СПЕКТР ВОЗБУЖДЕНИЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОГО КРИСТАЛЛА $A'_xA''_{1-x}B$ С КОНЦЕНТРАЦИЕЙ ИЗОТОПИЧЕСКОЙ ПРИМЕСИ, БЛИЗКОЙ К ПОРОГУ ПРОТЕКАНИЯ

А. Л. Корженевский

Государственный электротехнический университет им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия
(Получена 30 ноября 1992 г. Принята к печати 2 декабря 1992 г.)

Методом ренормгруппы вычислена усредненная одночастичная функция Грина смешанного кубического двухатомного кристалла с содержанием изотопической примеси, близким к порогу протекания. Показано, что для длинноволновых возбуждений имеются две характеристические частоты для оптической и акустической ветвей спектра соответственно, которые разделяют фононный и фрактонный режимы. Вычислены критические индексы, описывающие плотность состояний, эффект замедления фононов и частотную зависимость среднего размера фрактонного возбуждения.

1. Исследование свойств неупорядоченных кристаллов с высокой концентрацией дефектов по-прежнему остается одной из центральных проблем физики твердого тела. Трудности, связанные с ее решением, ясно видны уже при анализе наиболее простой из относящихся к этой проблеме задач о вычислении энергетического спектра смешанных кристаллов и сплавов, не говоря уже о гораздо более сложной задаче об определении характера транспортных свойств неупорядоченной среды, включая решение проблемы локализации [1–5]. Короче говоря, для подобных задач теория возмущений в большинстве интересных случаев не работает (в частности, для значений энергий вблизи края зоны), а экстраполяционные методы типа приближения когерентного потенциала в принципе не могут гарантировать даже качественно верного описания.

Вместе с тем имеется обширная информация об энергетических спектрах различных моделей неупорядоченных сред, полученная из машинных экспериментов [1, 6, 7]. В частности, известно, что характер спектра изотопически разупорядоченных двухатомных сплавов замещения качественно изменяется, когда доля легких атомов x становится больше определенного критического значения. Последнее отвечает порогу протекания, при достижении которого в среде возникает «бесконечный» кластер (БК) атомов легкой компоненты. С увеличением концентрации при $x > x_c$ БК начинает быстро поглощать изолированные легкие кластеры, что приводит к вымиранию сложной высокочастотной структуры спектра.

В свою очередь спектр возбуждений самого БК был достаточно полно исследован в связи с изучением общей проблемы динамики стохастических фрактальных систем, для которой он является модельным объектом [8–10]. Необходимо подчеркнуть, однако, что в подавляющем большинстве работ рассматривалась предельная ситуация, когда возбуждения не могут существовать в среде, окружающей БК (например, случай фононов в высокопористой керамике [11]), и лишь изредка исследовались (численно) двухфазные среды, свойства которых тем не менее также близки к экстремальному случаю (типа тяжелого БК в матрице из очень легких атомов) [7].

Учитывая сказанное выше, в настоящей работе мы аналитически рассчитаем плотность состояний длинноволновых возбуждений смешанного кубического кристалла типа $A'_xA''_{1-x}B$ при $x \simeq x_c$ с изотопическим беспорядком в противоположном случае, т. е. когда величина относительного дефекта массы мала.

2. Характер длинноволновых гармонических возбуждений (фононов, магнонов, экситонов и электронов проводимости) в смешанных кристаллах можно установить, изучая статистические свойства соответствующих линейных стохастических дифференциальных уравнений в частных производных. Для определенности мы будем говорить о колебаниях решетки смешанного кристалла, уравнения движения которой запишем в простейшем виде

$$m_A(i)\,\ddot{u}_i^\alpha = \sum_j k_{ij}\,(u_i^\alpha - v_j^\alpha),$$

$$m_B\,\ddot{v}_i^\alpha = \sum_j k_{ij}\,(v_i^\alpha - u_j^\alpha), \tag{1}$$

где k_{ij} — константа взаимодействия, отличная от нуля для ближайших соседей, $m_A(i)$ ($m_{A'}$, или $m_{A''}$), m_B — массы, а u_i^α, v_i^α α-е компоненты смещения i-х атомов кубических подрешеток A и B. Оправданием выбора модели в столь простом виде является то обстоятельство, что большинство экспериментально изученных смешанных кристаллов относится к соединениям типа $A_xB_{1-x}C$, причем кристаллы AC и BC имеют простую структуру с двумя атомами в элементарной ячейке [12].

Так как относительный дефект массы в разупорядоченной подрешетке A предполагается малым, то качественной перестройки зонной структуры в такой модели смешанного кристалла не происходит при любых значениях концентрации x (одномодовое поведение). Несмотря на это, при $x \to x_c$ частотные зависимости плотности состояний в оптической (O) и акустической (A) зонах, а также сам характер возбуждений в них существенно изменяется.

3. Чтобы показать это, рассмотрим сначала возбуждения вблизи центра зоны, когда дискретные уравнения (1) можно заменить на стохастические дифференциальные со случайной плотностью $\rho_A(\mathbf{r})$. Их (6×6)-матричная функция Грина $G^0_{\alpha\beta}$ в нулевом приближении получается в результате замены $\rho_A(\mathbf{r})$ в (1) на среднее значение ρ_A и обращением соответствующей матрицы. При этом фурье-образ $G^0_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$ распадается на три эквивалентных (2×2)-блока $g^0_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)$, что отражает вырождение A- и O-фононных ветвей. Применение итерационной процедуры к уравнению Дайсона для полной функции Грина $G^0_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$ —

$$G^{-1}_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\ \omega) = G^{0^{-1}}_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\ \omega) - \dot{V}_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\ \omega). \tag{2}$$

— показывает, что и эта функция имеет такую же матричную структуру, следовательно, достаточно рассматривать один ее (2×2)-подблок $g^0_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$ с $v_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) \sim \omega^2\beta_{\alpha,1}$, $\alpha, \beta = 1, 2$.

Положение особенностей усредненной по флуктуациям $\rho_A(\mathbf{r})$ матрицы $\langle g_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\omega)\rangle$ определяет закон дисперсии длинноволновых возбуждений смешанного кристалла, а значение шпура $\langle g_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}=0,\ \omega)\rangle$ — их плотность состояний.

Итерируя и усредняя по случайному полю $\rho_A(\mathbf{r})$ решение системы стохастических уравнений, возникающей из (1) в континуальном пределе, можно стандартным образом получить диаграммный ряд для $\langle g_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)\rangle$ [13].

Приведем полезное при вычислении графиков для $\langle g_{\alpha\beta}\rangle$ выражение функции $g^0_{11}(\mathbf{q}, \omega)$ в окрестности ее полюсов $\omega = \omega_{A,O}(\mathbf{q})$:

$$g^0_{11}(\mathbf{q},\ \omega) = \frac{2k}{\Omega_0^2}\left\{\frac{(\rho_B/\bar{\rho}_A)}{\omega^2 - \omega_O^2(\mathbf{q})} + \frac{1}{\omega^2 - \omega_A^2(\mathbf{q})}\right\}, \tag{3}$$

где $\Omega_0 = \omega_O\ (\mathbf{q} = 0)$ — край O-зоны в приближении виртуального кристалла. Ряд для $\langle g_{\alpha\beta}\rangle$ содержит также многоточечные корреляторы $\langle\rho_A(\mathbf{q}_1),\ \ldots,\ \rho_A(\mathbf{q}_n)\rangle$, поведение которых в интересующей нас области концентраций $x \simeq x_c$ известно из решения континуальной задачи теории протекания. В частности, фурье-образ парного коррелятора

$$K_2(\mathbf{q},\ R) = \langle\rho_A(\mathbf{q})\,\rho_A(-\mathbf{q})\rangle - \bar{\rho}_A^2\delta(\mathbf{q})$$

обладает асимптотиками того же вида, что и коррелятор тепловых критических флуктуаций вблизи точек фазовых переходов второго рода:

$$K_2(q,\ R) \sim (q^2 + R^{-2})^{-1},\ q \ll R^{-1},$$

$$K_2(q,\ R) \sim q^{-2+\eta},\ q \gg R^{-1}, \tag{4}$$

где $R = R_0|x - x_c|^{-\nu}$ — средний размер перколяционных кластеров, ν и η — критические индексы теории протекания, причем в трехмерном случае $\nu \simeq 0.9$, а в случае индекса Фишера η отрицателен (в отличие от ситуации для фазового перехода второго рода), но численно мал.

Используя асимптотику (4), можно уже в рамках учета лишь гауссовых графиков убедиться в ограниченной применимости теории возмущений для расчета $\langle g_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\ \omega)\rangle$. Действительно, нетрудно показать, что выражения для сдвигов полюсов в $g^0_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\ \omega)$ могут быть представлены в виде степенных рядов по безразмерным параметрам f_A и f_O:

$$f_A = \frac{(\Delta\rho_A^2/\bar{\rho}_A^2)(\omega_A R_0)(\omega_A R)}{8\pi},$$

$$f_O = \frac{(\Delta\rho_A^2/\bar{\rho}_A^2)(\Omega_0 R_0)(\Omega_0 R)}{8\pi\ [(\Omega_0/\omega)^2 - 1]}, \tag{5}$$

где $\Delta\rho_A^2$ — квадрат дисперсии плотности $\rho_A(\mathbf{r})$,

$$\omega_A^2(q) = k\,(qR_0)^2/(\bar{\rho}_A + \rho_B),\ \Omega_0^2 = k\,(\bar{\rho}_A^{-1} + \rho_B^{-1}).$$

Таким образом, в окрестности порога протекания, где размер $R(x)$ быстро возрастает и значения параметров f_A, f_O становятся большими единицы, теория возмущений оказывается неприменимой. При этом из (5) очевидно, что для анализируемых нами длинноволновых возбуждений величина $f_O \gg f_A$, и, следовательно, область сильной связи для O-ветви спектра гораздо шире, чем для A-ветви. Кроме того, как будет показано далее, сам характер возбуждений A- и O-ветвей в смешанном кристалле также различен. Отметим, что эти выводы остаются в силе и при феноменологическом учете слабого затухания в уравнениях (1).

Сравнивая структуру итерационных рядов теории возмущений для различных элементов $\langle g_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\ \omega)\rangle$, мы замечаем, что между ними имеются простые точные связи, наличие которых позволяет свести задачу к вычислению лишь одного из них, например $\langle g_{11}(\mathbf{q},\ \omega)\rangle$:

$$\langle g_{22}\rangle = -\ (g^0_{12})^{-1}\det g^0_{\alpha\beta} + w_0^2\langle g_{11}\rangle,$$

$$\langle g_{12}\rangle = w_0\langle g_{11}\rangle,\quad w_0 \equiv g^0_{12}/g^0_{11}. \tag{6}$$

В свою очередь нетрудно проверить, что при интересующих нас значениях частот $\omega = \omega_A(q)$, $\omega_O(q)$ сингулярные при $x \to x_c$ вклады разложения для $\langle g_{11}(\mathrm{q}\ \omega)\rangle$ совпадают с соответствующими итерационными рядами для функций Грина $\langle g_{A,O}(\mathrm{q},\ \omega)\rangle$ двух скалярных волновых уравнений в перколяционной среде:

$$\{\omega^2_{O,\,A}(\mathrm{q} = i\nabla) - \omega^2 - [\Delta\rho(\mathbf{r})/\bar{\rho}_{\mathrm{A}}]\,\omega^2\}\,\varphi(\mathbf{r},\ \omega) = J. \tag{7}$$

В работе [14] задача о вычислении усредненной функции Грина стохастических уравнений типа (7) была представлена в гамильтоновой форме. Было также показано, что соответствующий эффективный гамильтониан может быть перенормирован, и при размерности пространства $d = 3$ обладает устойчивой фиксированной точкой для возбуждений сплошного спектра. Последнее обстоятельство обеспечивает существование скэйлинговых решений уравнений ренорм-группы для ренорм-инвариантных величин, в том числе для функции Грина. Возможность ее вычисления в виде разложения по степеням инвариантного заряда позволяет осуществить эффективное суммирование рядов теории возмущений [14, 15].

Используя полученные в [14, 15] результаты, можно утверждать, что при $x \simeq x_c$ для A- и O-ветвей возбуждений имеются характеристические значения частот ω^*_A, ω^*_O, такие как

$$\omega^*_A \sim |x - x_c|^{(6-d-\eta)(\nu/2)},\quad \tilde{\Omega}_0 - \omega^*_O \sim \omega^*_A,$$

где d — размерность пространства, $\tilde{\Omega}_0$ — сдвинутый за счет ренормировки верхний край O-зоны.

При этом для частот $\omega \gg \omega^*_A$, $\omega \ll \tilde{\Omega}_0 - \omega^*_O$ асимптотики функций Грина имеют вид

$$g_{A,\,O}(q,\ \omega) \sim (q^2 - m^2_{A,\,O})^{-1-\delta},\quad \delta = (4-d)/2,$$

$$m^2_A \sim \omega^{2-\alpha}e^{j\pi\alpha},\quad m^2_O \sim (\tilde{\Omega}_0 - \omega)^{2-\alpha}e^{j\pi\alpha},$$

$$\alpha = (4-d-\eta)/(6-d-\eta). \tag{8}$$

Из формул (8) видно, что для $d = 3$ мнимые части значений координат точек ветвления $g_{A,O}$ того же порядка, что и вещественные. Как обсуждалось в [15], аномальные законы дисперсии возбуждений $q^2 = m^2_{A,O}$ и появление больших мнимых частей у $m_{A,O}$ соответствуют изменению характера колебаний смешанного кристалла при $\omega \gg \omega^*_A$, $\omega \ll \tilde{\Omega}_0 - \omega^*_O$ с фононного на фрактонный.

Вычисляя плотность состояний $N(\omega,\ x - x_c)$ с помощью стандартной формулы

$$N(\omega,\ x - x_c) = (-2\omega/\pi)\ \mathrm{Im}\int\langle g_{\alpha\alpha}(g,\ \omega)\rangle d^dq, \tag{9}$$

получим плотность состояний фрактонных локализованных возбуждений для A- и O-ветвей (в сплошной части спектра) соответственно в виде

$$N^A_{\mathrm{fr}}(\omega \gg \omega^*_{\mathrm{A}}) \sim \omega^{d(1-\alpha)-1} \equiv \omega^{d_s-1}, \tag{10а}$$

$$N^O_{\mathrm{fr}}(\omega \ll \tilde{\Omega}_0 - \omega^*_O) \sim (\tilde{\Omega}_0 - \omega)^{-\alpha d}N^O_{vc}(\omega), \tag{10б}$$

где $N_{\rm vc}^O(\omega)$ — плотность O-фононов виртуального кристалла. Для частот $\omega \ll \ll \omega_A^*$, $\omega \gg \widetilde{\Omega}_0 - \omega_O^*$ асимптотики функций Грина g_A, g_O различны:

$$g_O(\mathbf{q},\ \omega) \sim (q^2 - \widetilde{m}_O^2)^{-1}, \tag{11}$$

$$\widetilde{m}_O^2 \sim (\omega_O^* - \widetilde{\Omega}_0)^2(\omega - \widetilde{\Omega}_0)^2 \sim |x - x_c|^{3 - \eta/2}(\omega - \widetilde{\Omega}_0)^2,$$

$$d = 3,$$

т. е. полюс g_O по-прежнему лежит на вещественной оси, но имеет место критическое замедление O-фононов, в то время как обусловленные рэлеевским рассеянием длинноволновых A-фононов поправки малы и поэтому $\langle g_A(\mathbf{q},\ \omega)\rangle \simeq \simeq g_A^0(\mathbf{q},\ \omega)$ в этом (фононном) режиме. Соответственно вклад в плотность состояний от O-фононов приобретает резкую зависимость от близости к порогу протекания:

$$N_{\rm ph}^O(\omega \gg \widetilde{\Omega}_0 - \omega_0^*) \sim (\widetilde{\Omega}_0 - \omega_O^*)^{d_s - d} N_{\rm vc}^O(\omega) \sim R^{\frac{3}{2}(1-\eta)} N_{\rm vc}^O(\omega), \tag{12}$$

а величина вклада A-фононов слабо зависит от нее.

Из формул (10), (12) мы видим, что в сильно неупорядоченной среде, какой является смешанный кристалл при концентрациях, близких к порогу протекания, плотность длинноволновых состояний вблизи края сплошного спектра сильно возрастает. Из предыдущего очевидно, что такой же вывод может быть сделан относительно возбуждений в окрестности любого экстремума спектра виртуального кристалла, например в нашей простой модели (1) он относится к экстремумам A- и O-ветвей на краю зоны.

4. В ионных кристаллах вырождение спектров O-фононов, разумеется, снимается. Нетрудно, однако, проверить, что для кубического полярного смешанного кристалла с примесью изотопического типа асимптотики плотностей состояний LO- и TO-фононов совпадают с (10б) (с точностью до очевидных сдвижек $\Omega_0 \to \Omega_{LO}$, Ω_{TO}).

Действительно, анализируя характер инфракрасных расходимостей в графиках теории возмущений для поперечной и продольной функций Грина в областях сплошного спектра и буквально повторяя приведенную в [14, 15] ренормировочную процедуру, убеждаемся, что критическое поведение вблизи порога протекания управляется прежней устойчивой фиксированной точкой. Соответственно остаются неизменными и значения критических индексов в (8), (10), (12).

В то же время ситуация качественно изменяется для длинноволновых дипольно-активных возбуждений в низкосимметричных ионных смешанных кристаллах, например, одноосных, где инфракрасные расходимости сильно подавлены [16, 17] (мы не будем здесь обсуждать роль эффектов сильного экранирования за счет перезарядки примесных ионов, которые могут приводить к сложным кроссоверным режимам). Это обстоятельство позволяет вычислить среднюю функцию Грина полярных оптических фононов одноосных кристаллов в широкой области спектра [17]. Отметим, однако, что эта функция была найдена в [17] для δ-образного коррелятора случайного потенциала, что отвечает случаю низкой концентрации примесей, а вопрос о спектре одноосного смешанного кристалла с высокой концентрацией остается открытым.

В настоящей работе мы ограничились вычислением усредненной функции Грина смешанных кристаллов лишь в области сплошного спектра, где ее асимптотическое поведение в окрестности порога протекания контролируется инфракрасно-устойчивой фиксированной точкой уравнений ренормгруппы. Для значений частот, относящихся к запрещенной зоне, эта точка оказывается недостижимой, поскольку затравочное значение соответствующего инвариантного заряда становится отрицательным (в то время как координата фиксированной точки положительна [14]). Таким образом, задача о вычислении плотности состояний в запрещенной зоне заслуживает отдельного рассмотрения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Теория и свойства неупорядоченных материалов (под ред. В. Л. Бонч-Бруевича). М. (1977).
[2] J. L. Cardy. J. Phys. C, 11, L321 (1978).
[3] В. Е. Кравцов, И. В. Лернер. ЖЭТФ, 88, 1281 (1985).
[4] Б. Л. Альтшулер, Б. И. Шкловский. ЖЭТФ, 91, вып. 7, 220 (1986).
[5] K. C. Chang, T. Odagaki. Phys. Rev. B, 35, 2598 (1987).
[6] K. Yakubo, T. Nakayma. J. Phys. Soc. Japan, 58, 1504 (1989).
[7] S. Russ, H. E. Roman, A. Bunde. J. Phys.: Condens Matter., 3, 4797 (1991).
[8] B. Derrida, R. Orbach, K. Yu. Phys. Rev. B, 29, 6645 (1984).
[9] T. Nakayma, K. Yakubo, R. Orbach. Phys. Rev. Lett., 58, 1891 (1989).
[10] J. P. Clerc, G. Giraud, I. M. Laugier, J. M. Luck. Adv. Phys., 39, N 3, 191 (1990).
[11] G. Gaillard-Groleas, M. Lagier, D. Sornette. Phys. Rev. Lett., 64, 1577 (1991).
[12] Х. Беттер. Принципы динамической теории решетки. М. (1986).
[13] С. М. Рытов, Ю. А. Кравцов, В. И. Татарский. Введение в статистическую радиофизику. Ч. II. М. (1978).
[14] А. Л. Корженевский, А. А. Лужков. ЖЭТФ, 97, 707 (1990).
[15] А. Л. Корженевский, А. А. Лужков. ЖЭТФ, 99, 530 (1991).
[16] А. И. Ларкин, Д. Е. Хмельницкий. ЖЭТФ, 56, 2087 (1969).
[17] И. П. Ипатова, В. А. Щукин. ЖЭТФ, 97, 990 (1990).

Редактор Л. В. Шаронова