекулами. В случае диполь-дипольного взаимодействия ($U \sim 1/R_0^3$) ширина зоны растет с увеличением концентрации примесей по закону

$$\Delta\omega^2 \sim \partial^2 U/\partial r^2\Big|_{r=R_0} \sim 1/R_0^5 \sim c^{5/3}.$$

Понятно, что при трансляционно-симметричной решетке значение коррелятора x_i^2 не зависит от номера узла ($x_i^2 = x^2$). Наличие беспорядка в расположении дефектов приводит к искажению зоны, а величина x_i^2 становится случайной величиной. Пространственное распределение примесей определяет функцию распределения $\rho(x^2)$, область определения которой должна коррелировать с шириной примесной зоны $\Delta\omega$. С увеличением концентрации дефектов ширина распределения $\rho(x^2)$ увеличивается, что в конце концов и приводит к уменьшению максимума на кривой $C_d(T)$. Хотя в рамках предлагаемой модели можно реализовать процедуру расчета по этой схеме, в данной работе мы ограничимся более простой задачей, полагая, что основное влияние на состояние примеси оказывает только ближайшая к ней другая примесь.

Рассмотрим пару примесных молекул, расположенных на случайном расстоянии R друг от друга. Частота колебаний изолированных примесей ω_0 становится при этом вырожденной. При наличии взаимодействия между молекулами вырождение снимается: $\omega_0^2 \to \omega_{a,s}^2 = \omega_0^2 \pm f(R)/M$, где $f(R)$ — силовая постоянная второго порядка, а индексы s и a относятся к симметричным и антисимметричным относительно инверсии колебаниям центра масс молекул.

Даже не зная явного вида $f(R)$, из соображений симметрии можно сделать некоторые качественные выводы о зависимости частот $\omega_{s,a}$ от расстояния между примесями. При антисимметричных колебаниях все атомы пары колеблются как единое целое, поэтому частота таких колебаний определяется в основном свойствами кристаллической матрицы и даже при малых R не должна сильно отличаться от ω_0. Частота же симметричных колебаний, в которых молекулы пары колеблются в противофазе, может достигать достаточно больших значений при малых R. Эти качественные выводы симметрийного анализа мы учтем формальным образом, вводя два параметра $R_s < R_a$. Будем считать, что диполь-дипольное взаимодействие определяет частоту симметричных (антисимметричных) колебаний при $R > R_s$ ($R > R_a$), а при $R < R_{s,a}$ эти частоты практически не зависят от расстояния между молекулами, т.е. примем, что

$$\omega_{s,a}^2(R) = \begin{cases} \omega_0^2 \pm \beta/R^5, & R \geq R_{s,a}, \\ \omega_0^2 \pm \beta/R_{s,a}^5, & R < R_{s,a}. \end{cases} \qquad (11)$$

Данное выражение наряду с (10) позволяет связать наш модельный случайный параметр Ω с «естественным» случайным параметром R, в качестве функции распределения которого было выбрано распределение Пуассона для объема, приходящегося на одну примесную молекулу:

$$\rho(R) = 3\tilde{c}^2 R^5 \exp(-\tilde{c}R^3), \qquad (12)$$

$\tilde{c} = 4\pi c/3$, где c — концентрация дефектов.

Будем пользоваться этим распределением, хотя при достаточно больших концентрациях примесей (или малых R) оно не справедливо. Некоторым оправданием такого шага может служить то, что мы не знаем зависимости $f(R)$ при малых R и уже сделали достаточно грубое предположение о виде $\omega_{s,a}(R)$ (11). Поэтому фактически получается, что мы ищем функцию распределения случайной величины Ω с использованием асимптотики распределения Пуассона для больших значений R.

Явный вид функции распределения величины Ω нетрудно получить из выражений (10)–(12), мы его не приводим ввиду громоздкости. Заметим только, что из выражения (11) следует, что на краях функции распределения $\rho(\Omega)$, соответствующих $R_{s,a}$, появятся δ-образные вклады, амплиту-

ды которых определяются вероятностью расположения дефектов на расстоянии $R < R_{a,s}$:

$$A_{s,a} = 1 - \exp(-\tilde{c}R_{s,a}^3)(\tilde{c}R_{s,a}^3 + 1) .$$

В приближении (9) для вклада примесных молекул в теплоемкость дефектного кристалла нетрудно получить

$$C_d = k_B \int d\Delta\rho(\Delta)(\Delta/2k_B T)^2/\mathrm{sh}^2(\Delta/2k_B T) +$$

$$+ k_B \int d\Omega\rho(\Omega)(\hbar\Omega/2k_B T)^2/\mathrm{sh}^2(\hbar\Omega/2k_B T) . \quad (13)$$

Здесь мы ввели функцию распределения $\rho(\Delta)$, которую с помощью (8) можно выразить через $\rho(\Omega)$. Провести численное интегрирование в (13) не сложно, используя стандартные процедуры.

Численные расчеты и их обсуждение

Прежде чем приступить к обсуждению численных результатов, перейдем к безразмерным переменным $\Omega \to \Omega/\Omega_0$, $\Delta \to \Delta/\Delta_0$, где индекс «0» относится к величинам, вычисленным для одной примеси в неподвижной решетке. Такой переход позволяет ввести новые, физически более понятные параметры:

$$\Omega_{s,a}^2 \equiv \Omega^2 \quad /\Omega_0^2 = 1 - u[1 - (1 \pm B(R_{s,a}/R)^5)^{-1/2}],$$

$$R > R_{s,a} , \quad \Delta \equiv \Delta/\Delta_0 = \Omega \exp(-\pi S_0(\Omega - 1)) ,$$

$S_0 = \Omega_0 I/\hbar$ — безразмерное действие; $u = \varepsilon I/2M\hbar\omega_0 S_0^2$ — параметр, описывающий перенормировку частоты либрационных колебаний быстрыми колебаниями центра масс:

$$\Omega_0^2 = \tilde{\Omega}^2 u/(1 - u) ; \quad B = 1 - \omega_{a,\min}^2/\omega_0^2 .$$

Для оценки значений этих параметров примем, что $M \cong 5 \cdot 10^{-26}$ кг, $r_0 \cong 10^{-10}$ м, $\Omega_0 \cong 10^{12}$ с$^{-1}$, $\omega_0 \cong 10^{13}$ с$^{-1}$. Кроме того, для величины ε/r_0^2, являющейся по смыслу параметром ангармонизма четвертого порядка, примем $\varepsilon/r_0^2 \cong 10^{20}$ Дж/м^4 [17]. При этом для параметров S_0 и u получим значения близкие к единице.

Величину S_0 можно оценить и из других соображений. В нашей модели возрастание $C_d(T)$ после минимума связано с наличием в спектре $g_d(\omega)$ максимума на частоте Ω. Для получения согласия с поведением экспериментальных кривых необходимо, чтобы отношение Δ_0/Ω_0 было порядка десяти, что дает значение $S_0 \cong 1{,}7$. В расчетах мы использовали это значение S_0 и $u = 0{,}9$.

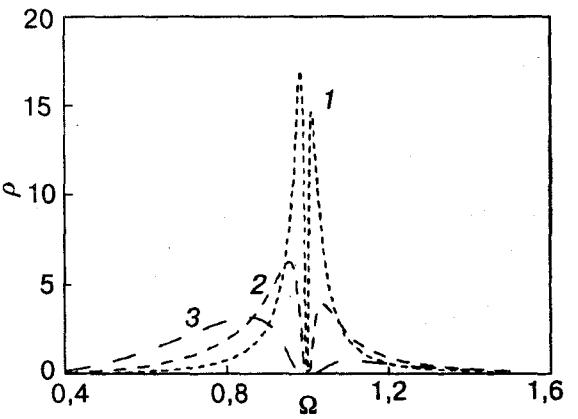

Рис. 1. Плотность вероятности $\rho(\Omega)$ при различных значениях концентрации c: 0,05 (*1*); 0,10 (*2*); 0,20 (*3*).

Что касается параметров B, R_s и R_a, мы считали их свободными и подгоняли под экспериментальные данные. В работе представлены результаты, полученные с одним набором этих параметров: $B = 0{,}9$, $R_a = 1{,}5a$, $R_s = 0{,}5a$ (a — параметр решетки матрицы). Заметим еще раз, что независимой случайной переменной является частота Ω, так что малые значения $R_{s,a}$ не противоречат модельным представлениям.

На рис. 1 и 2 представлены функции распределения $\rho(\Omega)$ и $\rho(\Delta)$ при различных значениях концентрации примесных молекул. Характер их изменения с ростом концентрации очевиден. Происходит перераспределение плотности вероятности от максимума вблизи Ω, $\Delta = 1$ ($R \to \infty$) в область определения этих функций, которая растет с увеличением концентрации дефектов. С ростом концентрации уменьшаются площади под кривыми $\rho(\Omega)$ и $\rho(\Delta)$ и увеличивается амплитуда не изображенных на графиках δ-образных вкладов на

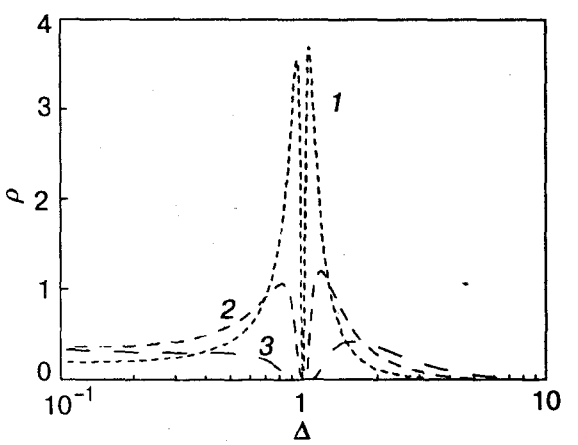

Рис. 2. Плотность вероятности $\rho(\Delta)$ при тех же значениях концентрации, что и на рис. 1. Шкала Δ изображена в логарифмическом масштабе.

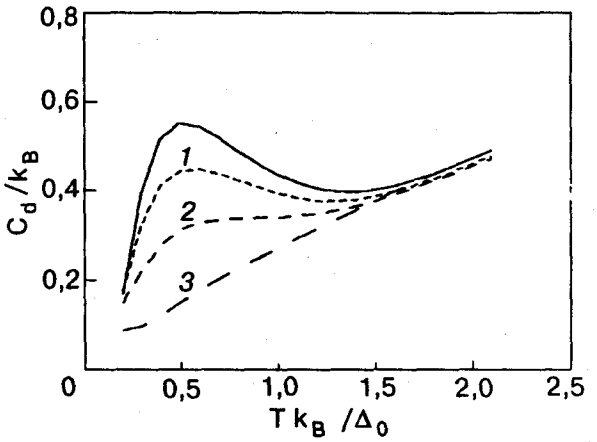

Рис. 3. Теплоемкость примесных молекул при тех же значениях концентрации, что и на рис. 1. Сплошная кривая соответствует случаю $c \to 0$.

краях функций распределения ($R = R_{a,s}$). В соответствии с изменениями $\rho(\Delta)$ меняется и зависимость $C_d(T)$ (рис. 3).

Вклады от отдельных слагаемых выражения (9) представлены на рис. 4. Интересной особенностью вклада в теплоемкость от туннельных состояний немагнитного ротатора в кристаллической матрице является закон его убывания при $T > \Delta$: $C_d(T) \sim 1/T$. На наш взгляд, это связано с тем, что в данном случае туннельное состояние и термостат (фононное поле) имеют одну природу — смещения атомов в реальном пространстве. В том же случае, когда туннельное состояние связано с не зависимой от термостата внутренней степенью свободы, например с магнитным состоянием, убывание соответствующего вклада в теплоемкость будет происходить по закону $C_d(T) \sim 1/T^2$. Такое различие

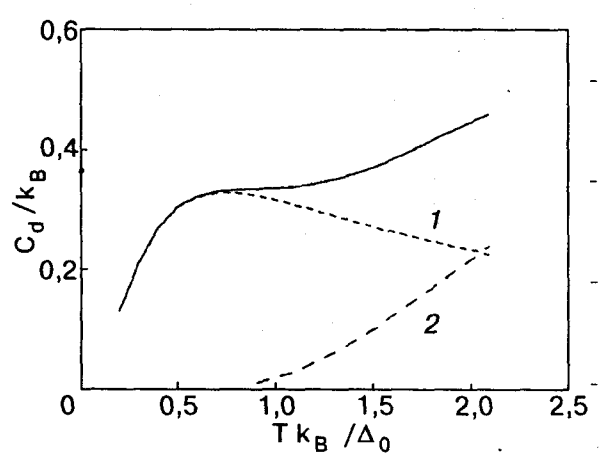

Рис. 4. Теплоемкость примесных молекул при $c = 0{,}1$ и вклады в нее от отдельных слагаемых выражения (13).

в поведении $C_d(T)$ для магнитных [7] и немагнитных [6] примесных молекул наблюдается экспериментально.

Понятно, что в работе можно было получить и количественное согласие с экспериментом путем подгонки параметров, но вряд ли это целесообразно делать в такой простой модели. Мы считаем, что адекватность использованного подхода может быть подтверждена исследованием других свойств рассматриваемых систем в рамках той же модели, чем мы и предполагаем заняться в дальнейшем.

Автор благодарит В. Г. Манжелия и М. И. Багацкого за проявленный интерес и полезные замечания.

1. М. А. Иванов, А. Я. Фишман, *ФТТ* **27**, 1334 (1985).
2. Т. Н. Анцыгина, В. А. Слюсарев, *ФНТ* **19**, 102 (1993).
3. А. Л. Бурин, *Письма в ЖЭТФ* **54**, 325 (1994).
4. М. И. Багацкий, А. М. Кривчиков, В. Г. Манжелий, *ФНТ* **13**, 423 (1987).
5. М. И. Багацкий, В. Г. Манжелий, П. И. Муромцев, И. Я. Минчина, *ФНТ* **18**, 37 (1992).
6. М. И. Багацкий, В. Г. Манжелий, М. А. Иванов, П. И. Муромцев, И. Я. Минчина, *ФНТ* **18**, 1142 (1992).
7. П. И. Муромцев, М. И. Багацкий, В. Г. Манжелий, И. Я. Минчина, *ФНТ* **20**, 247 (1994).
8. P. Dederichs and R. Zeller, *Dynamical properties of point defects in metal*, Heidelberg Verlag, Berlin (1981).
9. R. J. Elliot, J. A. Krumhansl, and P. L. Leath, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 465 (1974).
10. А. П. Жернов, Н. А. Черноплеков, Э. Мрозан, *Металлы с немагнитными примесями*, Энергоатомиздат, Москва (1992).
11. Е. И. Саламатов, *ФТТ* **33**, 2601 (1991); E. I. Salamatov, *J. Non-Cryst. Solids* (to be publ.).
12. N. M. Plakida and V. V. Ivanov, *Phys. Status Solidi* **B101**, 627 (1980).
13. Г. Лейбфрид, Н. Бройер, *Точечные дефекты в металлах*, Мир, Москва (1981).
14. У. Козман, *Введение в квантовую химию*, Изд-во иностр. лит., Москва (1960).
15. *Справочник по специальным функциям*, М. Абрамовиц и И. Стиган (ред.), Наука, Москва (1979).
16. Л. Д. Ландау, Е..М,. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).
17. Г. Лейбфрид, В. Людвиг, *Теория ангармонических эффектов в кристаллах*, Изд-во иностр. лит., Москва (1963).

Contribution of vibrational states of impurity two-atom molecules to low-temperature heat capacity of crystal

E. I. Salamatov

The dynamics of the impurity nonmagnetic linear molecules in crystal matrix has been theoretically considered using a simple model which allows to relate the tunnel states arising because of molecule rotation with the vibrations of its centre of mass. The interaction between randomly situated impurities results in the concentration dependence of the distribution function of the low-energy excitations which define an anomalous behavior of the low-temperature heat capacity of the defect crystals. The results obtained agree qualitatively to experimental data.