

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ АНСАМБЛЯ КВАНТОВЫХ АНГАРМОНИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ В СТЕКЛАХ

М. И. Клингер, Т. Н. Крупенькин, В. Г. Кудряцев

При интерпретации ряда низкотемпературных аномалий как термодинамических, так и других свойств стеклообразных материалов широкое распространение получила модель двухуровневых систем, связанных с туннельными состояниями атомов, находящихся в двухъямных потенциалах [1]. В ряде недавних работ [2-4] был предложен подход, в рамках которого на основе модели «мягких» атомных конфигураций такие двухъямные потенциалы рассматриваются как частный случай более общих «критических» потенциалов, которые можно описать выражением вида

$$V(x) = x^4 + K_2 x^3 + K_1 x^2, \quad (1)$$

где x — безразмерное смещение атома, K_1 и K_2 — случайные безразмерные параметры потенциала. Значения последних фактически изменяются в области $|K_1| \ll 10^2$, $(K_2)^2 \ll 10^2$, причем $K_1 \geq 0$, $K_2 \geq 0$.

Указанные параметры связываются в модели [2, 3] с флуктуациями микроскопических структурных параметров стекла и имеют некоторое вероятностное распределение с плотностью $F(K_1, K_2)$, причем $F(K_1, K_2) = F(K_1, -K_2)$.

Возникающие в таких потенциалах возбуждения с низкой энергией ($\epsilon \ll \hbar \omega_0$), т. е. отвечающие низким возбужденным состояниям системы ангармонических осцилляторов вида (1), имеют практически непрерывный спектр и определяют аномалии низкотемпературных свойств стекол [2, 3]. Очевидно, в такой ситуации основной характеристикой спектра низкоэнергетических возбуждений является его плотность состояний $n(\epsilon)$. Наибольший интерес здесь представляет область возбуждений с энергией $\epsilon \lesssim \Omega$, где $\Omega \sim 1$, $\epsilon = \delta/\omega$ — безразмерная энергия, $\omega \approx 5-20$ К $\ll \hbar \omega_0$ — характерный для мягких конфигураций масштаб колебательной энергии [2, 3]. В этой области энергий основной вклад в $n(\epsilon)$, как показали детальные исследования, вносят первые возбужденные состояния ангармонических осцилляторов [2, 3]. Тогда плотность состояний определяется формулой [2, 3, 5]

$$n(\epsilon) = \iint F(K_1, K_2) \delta(\epsilon(K_1, K_2) - \epsilon) dK_1 dK_2, \quad \int n(\epsilon) d\epsilon = 1. \quad (2)$$

Здесь $\epsilon(K_1, K_2)$ выражает зависимость разности энергий первого возбужденного и основного состояний осциллятора (1) от его параметров K_1 и K_2 [2, 3, 5-7].

Как отмечалось ранее [3, 5-7], функция $\epsilon(K_1, K_2)$ имеет седловые точки, которые приводят к особенностям в плотности состояний $n(\epsilon)$ при некоторой $\epsilon = \epsilon_c \approx 2$. Для актуальной ситуации, характеризуемой аналитическим поведением $F(K_1, K_2)$ вблизи седловых точек, плотность состояний $n(\epsilon)$ при $|\epsilon - \epsilon_c| \ll \Omega$ имеет характерную для двумерного случая (плоскость (K_1, K_2)) логарифмическую особенность ван-хововского типа [8] (см. [3, 5, 7, 9])

$$n(\epsilon) \sim \ln(|1/(\epsilon - \epsilon_c)|). \quad (3)$$

При рассмотрении низкотемпературных аномалий стекла наибольший интерес представляет поведение $n(\epsilon)$ во всей рассматриваемой области $\epsilon \geq 0$ и $(\epsilon - \epsilon_c) \leq \Omega - 2$, которое ранее достаточно полно не исследовалось. Здесь анализируется ситуация в этой области. Функция $F(K_1, K_2)$ аппроксимируется тремя характерными выражениями: аналитическими ($F_1(K_1, K_2)$, $F_2(K_1, K_2)$) и неаналитическим ($F_3(K_1, K_2)$) вблизи $K_1 = 0$, отвечающим двум возможным типам $F(K_1, K_2)$ (и в этом смысле двум типам стекла [3, 10]). Эти функции имеют следующий вид:

$$F(K_1, K_2) = A \sum_{\pm} \exp \left[- \left(\frac{K_1 - \bar{K}_1}{\Delta K_1} \right)^2 - \left(\frac{K_2 \mp \bar{K}_2}{\Delta K_2} \right)^2 \right],$$

$$F_2(K_1, K_2) = A \sum_{\pm} \exp \left[\frac{K_1}{\bar{K}_1} - \left(\frac{K_2 \mp \bar{K}_2}{\Delta K_2} \right)^2 \right] \quad (\text{см. [3, 9]),}$$

$$F_3(K_1, K_2) = |K_1| F_1(K_1, K_2) \quad (\text{см [10, 11]),}$$

где $\bar{K} \sim 10^2$, $\Delta K_1 \sim 10$, $\bar{K}_2 \leq 10$, $(\Delta K_2) \leq 10$, $\bar{K} \sim 10$.

Исследование поведения $n(\epsilon)$ проводилось численно методом Монте-Карло. Суть использованного подхода состоит в следующем [12]: вся исследуемая область энергий $0 \leq$

$\leq \epsilon \leq \Omega$ разбивается на малые интервалы $\Delta \epsilon_i \ll 1$, затем производится выбор некоторого числа N псевдослучайных точек (K_1, K_2) , распределенных с заданной плотностью $F(K_1, K_2)$, и подсчет числа N_i энергетических уровней, попавших в каждый интервал $\Delta \epsilon_i$. Тогда для значений $n(\epsilon_i)$ в точках ϵ_i , являющихся средними точками интервалов $\Delta \epsilon_i$, справедлива оценка $n(\epsilon_i) \approx (1/\Delta \epsilon_i) (N_i/N)$ [12]. Число использованных в расчетах псевдослучайных точек составляло $N \sim 10^6$, а достигнутая точность определения $n(\epsilon)$ не менее 10%. Типичные результаты этих расчетов при различных характеристических значениях параметров и различных функциях $F_1(K_1, K_2)$ и $F_3(K_1, K_2)$, описывающих плотность распределения, значительно различаются (поведение $n(\epsilon)$ при $F(K_1, K_2) = F_2(K_1, K_2)$ фактически аналогично случаю $F(K_1, K_2) = F_1(K_1, K_2)$). В случаях $F_1(K_1, K_2)$ и $F_2(K_1, K_2)$ при различных значениях параметров имеется «пик» $n(\epsilon)$ в точке $\epsilon = \epsilon_c \approx 2$, соответствующей особенности (3) [3, 5]. В случае же $F(K_1, K_2) = F_3(K_1, K_2)$ «пик» $n(\epsilon)$ отсутствует и имеется лишь скачок в производной $d(n(\epsilon))/d\epsilon$ (это согласуется с утверждением, приведенным в [11]). Рассмотрим поведение $n(\epsilon)$ для $F_1(K_1, K_2)$ (или $F_2(K_1, K_2)$). Регрессионный анализ [13] показывает, что на графике $n(\epsilon)$ можно выделить три важнейшие для теории низкотемпературных свойств стекол и ряда других приложений области, в которых подобранные методом наименьших квадратов [13] функции, аппроксимирующие $n(\epsilon)$, имеют вид а) при $0 \leq \epsilon \leq \epsilon_1$

$$n(\epsilon) - n_0 \propto \epsilon^\alpha, \quad (4)$$

где $n_0 = \text{const}$, а α — величина масштаба нескольких десятых и заметно меньше 1 (в данном примере $\alpha \approx 0.6$); б) при $\epsilon_2 \leq \epsilon \leq \epsilon_3$ $n(\epsilon) - n(\epsilon_2) \sim (\epsilon - \epsilon_2)^\beta$ при $\beta \approx 2$ (см. [3]); в) при $\epsilon_4 \leq \epsilon \leq \epsilon_5$ ($\epsilon_4 < \epsilon_c < \epsilon_5$) $n(\epsilon)$ имеет вид (3).¹

Проведенные численный и регрессионный анализы позволяют понять детально поведение рассматриваемой плотности состояний спектра низкоэнергетических возбуждений в мягких атомных конфигурациях $n(\epsilon)$ и проанализировать ее зависимость от вида $F(K_1, K_2)$ — плотности распределения параметров потенциалов. Это рассмотрение не только подтверждает результаты качественного анализа поведения $n(\epsilon)$, представленного в [3], но и дает оценки параметров α , n_0 , ϵ_i ($i=1, 2, 3, 4, 5$). Здесь $\epsilon_1 \approx 0.8$, $\epsilon_2 \approx 1.2$, $\epsilon_3 \approx 1.7$, $\epsilon_4 \approx 1.8$, $\epsilon_5 \approx 2.2$, причем $\epsilon_c \equiv \epsilon(K_1=0, \pm K_{2c})$ при $K_{2c} \approx 1.9$ для $\epsilon_c \approx 2$, при типичных значениях $K_1=100$, $K_2=0$ и $\Delta K_1=60$, $\Delta K_2=3$. В соответствии с [3] поведение $n(\epsilon)$ в области $0 \leq \epsilon \leq \epsilon_1$, описываемое соотношением (4), может позволить понять имеющийся для теплоемкости стекла C_p слабый рост отношения C_p/T с ростом T (при $T \leq 1$ К), а в области $\epsilon_2 \leq \epsilon \leq \epsilon_3$ для стекол с «аналитической» $F(K_1, K_2)$ (например, $F_1(K_1, K_2)$, $F_2(K_1, K_2)$) понять природу «горба» C/T^3 , плато теплопроводности стекла при $5 \leq T \leq 30$ К. Кроме того, проделанный анализ, возможно, позволит детально объяснить особенности ряда других явлений в стеклах, таких как пик нейтронного рассеяния при неупругости $\Delta E \sim w$ (см. [3]) и т. п.

Литература

- [1] Amorphous Solids. Low-temp. Prop. / Ed. W. A. Phillips. Berlin: Springer, 1981. 167 p.
- [2] Klinger M. I. // Phys. Rep. 1983. Vol. 94. N 5. P. 183—312. 1988. Vol. 165. N 5—6. P. 275—397.
- [3] Klinger M. I. // Phys. Rep. 1988. Vol. 165. N 5—6. P. 275—397.
- [4] Карпов В. Г., Клингер М. И. и др. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. Вып. 2. С. 760—774.
- [5] Klinger M. I. // Sol. St. Commun. 1984. Vol. 51. N 7. P. 503—507.
- [6] Клингер М. И., Крупенькин Т. Н. и др. // Письма ЖЭТФ. 1988. Т. 14. Вып. 8. С. 695—699.
- [7] Карпов В. Г., Паршин Д. А. // Письма ЖЭТФ. 1983. Т. 38. Вып. 11. С. 536—539.
- [8] Марадудин А., Монтролл Э., Вейсс Дж. // Динамическая теория кристаллической решетки. М.: Мир, 1965. 382 с.
- [9] Клингер М. И. // УФН. 1987. Т. 152. № 4. С. 623—652.
- [10] Кривоглаз М. А. // Тр. ИФ АН ЭССР. 1986. Т. 59. С. 31—54.
- [11] Ильин М. А., Карпов В. Г., Паршин Д. А. // ЖЭТФ. 1987. Т. 92. Вып. 1. С. 291—295.
- [12] Соболев Н. М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 252 с.
- [13] Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. М.: Статистика, 1973. 212 с.

Физико-технический институт
 им. А. Ф. Иоффе АН СССР, Ленинград

Поступило в Редакцию
 14 октября 1938 г.

¹ В [3, раздел 6.2.1; 5, с. 632, 633] множитель $3/2^{1/2}$ (или $3/4^{1/2}$ в [9, с. 505]) следует заменить на $3 \cdot 2^{1/2}$, а также $E_1(\eta=0, \xi=0) - E_0(\eta=0, \xi=0) \equiv S_1(0, 0) \approx 1.5 \tilde{w} \equiv 1.5w \cdot 2^{1/2}$ и $\epsilon_1^{(c)} \leq \epsilon_1(0, 0) \approx 1.5 \cdot 2^{1/2} \ll \epsilon_2(0, 0) \approx 4 \cdot 2^{1/2}$. Здесь $\tilde{w} \equiv A \eta_L^2$ при $\eta_L \equiv (2\epsilon_0/A)^{1/2} \equiv 2^{1/2} \eta_L$ ($\tilde{w} \approx 10 - 30$ К, но w и \tilde{w} — величины одного порядка).