

©1994

## ОСОБЕННОСТИ ФОНОННОГО СПЕКТРА НЕУПОРЯДОЧЕННОГО АНГАРМОНИЧЕСКОГО КРИСТАЛЛА

*А.П.Жернов, Е.П.Чулкин*

Рассмотрено влияние флуктуаций фононной плотности на колебательный спектр ангармонических кристаллов с тяжелыми или слабосвязанными примесями в условиях слабой и сильной локализации. Показано, что флуктуации приводят к конечным перенормировкам звуковых мод, если имеет место кросс-расщепление щели вблизи дна зоны. Обсуждаются особенности спектра коэффициента диффузии.

В настоящее время активно обсуждается вопрос о локализации фононных мод, а также звуковых и световых волн в неупорядоченных системах. Ряд общих вопросов изучен в [1-5]. В этой связи отметим, что недавно случай фононной системы с диагональным беспорядком тщательно исследован в рамках приближения когерентного потенциала в [6]. При этом количественно проанализированы ситуации, возникающие при конечной и бесконечной массах точечных дефектов. Выделим здесь еще работу [7], в которой обращено внимание на специфические локализационные явления, которые могут иметь место в ангармонических системах. В [7] указано на некоторую аналогию между ангармоническими фононными модами в решетке с точечными дефектами и электронным газом с кулоновским взаимодействием, отмечаются и различия. Во-первых, отличаются статистики и законы дисперсии для электронов и фононов. Во-вторых, параметры электронного спектра, как правило, определяются вблизи уровня Ферми и описываются гладкими функциями. В то же время низкочастотные характеристики фононов, а также эффективная ангармоническая константа взаимодействия могут сильно зависеть от частоты. Как известно, для электронного газа соответствующая проблема достаточно изучена. В случае ангармонических мод ситуация исследована не столь полно.

В наших предыдущих работах [8] мы проанализировали вопрос о локализации в неупорядоченной гармонической системе. Была принята следующая модель. А именно концентрация примесей предполагалась малой, но тем не менее учитывались динамические корреляции между возмущенными областями. Масса примеси считалась весьма большой. Так что имело место кросс-расщепление спектра в звуковой области. Рассматривались случаи как диагонального, так и недиагонального беспорядка. Было показано, что интерференционные поправки к времени жизни квазичастиц и коэффициенту диффузии име-

ют конечное значение в области локализации. Заметим, что случай кросс-расщепления в условиях диагонального беспорядка рассмотрен также в [9].

Целью данной работы является рассмотрение явления локализации в фоновой ангармонической системе с точечными дефектами. Мы основываемся на модели с диагональным беспорядком. Полученные результаты обобщаются на случай недиагонального беспорядка. Подробно анализируется случай бесконечно большой массы примеси. При этом мы пренебрегаем различием между ангармоническими силовыми постоянными для регулярной и дефектной систем. Ситуация, когда имеет место сильное локальное возмущение ангармонического взаимодействия, требует специального обсуждения. Конкретно нами определяется одночастичная функция Грина. Знание ее позволяет найти в районе кросс-щели плотность фоновых состояний, групповую скорость, а также время жизни фононов. В принципе это дает возможность оценить такие величины, как теплоемкость и теплопроводность.

Отметим, что результаты работ по локализации фононов часто используют для качественного анализа динамики аморфных материалов. В настоящее время для таких материалов обсуждается теория, в которой фигурирует понятие о мягких атомных конфигурациях. Низкочастотные моды, отвечающие таким конфигурациям, являются локализованными. По теоретическим оценкам, в формировании локализованных мод участвует от десяти до ста атомов [10]. Иными словами, для этих мод эффективная масса аномально большая. Кроме того, при изучении динамики подобных неупорядоченных систем отмечается важность учета их собственного ангармонизма. На основе его развит феноменологический подход [11,12], одновременно описывающий туннельные и низкочастотные ангармонические возбуждения. Обсуждаются также микроскопические модели [13]. Мы полагаем, что развитая нами теоретическая модель в некоторой степени может относиться к их числу.

## 1. Общие соотношения для массового оператора

Рассмотрим кристалл с изолированными примесными атомами. Будем описывать его динамические свойства гамильтонианом вида

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

где

$$H_0 = \frac{1}{2M} \sum_{\mathbf{s}, \alpha} (p_{\mathbf{s}}^{\alpha})^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{s}, \mathbf{s}' \\ \alpha, \beta}} \Phi_{\mathbf{ss}'}^{\alpha\beta} u_{\mathbf{s}}^{\alpha} u_{\mathbf{s}'}^{\beta},$$

$$H_{\text{imp}} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{M} - \frac{1}{M} \right) \sum_{\mathbf{s}, \alpha} c_{\mathbf{s}} (p_{\mathbf{s}}^{\alpha})^2 - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{s}, \mathbf{s}' \\ \alpha, \beta}} \Delta \Phi_{\mathbf{ss}'}^{\alpha\beta} u_{\mathbf{s}}^{\alpha} u_{\mathbf{s}'}^{\beta},$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{4!} \sum_{\substack{\mathbf{s} \dots \mathbf{s}'''' \\ \alpha \dots \delta}} \Phi_{\mathbf{ss}'\mathbf{s}''\mathbf{s}'''}^{\alpha\beta\gamma\delta} u_{\mathbf{s}}^{\alpha} u_{\mathbf{s}'}^{\beta} u_{\mathbf{s}''}^{\gamma} u_{\mathbf{s}'''}^{\delta},$$

$$\Delta\Phi_{ss'}^{\alpha\beta} = \Phi_{ss'}^{\alpha\beta} - \overset{\circ}{\Phi}_{ss'}^{\alpha\beta}. \quad (1)$$

Здесь  $H_0$  — гамильтониан невозмущенной гармонической атомной системы,  $H_{\text{imp}}$  — возмущение из-за примесей в этой системе;  $H'$  — гамильтониан гармонической неидеальной системы;  $H_{\text{int}}$  — динамическое ангармоническое межзонное взаимодействие. Как обычно, величины  $u_s^\alpha$  и  $p_s^\alpha$  — декартовы компоненты операторов смещения и импульса  $s$ -атома;  $M$  — масса примесного атома, которая пока считается весьма большой, но конечной, т.е.  $M \gg \overset{\circ}{M}$ ;  $\Phi^{(2)}$  и  $\Phi^{(4)}$  — матрицы силовых параметров второго и четвертого порядков. При этом индексом 0 помечаются параметры регулярной системы. Фактор  $c_s = 0$ , если в узле  $s$  находится атом матрицы, и  $c_s = 1$ , если в этом узле точечный дефект. Конфигурационное среднее  $\langle c_s \rangle_c = c$ , т.е. равно концентрации примесей.

Для простоты в дальнейшем предполагается, что матрицы  $\Phi^{(2)}$  и  $\Phi^{(4)}$  диагональны по декартовым индексам. Удобно значком  $s = s, \alpha$  обозначить совокупность узельного  $s$  и декартова  $\alpha$  индексов.

Как отмечалось, при проведении расчетов (см. раздел 2) считается, что беспорядок является диагональным, т.е. примеси рассматриваются как изотопические дефекты. При этом мы не делаем различия между  $\Phi^{(4)}$  и  $\overset{\circ}{\Phi}^{(4)}$ . Таким образом, ниже учитывается только ангармонизм матрицы. Полученные результаты можно обобщить на случай недиагонального беспорядка, когда  $\Delta\Phi^{(2)} \neq 0$ .

Одночастичная запаздывающая функция Грина  $G_{ss'}^+$ , собранная на операторах смещений  $u_s$ , определяется выражением вида

$$G_{ss'}^+(t) = \left\langle \left\langle u_s(t), u_{s'}(0) \right\rangle \right\rangle = -i\Theta(t) \left\langle [u_s(t), u_{s'}(0)] \right\rangle,$$

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1, & t > 0, \\ 0, & t < 0. \end{cases}$$

Символ  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по равновесному термодинамическому ансамблю.

Получим для функции  $G^+$  уравнение типа Дайсона. С использованием гамильтониана (1) и правил коммутации для Фурье-компоненты функции, зависящей от времени

$$G_{ss'}(\omega) = \left\langle \left\langle u_s(t), u_{s'}(0) \right\rangle \right\rangle_\omega,$$

непосредственно имеем

$$G_{ss'}^+(\omega) = \overset{\circ}{G}_{ss'}^+(\omega) + \sum_{s_1} \overset{\circ}{G}_{ss_1}(\omega) V_{s_1 s_2} G_{s_2 s'}^+(\omega) + \frac{1}{6} \sum_{s_1 \dots s_4} \overset{\circ}{G}_{ss_1}^+(\omega) \Phi_{s_1 s_2 s_3 s_4}^{(4)} G_{s_2 s_3 s_4 s'}(\omega), \quad (2)$$

где  $\overset{\circ}{G}$  и  $V$  — функция Грина регулярной решетки и оператор возмущения. С использованием оператора  $V$  описываются флуктуации значений атомной массы

$$V_{s_1 s_2} = \overset{\circ}{M} \varepsilon \omega^2 \delta_{s_1 s_2}, \quad \varepsilon = \frac{\overset{\circ}{M} - M}{M}.$$

Что касается последнего слагаемого в уравнении (2), то посредством его учитывается ангармонизм решетки

$$G_{s_2 s_3 s_4 s'}(\omega) = \left\langle \left\langle u_{s_1}(t) u_{s_2}(t) u_{s_3}(t) u_{s_4}(0) \right\rangle \right\rangle_{\omega}.$$

Наряду с (2) напишем уравнение для функции  $G_{ss'}^+$ , у которой один из узельных индексов отвечает позиции  $d$ , занятой примесью. Представим его в форме, в которой фигурирует одноузельная  $t$ -матрица рассеяния. С целью сокращения записи опустим аргумент  $\omega$ . Имеем

$$c_s G_{ss'}^+ = \overset{\circ}{\mu} G_{ss'}^+ + t \sum_{s \neq s_1} \overset{\circ}{G}_{ss_1}^+ c_{s_1} G_{s_1 s'}^+ + \mu \sum_{s_1 \neq \dots s_4} \overset{\circ}{G}_{ss_1}^+ \Phi_{s_1 s_2 s_3 s_4}^{(4)} G_{s_2 s_3 s_4 s'}^+,$$

$$\mu = \left( 1 - \overset{\circ}{M} \varepsilon \omega^2 \overset{\circ}{G}_{ss}^+ \right)^{-1}, \quad t = \overset{\circ}{M} \varepsilon \omega^4 \mu. \quad (3)$$

В (3) точно учтено рассеяние на изолированных дефектах. В суммах отражен факт возможности повторного рассеяния на узле  $d_1$  после промежуточного рассеяния на узле  $d_2 \neq d_1$ .

Перепишем (2) с использованием (3) в виде разложения по параметру  $c_s$ . Можно показать, что

$$G_{ss'}^+ = \overset{\circ}{G}_{ss'}^+ + t \sum_{s_1 (s \neq s_1)} \overset{\circ}{G}_{ss_1}^+ c_{s_1} G_{s_1 s'}^+ + t^2 \sum_{\substack{s_1, s_2 \\ s_1 \neq s, s_1 \neq s_2}} \overset{\circ}{G}_{ss_1}^+ c_{s_1} \overset{\circ}{G}_{s_1 s_2}^+ c_{s_2} G_{s_2 s'}^+ + \dots +$$

$$+ \frac{1}{6} \sum_{s_1 \dots s_4} \overset{\circ}{G}_{ss_1}^+ \Phi_{s_1 s_2 s_3 s_4}^{(4)} G_{s_2 s_3 s_4 s'}^+ + \frac{t}{6} \sum_{s_1 \dots s_5} \overset{\circ}{G}_{ss_1}^+ c_{s_1} \overset{\circ}{G}_{s_1 s_2}^+ \Phi_{s_2 s_3 s_4 s_5}^{(4)} G_{s_3 s_4 s_5 s'}^+ + \dots \quad (4)$$

Упростим теперь правую часть (4), полагая

$$G_{s_1 s_2 s_3 s_4}^+ \cong \langle u_{s_1} u_{s_2} \rangle G_{s_3 s_4}^+ + \langle u_{s_1} u_{s_3} \rangle G_{s_2 s_4}^+ + \langle u_{s_2} u_{s_3} \rangle G_{s_1 s_4}^+. \quad (5)$$

Подобную аппроксимацию заведомо можно осуществить, если ангармонизм слабый. После подстановки (5) в (4) и проведения усреднения по примесным конфигурациям получим для гриниана  $G^+$  уравнение, которое в символической форме имеет вид

$$G^+ \cong \bar{G}^+ + \bar{G}^+ \frac{\Phi^{(4)}}{2} \langle \langle uu \rangle G^+ \rangle_c. \quad (6)$$

Здесь  $G$  — усредненная одночастичная функция Грина, отвечающая гамильтониану  $H'$ . Фактор

$$\langle u_s u_{s'} \rangle = \frac{1}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \bar{n}(\omega) (G_{ss'}^+(\omega) - G_{ss'}^-(\omega)),$$

$$\bar{n}(\omega) = \left( n(\omega) + \frac{1}{2} \right), \quad n(\omega) = (e^{\omega/T} - 1)^{-1},$$

при этом в правой части (6) появляется двухчастичный гриниан  $G_2 = \langle GG \rangle_c$ .

Подчеркнем, что второе слагаемое в уравнении (6) представляет собой произведение элементов ангармонической матрицы  $\Phi^{(4)}$ , одночастичной и двухчастичной функции Грина. Фактически оно характеризует ангармоническую связь между однофононными возбуждениями и флуктуациями фононной плотности.

Отметим, что пространственная Фурье-компонента функции Грина  $\bar{G}^+$  может быть записана как

$$\bar{G}_k^+(\omega) = \left( \omega^2 - \omega_k^2 - P(\omega) - \frac{i\omega}{\tau_i} \right)^{-1}. \quad (7)$$

Здесь  $\omega_k$  — частота фононной моды невозмущенной системы,  $P(\omega)$  и  $\omega/\tau_i$  — реальная и мнимая части примесного массового оператора  $\Sigma^{\text{imp}}(\omega)$ . В линейном по  $c$  приближении  $\Sigma^{\text{imp}}(\omega)$  не зависит от квазиимпульса  $k$ . В то же время во втором и более высоких порядках по  $c$  такая зависимость возникает. Однако если мы ограничиваемся низкими частотами, то  $\Sigma^{\text{imp}}(\omega)$  можно считать функцией только от  $\omega$ .

В дальнейшем  $G^+$  представляется в «квазичастичной» форме

$$\bar{G}_k^+(\omega) = Q(\omega) \left( \omega^2 - \tilde{\omega}_k^2 - \frac{i\omega}{\tau_{i'}} \right)^{-1}, \quad (8)$$

где  $\tilde{\omega}_k$  — закон дисперсии,  $\tau_{i'} = Q^{-1}\tau_i$  — время жизни квазичастиц, фактор  $Q$  равен

$$Q(\omega) = \left( 1 - \frac{\partial P(\omega)}{\partial \omega^2} \right)^{-1}.$$

Принимая во внимание сказанное, рассмотрим уравнение для функции  $G_2$ . При определении  $G_2$  пренебрежем ангармонизмом. Тогда в графическом представлении имеем

$$\langle G_{ss_1}^+ G_{s_1' s'}^+ \rangle_c =$$

$$+ \dots \quad (9)$$

Здесь  $\circ_s \Rightarrow \circ_s$  — одночастичная функция Грина  $G_{ss}^+$ , неидеальной системы; штриховой линии отвечает множитель  $\Gamma = ct^+t^-$ , где  $t^\pm = M\varepsilon\omega^2(1 - M\varepsilon\omega^2 G_{ss}^\pm)^{-1}$ . Если воспользоваться определением  $G^+$  в виде (8), то выражение для вершины записывается как

$$\Gamma(\omega) = \omega \left( \pi T_{i'}(\omega) g(\omega^2) \right)^{-1}, \quad g(\omega^2) = Q\bar{g}(\omega^2). \quad (10)$$

Заметим, что

$$\bar{g}(\omega^2) = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{k}}^2)$$

есть плотность квазичастиц с импульсом  $\mathbf{k}$  и энергией  $\tilde{\omega}_{\mathbf{k}}$ . Поэтому  $\bar{g}(\omega^2)$  не является истинной плотностью состояний нерегулярной решетки. Она может существенным образом отличаться от низкочастотной плотности

$$g'(\omega) \sim \omega^2 \left( 1 + \frac{3}{2}\varepsilon c \right),$$

фигурирующей в проблеме теплоемкости.

Перейдем от узельного представления для  $G_2 = \langle G^+ G^- \rangle_c$  к импульсному представлению. В общем случае

$$\begin{aligned} G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) &= \lim_{\Omega \rightarrow 0} \left\langle G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^+(\omega) G_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}(\omega - \Omega) \right\rangle_c = \\ &= \lim_{\Omega \rightarrow 0} \left\{ G_{\mathbf{k}}^+(\omega) G_{\mathbf{k}}^-(\omega - \Omega) \left( \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}(\omega, \Omega) G_2(\mathbf{k}\mathbf{k}'; \omega, \Omega) \right) \right\}. \quad (11) \end{aligned}$$

Подобные уравнения называют уравнениями типа Бете-Солпитера. В пределе малых  $q$  и частот основной вклад во второе слагаемое в (11) дает область низких частот. При этом оказывается, что вершинная часть  $U$  в (11) определяется диаграммами «вверного» типа [6,8]. В результате суммирования подобных диаграмм для обобщенной вершины получаем

$$U(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega, \Omega) = LN^{-1} \left\{ 1 - LN^{-1} \sum_{\mathbf{k}_1} \bar{G}_{\mathbf{k}_1}^+(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}}^-(\omega - \Omega) \right\}^{-1}, \quad (12)$$

где  $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ . Если в разложении типа (4) пренебречь условиями  $s_1 \neq s_2, s_1 \neq s_2 \neq s_3$  и т.д., то  $L = \Gamma$ . При учете названных условий

$$L = \Gamma (1 + \Gamma \bar{G}_{ss}^+ \bar{G}_{ss}^-)^{-1}.$$

Иными словами, перенормировка затравочной вершины  $\Gamma(\omega)$  в эффективную вершину  $L(\omega)$  обусловлена исключением влияния так называемого эффекта многократного заполнения узлов (т.е. попадания двух и более примесей в один узел).

Приведем явные выражения для вершины  $U$  при

$$ql(\omega) \ll 1, \quad |\omega - \omega_1, \tau| \ll 1, \quad (13)$$

$l(\omega) = v(\omega)\tau(\omega)$  — упругая длина свободного пробега,  $v$  — групповая скорость квазичастиц. Согласно [8], имеем

$$V(q, \omega, \omega_1) \cong \frac{\omega}{\pi\tau_{i'}(\omega)\tau_{i'}(\omega)} \frac{Q(\omega)}{g(\omega^2)} \frac{1}{\overset{\circ}{D}(\omega)q^2 - i(\omega - \omega_1)}, \quad (14)$$

где  $D_0 = v^2\tau_{i'}/3$  — стандартный коэффициент диффузии.

Возможна ситуация, когда в некотором интервале частот истинный коэффициент диффузии  $D$  обращается в нуль, т.е. реализуется локализационный режим. Фактически речь идет о том, что вблизи частоты  $\omega_*$  флуктуации фоновой плотности оказываются локализованными.

Именно в таком случае следует учесть отличие коэффициента  $D$  от  $\overset{\circ}{D}$ , в результате чего перенормируется вершинная часть, причем [14]

$$\tilde{V}(\mathbf{q}, \omega, \omega_1) \approx \frac{v^4\omega}{9\pi D^2(\omega, \omega_1)} \frac{Q(\omega)}{g(\omega^2)} \frac{1}{D(\omega, \omega_1)q^2 - i(\omega - \omega_1)}. \quad (14a)$$

С использованием полученных соотношений для  $G_2$  для пространственной Фурье-компоненты одночастичной функции Грина имеем в импульсном представлении следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\mathbf{k}}(\omega) \cong & \bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega) + \bar{G}_{\mathbf{k}}^{+2} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \bar{n}(\omega_1) \sum_{\mathbf{q}} \Phi_{\mathbf{k}, -\mathbf{q}, \mathbf{q}, -\mathbf{k}} \text{Im} \tilde{G}_{\mathbf{q}}^+(\omega_1) - \\ & - \frac{(\bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega))^2}{2i} \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \bar{n}(\omega_1) \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}_1} \Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{q}-\mathbf{k}, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}-\mathbf{q}_1}^{(4)} \tilde{G}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}(\omega_1) \times \\ & \times V(\mathbf{q}, \omega, \omega_1) \tilde{G}_{\mathbf{q}_1}(\omega_1) \tilde{G}_{\mathbf{q}-\mathbf{q}_1}(\omega). \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь мы пренебрегли функцией  $\langle G^+ G^+ \rangle_c$ , считая ее гладкой величиной.

Второму и третьему слагаемому в (15) отвечают «ангармонические» графики рис. 1.

График на рис. 1, а является стандартным. Он характеризует перенормировку энергии фононов. График с вершиной  $U$  описывает взаимодействие виртуальных фононов с флуктуациями фоновой плотности в разупорядоченной системе. Как будет показано ниже, в условиях

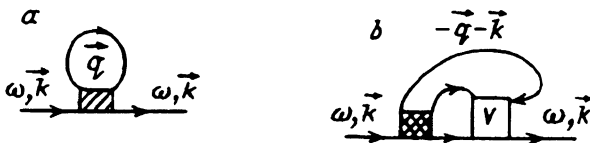


Рис. 1. Стандартный (а) и нестандартный (б) «ангармонические» графики.

кросс-расщепления спектра учет его может привести к заметной перенормировке всех основных параметров фононных мод.

Подчеркнем, что выше функция  $G^+$  и вершины  $\Gamma$  и  $U$  определялись для случая изотопических дефектов. В действительности их форма, а также уравнение (15) сохраняются и при недиагональном беспорядке. В последнем случае фактически мы должны переопределить для квазичастиц закон дисперсии, время жизни и фактор  $Q$  [8].

Получим явные выражения, которые соответствуют графикам  $a, b$  на рис. 1. При этом не будем делать различия между истинной одночастичной функцией  $\tilde{G}$  и функцией  $\bar{G}$ . Кроме того ангармоническую вершину  $\Phi^{(4)}$  зададим в форме

$$\Phi_{\mathbf{k}, -\mathbf{q}, \mathbf{q}, -\mathbf{k}}^{(4)} \cong \frac{\overset{\circ}{M} \gamma_4}{\overset{\circ}{\gamma}_2} \alpha(\omega_{\mathbf{k}}^2) \alpha(\omega_{\mathbf{q}}^2).$$

Здесь  $\gamma_2$  и  $\gamma_4$  — эффективные гармоническая и ангармоническая силовые константы. Для одноатомной решетки-матрицы

$$\alpha(\omega_{\mathbf{k}}^2) \approx \omega_{\mathbf{k}}^2.$$

Заметим, что по порядку величины

$$\frac{\gamma_4 \omega_0}{\overset{\circ}{\gamma}_2} \approx 10 \frac{\langle u^2 \rangle}{a^2} = 10 \delta_A,$$

где  $\langle u^2 \rangle$  — средний квадрат атомных смещений,  $a$  — характерное межатомное расстояние,  $\delta_A$  — параметр ангармоничности. При оценках под  $a$  понимают расстояние, на котором заметно меняется межатомный потенциал. Иными словами, в качестве  $a$  фигурирует среднее расстояние между радиусами заполненных электронных оболочек ионов, так как при соприкосновении их потенциал отталкивания начинает очень резко расти. При этом если структура плотноупакованная, то расстояние  $a$  еще меньше. В итоге параметр ангармонизма  $\delta$  может быть порядка  $10^{-1}$ , а не  $10^{-3}$  (см., например, [15]).

Принимая во внимание сказанное, определим часть массового оператора, которая соответствует графику  $a$  (рис. 1). Имеем

$$\begin{aligned} \Delta_A^{(1)}(\omega) &= \text{Re} \Sigma_A^{(1)}(\omega) = \frac{\gamma_4}{\overset{\circ}{\gamma}_2} \alpha(\omega_{\mathbf{k}}^2) \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \bar{n}(\omega_1) \times \\ &\times \int_0^{\omega_0} d\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2 g(\tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2) \alpha(\omega_{\mathbf{q}}^2) Q(\omega_1) \frac{\omega/\tau_i}{(\omega_1^2 - \tilde{\omega}_{\mathbf{q}}^2)^2 + (\omega/\tau_i)^2} \approx \\ &\approx \frac{\gamma_4}{4\overset{\circ}{\gamma}_2} \alpha(\omega_{\mathbf{k}}) \int_0^{\omega_0} \frac{d\omega_1}{\omega_1} \bar{n}(\omega_1) d(\omega_1) g(\omega_1) \end{aligned} \quad (16)$$



( $\omega_0$  — предельная частота спектра). В случае одноатомной решетки вместо (16) получаем

$$\Delta_A^{(1)} \approx \delta_A \omega_k^2 \bar{n}(\omega_k). \quad (16a)$$

Перейдем в нестандартному графику  $b$  (рис. 1), который описывает одновременно ангармонические и флуктуационные процессы. Ему приближенно соответствует выражение

$$\Sigma_A^{(2)}(\omega) \approx -\frac{\overset{\circ}{M}\gamma_4}{4\pi i \overset{\circ}{\gamma}_2^2} \int_0^\infty d\omega_1 \bar{n}(\omega_1) \alpha^2(\tilde{\omega}_k^2) \bar{G}_{-\mathbf{k}}^-(\omega_1) \bar{G}_{\mathbf{k}}^+(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}}^-(\omega_1) \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}, \omega, \omega_1). \quad (17)$$

Отметим еще, что в обсуждаемой проблеме достаточно учесть в сумме по  $q$  (17) значения импульса, ограниченные сверху величиной  $q_c \approx \pi/l(\omega)$ . При этом на частоту  $\omega_1$  наложено условие (16).

Подставим (8) и (14) в (17). Будем определять  $\Sigma_A^{(2)}$  в полюсном приближении, когда  $\omega \approx \omega_k$ . Кроме того, пусть  $\alpha^2 \approx \omega_k^2$ . Тогда после ряда преобразований получаем

$$\Sigma_A^{(2)} \approx \delta_A \frac{\omega_k^4 \bar{n}(\tilde{\omega}_k)}{\omega_0} \frac{\tilde{\omega}_k}{\tilde{g}(\tilde{\omega}_k)} \int \frac{d\omega_1^2}{\omega_1^2} Q(\omega_1) \frac{1}{\pi} \frac{\omega_1/\tau_i}{(\omega_1 - \tilde{\omega}_k^2)^2 + (\omega_1/\tau_i)^2} J(\tilde{\omega}_k, \omega_1). \quad (18)$$

Здесь мы с целью сокращения записи положили

$$J(\omega, \omega_1) = \frac{a^3}{2\pi^2} \frac{\overset{\circ}{D}^2(\omega)}{D^3(\omega, \omega_1)} \int_0^{q_c} dq \frac{q^2}{q^2 - iE}, \quad E^2 = \frac{|\omega - \omega_1|}{D(\omega, \omega_1)}. \quad (19)$$

В дальнейшем коэффициент диффузии  $D$  считается действительной величиной (см. дискуссию в [7]). Он представляется в форме

$$D = \overset{\circ}{D}(\omega) \chi_D(\omega).$$

Фактор  $\chi_D$  описывает интерференционные квантовые поправки, связанные с флуктуациями плотности. Частотное поведение его определяет порог локализации  $\omega_*$ , где  $\chi_D \rightarrow 0$ .

Мы последовательно показали в [8], что для гармонической фоновой подсистемы

$$\chi_D(\omega) = \left( 1 - \frac{3}{2\pi^2 a^{-3} \tilde{g}(\omega) v^{-3}(\omega) \tau_i^2(\omega)} \right). \quad (20)$$

Вернемся к выражениям (18) и (19). Отметим, что интеграл (19) является табличным. Он равен

$$J = \frac{a^3}{2\pi^2 \overset{\circ}{D} \chi_D^3} \left[ q_c - EZ(E, q_c) + iEZ(E, q_c) \right], \quad (19a)$$

где

$$Z(E, q_c) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left[ \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{2}E q_c}{E^2 - q_c^2} + \frac{1}{2} \ln \frac{q_c^2 + \sqrt{2}E q_c + E^2}{q_c^2 - \sqrt{2}E q_c + E^2} \right].$$

Принимая во внимание сказанное, найдем действительную часть массового оператора  $\Sigma_A^{(2)}$ , т.е.  $\Delta_A^{(2)}$ . Вдали от порога локализации  $\omega_*$  величина  $D \approx \overset{\circ}{D}$  и формально  $q_c^2 \gg E^2$  (см. описание конкретной модели ниже). Тогда

$$\operatorname{Re} J \approx \frac{a^3}{2\pi^2 \overset{\circ}{D}}.$$

В результате получаем

$$\Delta_A^{(2)} \cong F(\tilde{\omega}_k) = \frac{3}{4\pi} \delta_A \frac{\omega_k^4}{\omega_0 \tilde{\omega}_k} \left\{ \frac{\bar{n}(\omega) Q(\omega)}{a^{-3} \bar{g}(\omega) v^3(\omega) \tau^2(\omega)} \right\}_{\omega = \tilde{\omega}_k}. \quad (21)$$

Затем, в районе интервала локализации,  $D \rightarrow 0$  и формально  $q_c \approx E$ . При этом можно показать, что

$$\Delta_A^{(2)} \approx \beta \frac{1}{\chi_D^3} F(\tilde{\omega}_k), \quad \beta = 0.1 \div 1. \quad (21a)$$

Что касается мнимой части оператора  $\Sigma_A^{(2)} (\Gamma_A^{(2)})$ , то ситуация следующая. Если  $q_c^2 \gg E^2$ , то

$$\Gamma_A^{(2)} \approx \Delta_A^{(2)}. \quad (22)$$

При определении же  $\Gamma_A^{(2)}$  для частот, близких к порогу локализации, следует сначала учесть, что

$$\operatorname{Im} J \approx \frac{a^3}{2\pi^2} \frac{|\omega - \omega_1|^{1/2}}{D^{3/2}}.$$

Остающийся интеграл по  $d\omega_1$  в (18) можно взять, если заменить лоренциан на прямоугольник с тем же весом и шириной. Получаем

$$\Gamma_A^{(2)} \approx \frac{1}{\chi_D^{7/2}} F(\tilde{\omega}_k). \quad (22a)$$

Отметим, что выше весь расчет сделан для случая изотопических дефектов, т.е. силовые параметры второго порядка  $\gamma_2$  и  $\overset{\circ}{\gamma}_2$  принимались равными. Возникает вопрос: можно ли обобщить результаты и учесть локальное изменение околоримесных параметров  $\gamma_2 \neq \overset{\circ}{\gamma}_2$ ? Ответ положительный. Во-первых, поскольку в основном уравнении теории (15) фигурирует одночастичная  $G$ -функция, с ее определением в принципе не возникает сложностей. Она описывается по-прежнему

выражением в форме (8). Во-вторых, нужно рассмотреть вопрос относительно вершинной части  $\Gamma$  (10). Оказывается, что и при  $\gamma_2 \neq \overset{\circ}{\gamma}_2$  вершина  $\Gamma$  имеет ту же структуру типа (10). Разумеется, в соответствующих выражениях для  $G$  и  $\Gamma$  следует переопределить  $g$ ,  $\tau$  и  $Q$ , которые теперь зависят и от  $\varepsilon$  и  $\gamma_2 - \overset{\circ}{\gamma}_2$  (см. детали в [8]). Принимая во внимание сказанное, ниже мы обсуждаем ситуацию, когда  $M \neq \overset{\circ}{M}$  и  $\gamma_2 \neq \overset{\circ}{\gamma}_2$ .

Подведем некоторые итоги. Из анализа формул (21)–(22) следует, что если различие в массах между атомами примеси и матрицы невелико, то за счет малости фактора  $\tau_i^{-2} \sim c^2$  ( $c \ll 1$ ) и малости фактора  $\Phi^{(4)} \sim \delta_A k^4$  ( $k \rightarrow 0$ ) оказывается  $\Sigma_A^{(2)} \ll \Sigma_A^{(1)}$ . Иными словами, в обычном случае влияние на колебательный спектр ангармонических процессов, в которых учитываются флуктуации плотности вблизи дефектов, оказывается пренебрежимо слабым. Однако ситуация заранее не ясна для случая очень тяжелых или слабосвязанных примесных атомов. Дело в том, что для таких примесей одноузельная  $t$ -матрица имеет резонансную особенность и возможно кросс-расщепление фононной дисперсионной кривой в окрестности резонансной частоты  $\omega_R$ . При этом групповая скорость квазичастиц близка к нулю в некотором интервале частот. Одновременно возникают характерные особенности в частотном поведении времени релаксации и плотности состояний, в результате чего вблизи частоты  $\omega_R$  обращается в нуль коэффициент диффузии и появляется специфическая щель в его спектре. Подобная ситуация, когда реализуется режим локализации, требует специально рассмотрения. Оно проводится в разделах 2, 3.

## 2. Случай низкочастотного кросс-расщепления спектра

Рассмотрим конкретную модель — гармоническую кубическую решетку с дефектами типа замещения. Фигурирующие в (21)–(22) и (21а) и (22а) групповая скорость квазичастиц  $v$  и время жизни  $\tau_i$  определяются через примесную часть массового оператора, т.е.  $\Sigma^{\text{imp}}$ . Он в свою очередь выражается через одноузельную  $t$ -матрицу. Пусть беспорядок недиагональный. В случае простой кубической решетки со скалярным взаимодействием между ближайшими соседними атомами и при условии относительно низкой концентрации дефектов с имеем

$$\Sigma^{\text{imp}}(\mathbf{k}, \omega) \cong ct(\mathbf{k}, \omega) - c^2 t^3(\mathbf{k}, \omega) \left( \frac{\partial \overset{\circ}{G}(\omega^2)}{\partial \omega^2} + \overset{\circ}{G}^2(\omega^2) \right).$$

Здесь  $\overset{\circ}{G} = \overset{\circ}{G}_{ss}$  — функция Грина идеальной решетки. В пределе малых  $\omega$  и  $k$  можно пренебречь зависимостью  $t$ -матрицы от квазиимпульса (см., например, [8]).

Предположим теперь примесь тяжелой и связь ее с окружением слабой:  $\varepsilon \gg 1$ ,  $f < 1$  ( $\varepsilon f \gg 1$ ). При этом факторы  $\varepsilon = (M - \overset{\circ}{M})/\overset{\circ}{M}$  и  $f = 1 - \gamma_2/\overset{\circ}{\gamma}_2$  описывают локальное возмущение из-за различия масс

и силовых постоянных. Как хорошо известно, в такой ситуации одноузельная  $t$ -матрица имеет особенность резонансного типа около частоты  $\omega_R$ , а именно

$$t(\omega) \approx \frac{\rho \omega^2 \omega_0^2}{(\omega_R^2 - \omega^2) - i \rho \omega^{3/2} \omega_0^{1/2}},$$

где

$$\omega_R^2 = \frac{\rho \omega_0^2}{\varepsilon}, \quad \rho = \frac{1-f}{3-f}.$$

Заметим, что параметр  $\rho$  зависит только от  $f$  и достигает максимума  $\rho = 1/3$  при  $\gamma_2 = \overset{\circ}{\gamma}_2$ , т.е. в случае диагонального беспорядка.

В дальнейшем с целью сокращения записи перейдем к безразмерным переменным. Вместо  $\omega_k^2$ ,  $\omega^2$  и  $\omega_R^2$  будем рассматривать

$$x_k^2 = \frac{\omega_k^2}{\omega_0^2}, \quad x_R^2 = \frac{\omega^2}{\omega_0^2}, \quad x^2 = \frac{\omega^2}{\omega_0^2}.$$

Допустим сначала, что взаимодействием между точечными дефектами можно пренебречь. Одновременно пусть их концентрация достаточно высокая, так что происходит кросс-расщепление спектра в области низких частот. Иными словами, дисперсионная кривая расщепляется на частоте  $x_R$  и появляется запрещенная полоса в спектре. При этом выполняется условие  $\text{Re } t(\omega) > \text{Im } t(\omega)$ , т.е.

$$|x_R - x| > \rho x^{3/2}. \quad (23)$$

Кроме того, имеет место неравенство

$$x_k \geq c\rho \left| \frac{x}{x_R - x} \right|. \quad (23a)$$

В подобной ситуации функция Грина  $G_k$  при  $x \approx x_R$  обладает двумя полюсами вместо одного

$$\bar{G}_{1,2}(\mathbf{k}, x) = Q(x) \left( x - \bar{x}_{1,2}(\mathbf{k}) + ix/\tau_i \right)^{-1}.$$

Здесь фактор

$$Q(x) = \left( 1 - \frac{\partial P_i(x)}{\partial x} \right)^{-1} \cong \frac{(x_R - x)^2}{(x_R - x)^2 + c\rho x_R}, \quad P_i = \text{Re } \Sigma^{\text{imp}},$$

$\bar{x}_{1,2}(\mathbf{k})$  — две ветви спектра одночастичных возбуждений. Ветви определяются как

$$\bar{x}_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left( x_k + x_R + c\rho \mp \sqrt{(x_k + x_R + c\rho)^2 - 4x_k x_R} \right),$$

где  $x_k$  — дисперсионный закон для регулярной решетки. Величина щели в колебательном спектре между зонами с границами  $x_1^*$  и  $x_2^*$  —  $c\rho$ . Кроме того, время жизни квазичастиц описывается формулами

$$\tau_{i'}(x) = Q^{-1}(x)\tau_i(x) = \frac{(x_R - x)^2 + c\rho x_R}{c\rho^2 x^2}.$$

Групповая скорость приближенно равна

$$v(x) \cong \frac{\left(1 - \frac{P_i(x)}{x}\right)^{1/2}}{1 - \frac{\partial P_i(x)}{\partial x}} \dot{v}(x) = \frac{(x_R - x)^2}{(x_R - x)^2 + c\rho x_R} \left(1 + \frac{c\rho}{x_R - x}\right)^{1/2}.$$

Плотность состояний определяется как

$$g(\sqrt{x}) \cong x \left(1 + \frac{c\rho}{x_R - x}\right)^{1/2}.$$

В [8] показано, что учет динамического взаимодействия между дефектами приводит к заметной перенормировке только времени жизни. Имеем

$$\tau_{i'}^{-1}(x) = \frac{c\rho^2 x^2}{(x - x_R)^2 + c\rho x_R} \left(1 + \frac{c\rho}{2(x_R - x)}\right).$$

Значение эффективной частоты и скорости меняются слабо.

Что касается коэффициента диффузии, то, подставляя приведенные выражения для  $\tau_{i'}$ ,  $v$  и  $g$  в формулу (20), находим

$$D(x) = \dot{D}(x) \left(1 - \frac{4(3c\rho x^2) [(x_0 - x)^2 + c\rho x_0]}{x(x_0 - x + c\rho)^2 (x - x_0)^4}\right).$$

Из анализа этого выражения следует, что при  $x \ll x_R$  и  $x \gg x_R$  интерференционные поправки (второй член в круглых скобках) к  $\dot{D}(x)$  малы. Однако в достаточно широком интервале частот порядка  $x_R$  скорость  $v$  весьма мала. Хотя при  $x \approx x_R$  время жизни и плотность состояний возрастают, произведение  $a^{-3} v^3 \tau_{i'}^2, g$  может быть меньше единицы. В результате в спектре  $D$  от  $x$  возникает интервал запрещенных значений, нижняя граница которого  $x_1$  лежит в первой зоне ( $x_1 < x_1^*$ ), а верхняя  $x_2$  — во второй зоне ( $x_2 > x_2^*$ ). Области локализации определяются как

$$\delta x_1 = x_1^* - x_1 \approx (c\rho)^{1/2} x_R^{2/3}, \quad \delta x_2 = x_2 - x_2^* \approx (c\rho)^{3/2}.$$

Ограничимся в дальнейшем случае бесконечно большой массы примеси, когда  $\varepsilon \rightarrow \infty$  и  $x_R \rightarrow 0$ . Тогда первая зона вырождается  $x_1(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ , а для второй зоны получаем  $x_2(\mathbf{k}) = c\rho + x(\mathbf{k})$ . При этом имеем

$$v(x) = \left(1 - \frac{c\rho}{x}\right)^{1/2}, \quad g(\sqrt{x}) = 3x \left(1 - \frac{c\rho}{x}\right)^{1/2},$$

$$\tau_i^{-1} = c\rho^2 \left(1 - \frac{c\rho}{2x}\right). \quad (24)$$

Что касается коэффициента диффузии, то

$$D(x) = \overset{\circ}{D}(x) \left(1 - \frac{(3c\rho^2)^2 (2x - c\rho)^2}{x(x - c\rho)^2}\right), \quad (25)$$

откуда видно, что порог локализации смещен относительно границы зоны  $x_2^*$  на величину

$$\delta x_2 = 3c\rho^2 \sqrt{c\rho}.$$

Кроме того, при  $x \gtrsim x_2$  соотношение (25) представляется в виде

$$D(x) \cong \overset{\circ}{D}(x) \left(1 - \frac{\delta x_2^2}{(x - c\rho)^2}\right). \quad (25a)$$

Обратим внимание на то, что наряду с рассмотренной моделью существует и другая относительно простая модель, в рамках которой есть щели как в спектре одночастичных возбуждений, так и в спектре коэффициента диффузии. Мы имеем в виду неупорядоченную решетку, содержащую значительное число слабосвязанных примесных атомов. При этом  $\gamma_2 \rightarrow 0$  и  $\varepsilon \approx 1$ , а концентрация  $c$  не мала и составляет  $\approx 0.1$ . Для такой модели остаются справедливыми формулы для основных характеристик  $\tau_i$ ,  $v$ ,  $g$  и  $D$  и сохраняются результаты анализа.

### 3. Влияние флуктуации фононной плотности вблизи кросс-щели

Ниже полагаем  $\varepsilon \rightarrow \infty$ . Тогда можно получить все результаты в сравнительно простой аналитической форме.

Рассмотрим ситуацию, при которой полюс одночастичной функции Грина оказывается вблизи кросс-щели, т.е.

$$\tilde{x}_k \gtrsim c\rho. \quad (26)$$

Возможны два случая. Если частоты таковы, что  $D \approx \overset{\circ}{D}$  (при этом в (19a)  $E^2 \ll q_c^2$ ), то мы находимся на известном удалении от порога локализации и

$$\tilde{x}_k - c\rho \gg x_2 - x_2^* \cong (c\rho)^{3/2}. \quad (27)$$

Когда  $D \lesssim \overset{\circ}{D}$  ( $E^2 \lesssim q_c^2$ ), мы оказываемся непосредственно в области диффузионной щели

$$x_k - c\rho \gtrsim (c\rho)^{3/2}. \quad (27a)$$

Пусть частоты таковы, что выполнены условия (26) и (27). Тогда для  $\Delta_A^{(2)}$  можно воспользоваться представлением (21), а для  $q$ ,  $\tau$ , и  $v$  — выражением в форме (24). Учтем, что групповая скорость определяется равенством

$$v(\tilde{x}_k) = \left(1 - \frac{c\rho}{\tilde{x}_k}\right)^{1/2} \approx \left(\frac{x_k}{c\rho}\right)^{1/2}.$$

После простых вычислений получаем

$$\Delta_A^{(2)} = \begin{cases} \delta_A (c\rho)^{5/2}, & T \rightarrow 0, \\ \delta_A (c\rho)^2 \frac{T}{\omega_R}, & T \gtrsim \omega_R. \end{cases} \quad (28)$$

Аналогичный масштаб имеет и мнимая часть  $\Gamma_A^{(2)}$ .

Сопоставим стандартную и нестандартную части ангармонического массового оператора (16а) и (28). Для действительных частей получаем, что

$$\frac{\Delta_A^{(2)}}{\Delta_A^{(1)}} \sim (c\rho)^{3/2} \ll 1.$$

Вместе с тем  $\Gamma_A^{(2)}$  существенно превышает мнимую часть стандартного ангармонического массового оператора  $\Gamma_A^{(1)}$ , которая определяется трехфонными процессами. Напомним, что в звуковом пределе

$$\Gamma_A^{(1)} \approx \delta_A \left( \frac{q}{q_0} \right)^5 \frac{T}{\omega_0}$$

(см., например, [16]). Однако  $\Gamma_A^{(2)}$  много меньше величины примесного массового оператора

$$\text{Im } \Sigma^{\text{imp}}(x_R) \approx \Gamma_i = \frac{x_R}{\tau_i(x_R)} \approx (c\rho)^{3/2}.$$

Пусть область частот задается неравенствами (26) и (27а). Поскольку характерные частоты больше  $\gtrsim c\rho$ , то удобно оценить величину отношения  $\Delta_A^{(2)}/c\rho$ . Имеем

$$\frac{\Delta_A^{(2)}}{c\rho} = A (\rho c)^2 \Pi(x), \quad \Pi(x) = \frac{(x - c\rho)^6}{\left( (x - c\rho)^2 - \delta x_2^2 \right)^3},$$

где

$$A = \begin{cases} \delta_A \frac{\gamma_2^2}{\gamma_2^{\circ 2}} (\rho c)^{1/2}, & T \rightarrow 0, \\ \delta_A \frac{\gamma_2^2 T}{\gamma_2^{\circ 2} \omega_0}, & T \gtrsim \frac{\omega_R}{4}. \end{cases}$$

Частоты, для которых  $\Delta_A^{(2)}/c\rho \lesssim 1$ , имеют величину порядка

$$\Delta x \approx \delta x_2 \left( 1 + \frac{1}{2} (A\rho c)^{1/3} \right).$$

Подчеркнем, что фактор  $(A\rho c)^{1/3}$  сравнительно слабо зависит от всех параметров и при  $c \gtrsim 10^{-2}$  и  $T/\omega_0 \gtrsim 1$  может составлять несколько

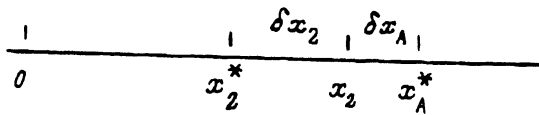


Рис. 2. Взаимное расположение особых точек функции плотности колебательных мод и частотного спектра коэффициента диффузии.

$x_2^*$  и  $x_A^*$  — границы спектра квазичастиц,  $x_2$  и  $x_A$  — пороги локализации.

десятих. Ужесточение локальных силовых констант увеличивает его значение. Следовательно, интервал  $\Delta x = |x - \delta x_2|$  конечен. Он мал, но сравним с величиной диффузионной щели ( $\delta x_2 = (c\rho)^{3/2}$ ).

Рассмотрим также мнимую часть массового оператора. Она определяется упругими и специфическими ангармоническими релаксационными процессами. При этом

$$\Gamma_i \approx (c\rho)^{3/2}, \quad \Gamma_A \approx \frac{x_R^{1/2}}{\tau_A} \approx A(\rho c)^2 \frac{(x - c\rho)^7}{((x - c\rho)^2 - \delta x_2^2)^{7/2}}. \quad (29)$$

Прямое сопоставление показывает, что снова вблизи дна зоны при выполнении условий

$$\frac{1}{2} A^{1/3} (\rho c)^{1/6} < \frac{x - c\rho - \delta x_2}{\delta x_2} < \frac{1}{2} A^{2/7} (\rho c)^{1/7}$$

существенен и может преобладать флуктуационно-ангармонический механизм. При этом, если

$$x_2^* < x < x_A^* \approx c\rho + \delta x_2 + \frac{1}{2} A^{1/3} (\rho c)^{5/3},$$

возможность использования одночастичного представления оказывается, вообще говоря, под вопросом, так как  $\Gamma_A \gtrsim c\rho$  (рис. 2).

Принимая во внимание сказанное, рассмотрим уравнение, которое определяет закон дисперсии  $\tilde{x}_k$  (и групповую скорость) квазичастиц. Оно имеет вид

$$F(\tilde{x}_k, x_k) = \tilde{x}_k - x_k - c\rho - A(\rho c)^2 \Pi(\tilde{x}_k) = 0. \quad (30)$$

Из (30) легко видеть, что при  $\delta_A \neq 0$  «старая» нижняя граница при  $A \neq 0$  спектра  $x_2^* = c\rho$  смещается на конечную величину (рис. 2)

$$x_A^* \cong c\rho + \delta x_2 + \delta x_A, \quad \delta x_A = \frac{1}{2} A^{1/3} (\rho c)^{5/3}.$$

При этом масштаб поправок за счет ангармонизма сопоставим по величине с диффузионной щелью  $\delta x_2$ .

Что касается групповой скорости, то имеем цепочку равенств

$$v(\tilde{x}_k) = \left( \frac{x_k}{\tilde{x}_k} \right)^{1/2} \frac{\partial \tilde{x}_k}{\partial x_k} = \frac{1}{\partial F / \partial \tilde{x}_k} \left( \frac{x_k}{\tilde{x}_k} \right)^{1/2} = \frac{\left( 1 - \frac{c\rho}{\tilde{x}_k} - A(\rho c)^2 \Pi(\tilde{x}_k) / \tilde{x}_k \right)^{1/2}}{1 - A(\rho c)^2 \frac{\partial \Pi(\tilde{x}_k)}{\partial \tilde{x}_k}}. \quad (31)$$



Согласно (30) и (31), в граничной точке  $x_A^*$  групповая скорость обращается в нуль. При  $x \gtrsim x_A^*$

$$v \approx \left( \frac{\delta x_A}{c\rho} \right)^{1/2}.$$

Приведем еще выражение для плотности фононных состояний. С учетом (30) имеем

$$\tilde{g}(x) = \frac{x}{2\pi} \left( 1 - \frac{c\rho}{x} - A(\rho c)^2 \frac{\Pi(x)}{x} \right)^{1/2}, \quad x \gtrsim x_A^*. \quad (32)$$

Принимая во внимание соотношение для коэффициента диффузии (20), а также перенормировку за счет ангармонических процессов параметров теории  $g$  (32),  $v$  (31) и  $\tau$  (29), можно определить новую границу локализации  $x_A$ .

### Заключение

Сравним наши результаты с выводами работы [7], где впервые исследовалось влияние ангармонического взаимодействия мод на колебательный спектр с учетом флуктуации их плотности вблизи дефектов в режиме локализации. Отметим, что в [7] изучена некая гипотетическая ситуация и параметры теории не конкретизировались. Мы рассмотрели одну из реальных моделей — одноатомный ангармонический кристалл с примесями — и учли локальные изменения массы и силовых констант. В рамках такой модели можно получить аккуратные решения. Из-за известной малости ангармонического взаимодействия в звуковом пределе и из-за того, что речь идет о флуктуациях плотности (второй порядок по концентрации  $c!$ ), появление специфических ангармонических процессов, как мы показали, возможно только при специальных дополнительных условиях на примеси. А именно подобные процессы оказываются существенными в случаях очень тяжелых или слабо связанных точечных дефектов, когда имеет место кросс-расщепление спектра и становится возможной локализация фононов около границ щели. Мы исследовали решения вдали и вблизи порога локализации. Для одночастичных возбуждений определены перенормированные закон дисперсии, групповая скорость и время жизни. Соответствующий частотный интервал, где «работает» обсуждаемый механизм, по масштабу величины сравним со щелью в спектре коэффициента диффузии. При этом зависимость подобных перенормировок от параметров модели, т.е. факторов ангармонизма, концентрации дефектов и силовых констант, слабая.

Авторы признательны Л.А.Максимову, Р.О.Зайцеву, А.И.Морозову и Е.И.Саломатову за обсуждение результатов работы и ценные критические замечания.

Работа выполнена в рамках проекта № 93-02-2540, поддержанного Российским научным фондом фундаментальных исследований.

Авторы благодарят фонд Дж.Сороса за материальную помощь.

## Список литературы

- [1] Bottger H., Theuerkauf M. // Phys. St. Sol. (b). 1988. V. 150. P. 73.
- [2] Kirkpatrick T.R. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. P. 5746.
- [3] Graebner J.E., Golding B., Allen L.C. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 5696.
- [4] Wolf E., Maret G., Akkermans E. Maynard R. // J. Phys. (Paris). 1988. V. 49. P. 63, 77.
- [5] van Albada M.P., van der Mark M.B., Lagendik A. // Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media / Ed. P. Sheng. World Scientific, Singapore, 1989. P. 97.
- [6] Qian-Jin Chu, Zhao-Oing Zhad // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 4906.
- [7] Akkermans E., Maynard R. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. P. 7860.
- [8] Zhernov A.P., Salamatov E.I., Chulkin E.P. // Phys. St. Sol. (b). 1991. V. 165. P. 355. V. 168. P. 81.
- [9] Prices E. // Physica C. 1991. V. 73. P. 173.
- [10] Schober H.R., Laird Brian B. // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 636; Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. 6746.
- [11] Klinger M.I. // Physics Reports. 1988. V. 165. P. 397.
- [12] Buchenau V., Galperin Yu.A.I., Gurevich V.L., Schober H.P. // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 5039.
- [13] Yu C.C., Leggett A.J. // Comments Cond. Mat. Phys. 1988. V. 14. P. 231.
- [14] Горьков Л.П., Ларкин А.И., Хмельницкий Д.Е. // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т. 30. № 4. С. 248-252.
- [15] Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М.: Мир, 1973.
- [16] Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов неидеальными кристаллами. М.: Наука, 1967.

РНИИ «Курчатовский институт»  
Москва

Поступило в Редакцию  
24 января 1994 г.