

УДК 548.4

© 1992

## ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И ОТЖИГА НА ПЛОТНОСТЬ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ

Е. И. Саламатов

Изучается плотность колебательных состояний (ПКС) кристалла с квазилокальными низкочастотными и высокочастотными модами, частота которых является непрерывно распределенной случайной величиной. Исследуется влияние ангармонизма низкочастотных резонансных мод на ПКС и обсуждается характер процесса отжига в таких системах.

Исследованию колебательных состояний аморфных материалов и изучению влияния на них эффектов ангармонизма и релаксации уделяется в последние годы большое внимание [1-4]. Для объяснения наблюдаемых экспериментальных результатов было предложено несколько моделей, общей чертой которых является предположение о наличии в аморфных системах различного рода дефектов (квазилокальных мод [5], дисклинаций [6], блоков [7]), свойства которых определяются случайным параметром с непрерывной функцией распределения. В предыдущей работе автора [8] в рамках метода двухвременных функций Грина получены общие выражения для плотности колебательных состояний (ПКС) кристаллической решетки с распределенным недиагональным беспорядком, где в качестве случайного параметра рассматривалась резонансная частота колебаний низкочастотной квазилокальной моды. В представляемой работе в рамках этой модели исследуется влияние на ПКС эффектов ангармонизма и процессов релаксации.

### 1. Общий формализм

Вывод основных выражений для ПКС неупорядоченного кристалла с распределенным недиагональным беспорядком представлен в работе [8]. Рассмотрим кристалл с изолированными примесными атомами замещения различных сортов  $s$ . Будем описывать его динамические свойства гармоническим гамильтонианом вида

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad H_0 = \frac{1}{2M^0} \sum_n p_n^2 + \frac{1}{2} \sum_{nm} \Phi_{nm}^0 \mu_n \mu_m, \quad (1)$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{M^s} - \frac{1}{M^0} \right) \sum_n p_n^2 c_n^s + \frac{1}{2} \sum_{nm} \Delta \Phi_{nm} \mu_n \mu_m, \quad (2)$$

$$\Delta \Phi_{nm} = \Phi_{nm} - \Phi_{nm}^0.$$

Здесь  $H_0$  — гамильтониан невозмущенной кристаллической решетки, а  $H_{int}$  — возмущение, вносимое в систему примесными атомами. Фигурирующие в (1) и (2) величины  $u_n$  и  $p_n$  — операторы смещения и импульса атома  $n$  (в работе будет использоваться скалярная модель кристалла, гамильтониан которой диагонален по декартовым индексам; поэтому здесь и в дальнейшем мы их опускаем);  $M^s$  — масса атома сорта  $s$ ;  $\Phi_{nm}$  — матрица силовых параметров взаимодействия. Индексом 0 обозначаются параметры идеальной решетки. Фактор  $c_n^s$  равен единице, если в узле  $n$  находится точечный дефект сорта  $s$ , равен нулю других случаях

и обладает следующими свойствами:  $c_n^s c_n^s = \delta_{ss} c_n^s$ ,  $\sum_s c_n^s = p_n$ , где  $p_n$  равен единице, если в узле  $n$  находится любой дефект. Конфигурационные средние от операторов  $c_n^s$  и  $p_n^s$  определяют концентрацию дефектов сорта  $s$   $c^s = \langle c_n^s \rangle$  и общую концентрацию дефектов  $c = \langle p_n^s \rangle = \sum_s c^s$ .

Функция плотности колебательных состояний кристаллической решетки выражается через след мнимой части функции Грина, определенной на операторах смещения [9]. Для нахождения решеточной функции Грина будем пользоваться методом разложения матрицы рассеяния по степеням концентрации [9, 10]. Ограничиваясь линейным по общей концентрации примесей приближением при вычислении матрицы рассеяния, для Фурье-образа усредненной по конфигурациям примесей функции Грина получаем

$$G(\mathbf{k}, \omega) = (M^0 \omega^2 - M^0 \omega_k^2 - P(\mathbf{k}, \omega))^{-1}. \quad (3)$$

Здесь  $\omega_k$  — закон дисперсии идеального кристалла, в принятом приближении массовый оператор  $P(\mathbf{k}, \omega)$  равен

$$P(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\bar{c}(\mathbf{k}, \omega)}{1 + \bar{c}^{\mathbb{F}}(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (4)$$

$$\bar{c}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\Delta\Delta'} \exp(i\mathbf{k}(\Delta - \Delta')) \bar{c}_{\Delta\Delta'}(\omega), \quad (5)$$

$$\bar{c}^{\mathbb{F}}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\Delta\Delta'} \exp(i\mathbf{k}(\Delta - \Delta')) \bar{c}_{\Delta\Delta'}(\omega) G_{\Delta\Delta'}^0(\omega) \quad (6)$$

— усредненные по сортам примесных атомов ( $\mathbb{F} = \sum_s c^s \mathbb{F}^s / c$ ) одноузельная матрица рассеяния и член, исключаяющий возможность многократного заполнения дефектных узлов;  $G_{im}^0$  — функция Грина идеального кристалла; суммирование по  $\Delta$  распространяется только на область локализации возмущения.

В работе [8] членом  $\bar{c}^{\mathbb{F}}(\mathbf{k}, \omega)$  в знаменателе (4) пренебрегали, что справедливо только в случае большой массы дефектных атомов. В случае слабо связанных с матрицей атомов примеси учет этого члена становится принципиально важным.

Для условно-усредненных функций Грина  $\langle G_{nn}(\omega c_n^s) \rangle$ , описывающих динамические свойства дефектного атома сорта  $s$ , в работе [8] получено

$$G_{\Delta}^s(\omega) = \langle G_{nn}(\omega) \rangle + \sum_{\Delta\Delta'} G_{n\Delta}^0(\omega) (t_{\Delta\Delta'}^s - c\bar{t}_{\Delta\Delta'}) G_{\Delta'n}^0(\omega). \quad (7)$$

С учетом (7) для плотности колебательных состояний неупорядоченной решетки, содержащей различные дефекты с одинаковой массой ( $M^s = M = M_0(1 + \varepsilon)$ ), получаем

$$g(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi N} \text{Im Sp} \langle M_n G_{nn}(\omega) \rangle = -\frac{2\omega}{\pi} M^0(1 + \varepsilon c) \text{Im} \langle G_{nn}(\omega) \rangle + O(1/N). \quad (8)$$

## 2. Модель

Как отмечалось в начале статьи, в настоящее время не существует общепринятой модели аморфного материала, позволяющей описать ПКС в таких системах. Мы будем предполагать, что в стеклах существуют локальные области ( $\sim 50$  А) с повышенной плотностью атомов, т. е. содержащих атомы внедрения и их комплексы. Как показано в работах [11, 12], в этом случае в системе возникают низкочастотные квазилокальные уровни, обусловленные большими отрицательными значениями поперечных силовых констант. В то же время возникают высокочастотные квазилокальные и локальные уровни, обусловленные большими положительными значениями продольных силовых констант. Рассеяние фононов на таких низкочастотных и высокочастотных уровнях имеет резонансный характер. В этом случае процесс рассеяния фононов на дефектах определяется резонансной частотой  $\omega_s$  и затуханием  $\eta_s$  матрицы рассеяния и слабо зависит от конкретного вида  $t$ -матрицы. Поэтому в качестве расчетной модели мы можем рассмотреть простую систему, характеризующуюся такими уровнями.

Рассмотрим простую кубическую решетку со скалярным взаимодействием между ближайшими соседями, содержащую изолированные примесные атомы замещения с одинаковыми массами  $M = M^0(1 + \varepsilon)$  и разными константами взаимодействия с атомами матрицы  $\gamma^s = \gamma^0(1 - \tau^s)$ . (В дальнейшем будем считать, что  $M^0 = \gamma^0 = \alpha = 1$ ,  $\omega_m^2 = 12$ ,  $x = \omega^2/12$ ).

Ограничимся в одноузельной матрице рассеяния только вкладом  $A_{1g}$ -представления точечной группы  $O_h$ , который при определенных значениях параметров  $\varepsilon$  и  $\gamma^s$  может приводить к появлению как низкочастотных резонансных, так и высокочастотных квазилокальных и локальных уровней. Пространственные Фурье-образы одноузельной матрицы рассеяния и члена, исключающего возможность многократного заполнения дефектных узлов, в этом случае представимы в виде [8]

$$t^s(k, x) = -12(t_1^s(x) + t_2^s(x)x_k + t_3^s(x)x_k^2), \quad (9)$$

$$\bar{\xi}(k, \omega) = A(x) + B(x)x_k, \quad (10)$$

где  $x_k = \omega_k^2/12$  — безразмерный закон дисперсии идеального кристалла. Для величин, входящих в (9), (10), получены следующие аналитические выражения (здесь  $G(x) = G_{00}^0(x)$ ):

$$t_1^s(x) = \varepsilon x(1 - \tau^s - 2\tau^s x(1 - 12xG(x)))/D^s(x),$$

$$t_2^s(x) = 4\varepsilon\tau^s x(1 - 12xG(x))/D^s(x),$$

$$t_3^s(x) = 2\tau^s(1 + 12x\varepsilon G(x))/D^s(x),$$

$$A = -12\varepsilon x(G(x) - \tau^s(1/6 + G(x)(2x - 1)))/D^s(x),$$

$$B = 2\tau^s x(1 - 12xG(x))/D^s(x),$$

$$D^s(x) = 1 - \tau^s - 2x(\tau^s - \tau^s\varepsilon + 6G(x)(\varepsilon(1 - \tau^s) + 2\tau^s x(1 - 2\varepsilon))). \quad (11)$$

Усреднив выражения (11) по сортам примесных атомов, после несложных преобразований для пространственной Фурье-компоненты функции Грина получаем

$$\omega_m^2 G(k, x) = \frac{1}{\bar{c}t_3(x)(y_1(x) - y_2(x))} \left( \frac{1 + A + By_2}{y_2(x) - x_k} - \frac{1 + A + By_1}{y_1(x) - x_k} \right), \quad (12)$$

где  $y_{1,2}(x)$  — комплексные решения уравнения

$$c(\bar{t}_3 + B)x_k^2 + (1 + \bar{c}t_2 + c\bar{B}x)x_k - (x + \bar{c}t_1) = 0.$$

В рассматриваемой модели представление (12) позволяет свести интегрирование по зоне Бриллюэна при нахождении матричного элемента функции Грина к одномерному интегралу [13], вычисление которого не приводит к каким-либо трудностям.

Положения квазилокальных и локальных уровней колебаний атома сорта  $s$  определяются нулями  $D^s(x)$  и выражаются по следующим формулам:

$$x_r = \frac{1 - \tau^s}{2\tau^s + 3\varepsilon - \tau^s\varepsilon} \ll 1, \quad (\tau^s < 1), \quad (13a)$$

$$x_l = \frac{7\tau^s - 1}{10\tau^s + 3\varepsilon - \tau^s\varepsilon} \approx 1, \quad \left( \tau^s \approx \frac{1 + 3\varepsilon}{\varepsilon - 3} \right). \quad (13b)$$

Так как в работе рассматривался случай с фиксированным значением параметра  $\varepsilon$ , то в дальнейшем мы полагаем  $\varepsilon = 0$ . С учетом этого выражение (13б) можно представить в виде

$$x_l = (3 - x_r)/5, \quad (x_r \approx -2). \quad (13в)$$

Наряду с дефектами, образовавшимися в процессе аморфизации, в системе содержатся дефекты, присущие и кристаллическому исходному (или отожженному) образцу, которые мы будем характеризовать некоторым фиксированным значением  $x_c$ . Таким образом, общая функция распределения дефектов в аморфном образце по сортам  $x_s$  в нашей модели представима в виде трех слагаемых

$$\rho(x_s) = \rho(x_r) + \rho(x_l(x_r)) + \rho(x_c). \quad (14)$$

Здесь следует отметить, что вид функции распределения  $\rho(x_s)$  в реальной ситуации должен определяться свойствами системы и способом ее аморфизации, что, на наш взгляд, и определяет достаточно разнообразный вид ПКС, наблюдаемый в экспериментах (см., например, [1-4]). В нашей работе первые два слагаемые выражения (14), относящиеся к аморфной структуре, представляют собой треугольные функции распределения вблизи точек  $x_{r0} \ll 1$  и  $x_{l0} \approx 1$ , а

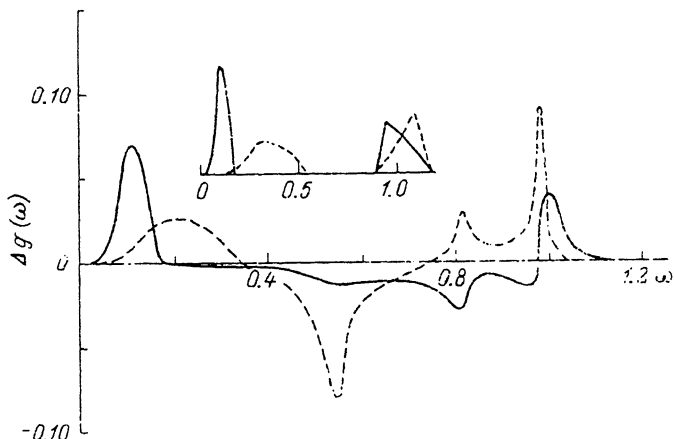


Рис. 1. Разность ПКС неупорядоченной и кристаллической систем при двух различных функциях распределения случайной величины  $x_s$ , показанных на вставке.

третье слагаемое —  $\delta$ -образное распределение с параметром  $x_c$ , не приводящим к резким особенностям в фоновом спектре (в работе  $x_c = 0.9$ ). Таким образом, общая концентрация дефектов  $c = c_r + c_l + c_c$ , причем величина  $c_c$  ограничена сверху значением концентрации дефектов в исходном образце. При вычислениях было положено  $c_c^0 = 0.075$  и всегда полагалось, что  $c_r / c_l = 1$ .

На рис. 1 представлена разность ПКС свежеприготовленного и отожженного образцов  $\Delta g(\omega) = g_a(\omega) - g_c(\omega)$  для двух видов  $\rho(x_s)$ , представленных на вставке в шкале частот. Полученные кривые качественно соответствуют экспериментам [2, 3] (штриховая кривая) и [4] (сплошная кривая), исключая области вблизи особенностей Ван Хова идеального кристалла. Отметим, что вид низкочастотного участка  $\Delta g(\omega)$  полностью определяется видом  $\rho(x_s)$ , а большие отрицательные значения  $\Delta g(\omega)$  в центре зоны (штриховая кривая) получены для образца, концентрация кристаллических дефектов в котором в процессе аморфизации уменьшилась до значения 0.06.

Что касается условно-усредненных функций Грина неупорядоченного кристалла, то в рассмотренном интервале концентраций зависимостью ПКС отдельного примесного атома от общей концентрации дефектов можно пренебречь. При этом для функции Грина примесного атома сорта  $s$  получено

$$G_d^s(\omega) = (G(x) - \tau^s (1/6 - G(x)(1 + 2x))) / D^s(x). \quad (15)$$

В случае резонансного уровня у дна зоны парциальная плотность колебательных состояний примесного атома сорта  $s$  вблизи резонансной частоты имеет вид лоренцевой кривой

$$g^s(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \text{Im}(\varepsilon + 1) G_d^s(\omega) \cong \frac{1}{\pi} \frac{\eta_r}{(\omega - \omega_r)^2 + \eta_r^2}, \quad (16)$$

где

$$n_r = 3\pi x_r^2 (1 + \varepsilon) \omega_m / 4 \quad (17)$$

— затухание в резонансе.

### 3. Влияние эффектов ангармонизма и отжига на плотность колебательных состояний аморфных материалов

В этом разделе мы не связываем матрицу рассеяния  $t^s(x)$  с определенным типом дефекта. Будем считать, что рассеяние длинноволновых фононов происходит на некоторой квазимолекуле, линейные размеры которой много меньше длины волны фонона, а температура такова, что явным вкладом в эффекты ангармонизма и отжига от высокоэнергетических фононов можно пренебречь. В области низких частот одноузловая матрица рассеяния имеет самый общий вид — разложение в ряд по степеням малого параметра  $x_k$ , к которому можно свести выражение для матрицы рассеяния любого дефекта. В этом случае парциальная плотность колебаний атома сорта  $s$  представляет собой плотность колебательных состояний квазимолекулы вдоль обобщенной координаты  $r_s$ , определенной в пространстве локализации дефекта, а затухание  $n_s$  обусловлено взаимодействием этой моды со случайным фононным полем. При такой интерпретации усреднение по сортам примесных атомов соответствует усреднению по квазилокальным и локальным модам с общей концентрацией  $c$ .

Будем считать, что резонансный характер одноузловая матрица рассеяния квазимолекулы имеет только в одном неприводимом представлении, а соответствующая симметризованная координата совпадает с координатой реакции процесса релаксации квазимолекулы  $R$ . Логично предположить, что потенциальная энергия вдоль этой координаты реакции имеет много минимумов, разделенных энергетическими барьерами, самый низкий из которых соответствует основному, полностью релаксированному состоянию. Предположим, что переход из одного состояния в другое происходит термоактивированным образом, т. е. квантовыми эффектами будем пренебрегать. Скорее всего для достижения равновесного состояния квазимолекула должна сделать достаточно большое число элементарных прыжков, причем в течение этого процесса параметры матрицы рассеяния квазимолекулы могут принимать любые значения, реализующиеся в системе. Также будем предполагать, что переходами в состояние с большей энергией можно пренебречь или, другими словами, энергия последующего состояния много меньше предыдущего, так что потенциальную энергию вблизи последнего можно аппроксимировать полиномом третьей степени вида

$$U(r) = ar^2/2 - br^3/3. \quad (18)$$

При рассмотрении динамики частицы, взаимодействующей с внешним полем и находящейся в таком потенциале, в классическом приближении можно выделить три процесса [14].

1. Самый медленный, относящийся к «просачиванию» частицы через потенциальный барьер, который происходит термоактивированным образом с характерным временем  $t_1 \sim 1/\Gamma$ , где  $\Gamma$  — частота диффузионных прыжков.

2. Также медленный процесс, описывающий релаксацию частицы из возбужденного состояния с характерным временем  $t_2 \sim 1/\eta$ , где  $\eta$  характеризует затухание осциллятора.

3. Быстрый динамический процесс с  $t_3 \sim 1/\omega$ , где  $\omega$  — частота колебаний частицы в потенциале (18) в гармоническом приближении.

В конкретных расчетах был использован потенциал для частицы единичной массы вида

$$U_r(R) = x_r R^2/2 - \frac{1}{3} x_r R^3 / \sqrt{6E x_r^{\alpha-1}} \quad (19)$$

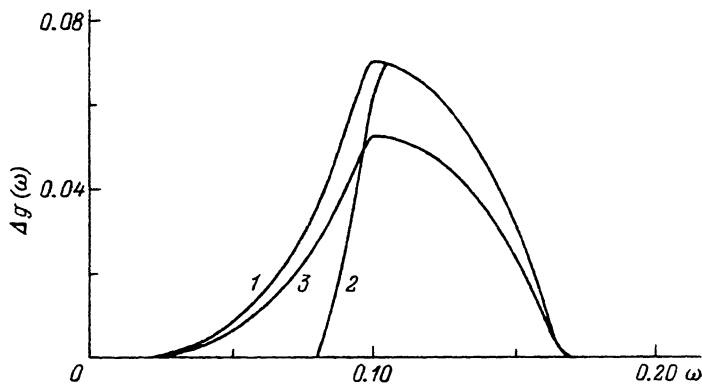


Рис. 2. Низкочастотный участок ПКС свежеприготовленного (1) и «отожженных» (2, 3) при различных значениях  $\alpha$  образцов.  $\alpha = 0.5$  (2),  $0.25$  (3).

с точками экстремумов  $R_{or} = 0$ ,  $R_{br} = \sqrt{6E_x \alpha^{-1}}$ , характеризующимися частотами  $x_{or} = x_{br} = x_r$  и высотой потенциального барьера  $E_{br} = E_x \alpha^2$ , где  $\alpha$  — параметр, который (как будет показано ниже) определяет скорость отжига дефекта, колеблющегося на частоте  $x_r$ .

Для качественного описания процесса отжига аморфной системы при нахождении частоты элементарных актов  $\Gamma$  будем пользоваться теорией Крамерса в ее простейшей интерпретации [15], согласно которой в нашем случае слабого затухания ( $\eta \ll \omega_b$ )

$$\Gamma_r = E_{br} n_r \exp(-E_{br}/T)/T \sim E_x \alpha^2 \exp(-E_x/T)/T. \quad (20)$$

Также будем полагать, что для полной релаксации дефекту требуется совершить только один прыжок, что позволяет расцепить систему кинетических уравнений для концентрации низкочастотных резонансных дефектов различного сорта и получить для функции  $\rho(x_r)$  следующее выражение:

$$\rho(x_r, t) = \rho(x_r) \exp(-\Gamma t) c_r(t)/c_r, \quad (21)$$

где  $t$  — время отжига,  $c_r(t)$  — концентрация низкочастотных дефектов после отжига. Что касается высокочастотных уровней, то для простоты полагалось, что их функция распределения не изменилась и сохранилось соотношение  $c_r(t)/c_r(t) = 1$ .

Из (18) следует, что скорость отжига определяется величинами  $x_r$  и  $\alpha$ . Так, при  $\alpha = 0$  быстро отжигаются более высокочастотные резонансные уровни, в то время как при  $\alpha > 0$  может наблюдаться другая картина. На рис. 2 показаны различия низкочастотной ПКС между кристаллическим и аморфными образцами, свежеприготовленным (1) и отожженными при  $\alpha = 0.5$  (2) и  $\alpha = 0.25$  (3) до общей концентрации  $c(t) = 0.75$  с. Практически равномерный отжиг всех дефектов (кривая 3) соответствует эксперименту [2, 3], а быстрый отжиг низкочастотных дефектов (кривая 2) соответствует экспериментальным результатам работы [4]. Нам представляется, что такое различие в процессах отжига обусловлено степенью аморфизации образцов — в случае глубокой аморфизации для полной релаксации дефект должен пройти «длинный» путь, в процессе которого происходит самоусреднение по параметрам элементарного акта отжига. На рис. 3 не представлены функции распределения  $\rho(x_r)$ , которые, как уже отмечалось выше, практически полностью определяют  $\Delta g(\omega)$  в области низких частот.

Для малых времен отжига ( $t \ll 1/\Gamma$ ), когда вкладом необратимых процессов в функцию  $\rho(x_s)$  можно пренебречь, важную роль в наблюдаемой ПКС могут играть эффекты ангармонизма. Для качественного анализа ангармонического вклада в ПКС ограничимся случаем, когда самым медленным процессом можно пренебречь совсем. Пусть  $y(t)$  — медленно меняющаяся переменная, вблизи которой частица совершает быстрые осцилляции  $u(t)$ . Разложим потенциальную энергию системы (18) в ряд по степеням  $u$  вблизи  $y$

$$U(y, u) = \sum_{n=0}^{\infty} \Phi^{(n)}(y) u^n / n!, \quad (22)$$

где  $\Phi^{(n)}(y)$  —  $n$ -я производная потенциала  $U(r)$  в точке  $y$ . Ограничиваясь только четными членами ряда (22) и используя приближение

$$u^{2n+1} \approx (2n+1)!! \langle u^2 \rangle_0^n u = (2n+1)! \langle u^2 \rangle_0^n u / (2n)!!,$$

где  $\langle \dots \rangle$  обозначает усреднение со стационарной функцией распределения  $\rho(u, v)$ , уравнение Ланжевена для переменной  $u(t)$  получаем в виде

$$u = v,$$

$$\begin{aligned} v &= -\eta v - \frac{1}{M} \sum_{n=0} \Phi^{(2n+2)} \langle u^2 \rangle_0^n u / (2n)!! + \frac{1}{M} f(t) = \\ &= -\eta v - \omega^2(y, \langle u^2 \rangle_0) + \frac{1}{M} f(t). \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь  $f(t)$  — случайная сила со стороны фононного поля, представляющая из себя «белый шум»:  $\langle f(t) \rangle = 0$ ,  $\langle f(t) f(0) \rangle = \delta(t) 2\eta TM$ ;  $\omega_2(y, \langle u^2 \rangle)$  — зависящая от среднеквадратичного смещения из положения равновесия  $y$  частота гармонического осциллятора. Значение  $y$  в свою очередь можно найти из условия

$$\left\langle \frac{\partial U(y, u)}{\partial u} \right\rangle_0 = \sum_{n=0} \Phi^{(2n+1)} \langle u^2 \rangle_0^n / (2n)!! \quad (24)$$

Поскольку  $\langle u^2 \rangle_0 = T/M\omega^2$ , уравнения (23) и (24) представляют собой систему для самосогласованного нахождения  $\langle u^2 \rangle_0$ .

Следует заметить, что из вида выражений (23) и (24) следует, что при использованных приближениях описание быстрых осцилляций сводится к описанию движения частицы в гармоническом приближении в эффективном потенциале  $U(R, T)$ , зависящем от температуры через среднеквадратичное смещение из положения равновесия

$$\tilde{U}(R, T) = \exp \left( \frac{1}{2} \langle u^2 \rangle_0 \nabla^2 \right) U(R). \quad (25)$$

Последнее выражение совпадает с выражением, полученным в псевдогармоническом приближении, используемом при описании динамики ангармонических кристаллов [16].

Перенормированный эффективный потенциал имеет вид



$$\tilde{U}(R, T) = x_r R^2 / 2 - \frac{1}{3} x_r (R^3 + 3R \langle u^2 \rangle_0) / \sqrt{6Ex_r^{\alpha-1}} \quad (26)$$

с минимумом в точке

$$R_{0r}(T) = \frac{1}{2} \sqrt{6Ex_r^{\alpha-1}} \left\{ 1 - \sqrt{1 - 2 \langle u^2 \rangle_0 / 3Ex_r^{\alpha-1}} \right\}.$$

Уравнение самосогласования в этом случае принимает вид

$$\langle u^2 \rangle_0 = T / \sqrt{1 - 2 \langle u^2 \rangle_0 / 3Ex_r^{\alpha-1}}. \quad (27)$$

Для величины  $z_r = x_r / x_r$  получаем уравнение третьей степени

$$z_r^3 - z_r + \frac{2}{3} T_r^* = 0, \quad (28)$$

где  $T_r^*$  — безразмерная температура, выраженная в единицах высоты потенциального барьера  $T_r^* = T / E_{br}$ . При  $T_r^* \leq 1/\sqrt{3}$  уравнение (28) имеет решение

$$z_r = 2 \cos(\beta(T_r^*)/3) / \sqrt{3}, \quad (29)$$

где

$$\cos(\beta(T_r^*)) = -T_r^* \sqrt{3}.$$

При  $T_r^* > 1/\sqrt{3}$  эффективный потенциал  $\tilde{U}(R, T)$  не имеет минимума и движение частицы становится инфинитным. Для коррелятора (28) получается аномальная температурная зависимость, более сильная, чем линейная.

Чтобы вычислить ПКС системы при конечных температурах, следует учесть изменение функции распределения  $\rho(x_r)$ . При вычислениях мы ограничились случаем  $\alpha = 0$ , для которого  $z_r$  не зависит от  $r$ , а новая функция распределения  $\rho(x_r, T)$  получается сдвигом  $\rho(x_r, 0)$  в область низких частот. На рис. 3 представлены ПКС системы, полученные при двух различных температурах, и их отношение. С увеличением температуры наблюдается смягчение колебательных мод, что приводит к появлению в функции  $g(T_2, \omega) / g(T_1, \omega)$  ( $T_2 > T_1$ ) характерного максимума, наблюдаемого в эксперименте [4], который при отжиге низкочастотных дефектов будет сдвигаться вправо.

Итак, в предположении, что колебательные свойства аморфной системы могут быть описаны в рамках метода решеточной функции Грина для кристалла с распределенным недиагональным беспорядком

получены ПКС неупорядоченных систем, качественно соответствующие ПКС аморфных систем. Показано, что конкретный вид ПКС можно получить, подбирая функцию распределения случайной величины, определяющей беспорядок. Из общих соображений

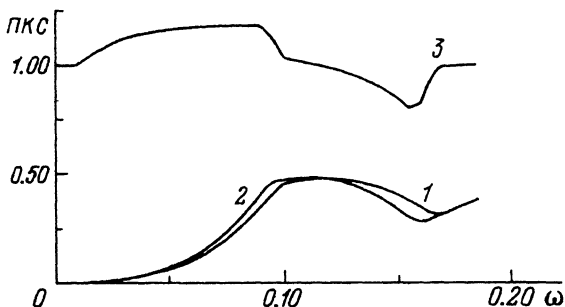


Рис. 3. Низкочастотный участок ПКС, полученные для температур  $T_1$  (1) и  $T_2$  (2) ( $T_1 < T_2$ ), и их отношение (3).

следует, что эта функция определяется физическими свойствами системы и способом ее аморфизации. В классическом пределе высоких температур описано влияние процессов отжига и эффектов ангармонизма на наблюдаемую ПГС. Результаты расчётов качественно согласуются с экспериментами и позволяют сделать некоторые предположения о степени аморфизации и характере процессов отжига в этих системах.

Автор благодарен А. П. Жернову за обсуждение результатов.

#### Список литературы

- [1] Buchenau U., Prager M. // *Phys. Rev. B*. 1986. V. 34. P. 5665—5673.
- [2] Suck J.-B., Rudin H., Guntherodt H.-J., Beck H. // *J. Non-Crys. Sol.* 1991. V. 61—62. P. 295—302.
- [3] Suck J. B. *Dynamics of Disordered Materials*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1989. P. 182—185.
- [4] Syrykh G. F., Zhernov A. P. // *Phonon-90*. 1990. P. 543—545.
- [5] Гальперин Ю. М., Карпов В. Г., Соловьев В. Н. // *ЖЭТФ*. 1988. Т. 94. С. 373—384.
- [6] Землянов М. Г., Малиновский В. К., Новиков В. Н. и др. // *Письма в ЖЭТФ*. 1988. Т. 49. С. 521—523.
- [7] Duval E., Bonkenter A., Achibat T. // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1990. V. 2. P. 10227—10234.
- [8] Саламатов Е. И. // *ФТТ*. 1991. Т. 33. № 9. С. 2601—2609.
- [9] Эллиот Р., Крамхансл Дж., Лис П. // *Теория и свойства неупорядоченных материалов*. М.: Мир. 1977.
- [10] Иванов М. А. // *ФТТ*. 1970. Т. 12. № 7. С. 1895.
- [11] Dederichs P. H., Lehman C., Shols A. // *Phys. Rev. Lett.* 1973. V. 31. P. 1130—1132.
- [12] Zeller R., Dederichs P. H. // *Z. Phys.* 1976. V. 25B. P. 139—146.
- [13] Эренрих Г., Шварц Л. *Электронная структура сплавов*: Пер. с англ. М.: Мир. 1979. 200 с.
- [14] Praestagaard E., Van N. G. // *Kampen. Nol. Physics*. 1981. V. 43. P. 33—45.
- [15] Fonseca T., Gomes J. A. N. Grigolini P., Marchesoni F. // *Advances in Chemical Physisc*. 1985. V. 62. P. 389—443.
- [16] Plakida N. M., Siklos T. // *Acta Physica (Hung.)*. 1978. V. 45. P. 36—74.

Физико-технический институт  
УрО РАН  
Ижевск

Поступило в Редакцию  
10 февраля 1992 г.