

# Локализация акустических колебательных мод в слоистой решетке

© А.П. Жернов, Е.П. Чулкин

Российский научный центр "Курчатовский институт",  
123182 Москва, Россия  
Институт сверхпроводимости и физики твердого тела,  
101000 Москва, Россия  
Физико-технический институт,  
426000 Ижевск, Россия

(Поступила в Редакцию 29 июля 1997 г.)

Рассмотрена возможность слабой локализации акустических фононных мод в неидеальной слоистой кристаллической решетке. Для области низких температур получены аналитические выражения для тензоров коэффициентов теплопроводности и диффузии. Проанализирована роль специфических интерференционных процессов рассеяния фононов на флуктуациях фононной плотности вблизи дефектов в условиях слабого взаимодействия между слоями. Показано, что при сильном диагональном беспорядке за счет таких процессов в области относительно низких частот, где законы дисперсии акустических фононных мод проявляют квазидвумерные свойства, может иметь место существенная перенормировка коэффициента диффузии. Обсуждается нестандартная низкотемпературная зависимость теплопроводности слоистых систем BSCCO и BSYCO.

В настоящее время значительное внимание уделяется проблеме слабой локализации фононных мод, а также звуковых волн в неупорядоченных соединениях. Исследован ряд общих вопросов для стандартных трехмерных решеток (см., например, [1–8]). Ранее нами также изучалась локализация фононов. При этом мы рассматривали решетки с недиагональным беспорядком и учитывали взаимное влияние примесей. Особое внимание было уделено случаю систем с резонансно рассеивающими примесными центрами, когда возможно кроссовое расщепление спектра и возникают пороги локализации. Анализировались модели, в рамках которых можно получать последовательные решения (см. случаи гармонической и ангармонической систем в [9,10] и [11,12]). Полученные теоретические результаты использованы нами для объяснения низкотемпературного поведения обратной длины затухания ультразвука в аморфных диэлектриках [13] (имеется в виду температурный интервал, где наблюдается плато в теплопроводности) и температурной зависимости теплопроводности квантовых кристаллов параводорода с тяжелыми примесями неона и аргона [14].

В данной работе мы обсуждаем возможность слабой локализации колебательных возбуждений в некоторых неидеальных сильно анизотропных гармонических решетках. Принимается, что отдельные слои таких решеток слабо связаны между собой и они проявляют двухмерные свойства. Рассматриваются два типа акустических колебательных мод. Их отличительный признак следующий. В случае мод первого типа соответствующие вектора смещений ориентированы параллельно слоям, в которых атомы сильно взаимодействуют. Для мод второго типа вектор смещений перпендикулярен слоям. Как известно, такие волны напоминают волны изгиба в невзаимодействующих слоях и их называют "изгибными колебаниями". Они впервые рассмотрены были в работах Лифшица (см., например, [15]). Закон дисперсии изгибных колебаний квадратичен в длинно-

волновой части спектра. Подобные моды обнаружены при исследовании тепловых свойств графита и нитрида бора, а также слоистых кристаллов с большим числом атомов разного сорта в элементарной решетке, например в соединении  $\text{CsDy}(\text{MoO}_4)_2$  [16]. Что касается модели беспорядка, то мы ограничиваемся случаем диагонального беспорядка. Конкретно нами исследуется частотное поведение тензора коэффициента диффузии. При этом определяется усредненная по примесным конфигурациям двухчастичная решеточная гриновская функция с учетом процессов "когерентного обратного рассеяния". Отметим, что вопросы слабой локализации фононных мод в сильно анизотропных слоистых решетках практически не рассматривались в литературе.

В рамках развитой теории мы обсуждаем нестандартную температурную зависимость теплопроводности монокристаллов слоистых систем: высокотемпературного сверхпроводника (BTCП)  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$  (BSCCO) и его диэлектрического аналога  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{YCu}_2\text{O}_8$  (BSYCO).

## 1. Решеточная теплопроводность и коэффициент диффузии

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

$$H = H_0 + H_i,$$

$$H_0 = \frac{1}{2M_0} \sum_{s,\alpha} (p_s^\alpha)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{s,s' \\ \alpha\alpha'}} \Phi_{\alpha\alpha'}^{ss'} u_s^\alpha u_{s'}^{\alpha'},$$

$$H_i = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{M} - \frac{1}{M_0} \right) \sum_{s,\alpha} c_s (p_s^\alpha)^2.$$

Здесь посредством  $H_0$  обозначен гамильтониан невозмущенной гармонической атомной решетки,  $H_i$  — возму-

шение из-за примесей в этой системе. Величины  $u_s^\alpha$  и  $p_s^\alpha$  суть декартовы компоненты операторов смещения и импульса  $s$ -атома ( $s$ -узельный индекс),  $M$  и  $M_0$  — массы атомов соответственно примесного и регулярной решетки,  $\Phi_{\alpha\alpha'}^{ss'}$  — элементы матриц силовых параметров второго порядка. Принимается, что беспорядок является диагональным. Иными словами, мы пренебрегаем изменением околоримесных силовых параметров, т.е. дефекты считаются изотопическими. Фактор  $c_s$  равен нулю, если в узле  $s$  находится атом матрицы, и равен единице, если в этом узле точечный дефект. Далее символ  $\langle \dots \rangle_c$  означает операцию усреднения по реализующимся примесным конфигурациям. Конфигурационное среднее  $\langle c_s \rangle_c = c$ , т.е. равно концентрации примесей.

Простоты ради предполагается, что матрицы силовых параметров диагональны по декартовым индексам. С целью сокращения записи совокупность узельного  $s$  и декартова  $\alpha$  индексов обозначается как  $s$ .

Тензор решеточной теплопроводности  $\varkappa_{\alpha\alpha'}$  выражается в терминах корреляционной функции операторов потока энергии  $f$ . Мы имеем (см., например, [17])

$$\varkappa_{\alpha\alpha'} = \frac{1}{2T^2V} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \langle f_\alpha(t), f_{\alpha'}(0) \rangle \rangle_c, \quad (1)$$

где  $T$  — температура и  $V$ -объем элементарной ячейки решетки. Символ  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по равновесному термодинамическому распределению с гамильтонианом  $H$ . Фигурирующая в (1) величина  $f_\alpha$  определяется как

$$f_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} \Phi_{\alpha\alpha'}^{ss'} u_s^\alpha \frac{P_{s'}^{\alpha'}}{M_{s'}} R_{\alpha'}^{ss'}, \quad R_{\alpha'}^{ss'} = R_s^\alpha - R_{s'}^{\alpha'}, \quad (2)$$

где  $R_s^\alpha$  — компонента радиус-вектор  $s$ -го узла решетки.

С учетом явного вида гамильтониана системы  $H$  и соотношения (2) выражение (1) можно представить в форме

$$\begin{aligned} \varkappa_{\alpha\alpha'} &= \frac{1}{3\pi T^2} \sum_{s,s'} \sum_{s_1,s_1'} R_{\alpha'}^{ss'} R_{\alpha'}^{s_1s_1'} \Phi_{s,s'} \Phi_{s_1,s_1'} \\ &\times \int_0^\infty d\omega \omega^2 n(\omega) (n(\omega) + 1) \langle G_{ss_1}^+(\omega) G_{s_1's'}^-(\omega) \rangle_c, \\ n(\omega) &= (\exp(\omega/T) - 1)^{-1}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь через  $G_{ss'}^\pm$  обозначены запаздывающая и опережающая решеточные одночастичные гриновские функции ( $G$ -функции). Эти  $G$ -функции "собраны" на операторах динамических атомных смещений  $u_s$ . Заметим, что величина  $G_2 = \langle G^+ G^- \rangle_c$  является двухчастичной гриновской функцией.

Мы рассматриваем слоистый кристалл. Его решетка обладает осевой симметрией. При этом тензор  $\varkappa$  имеет два главных значения, которые обозначаем как  $\varkappa_{\parallel}$  и  $\varkappa_{\perp}$ .

Перейдем в (3) из узельного представления в импульсное представление. После ряда преобразований для

диагональной  $\alpha$ -компоненты коэффициента теплопроводности получаем выражение в виде суммы вкладов от фононных мод двух типов. Они соответствуют колебательным модам, возникающим при смещении атомов в плоскости слоя и вдоль оси  $z$  (в дальнейшем  $l$ - и  $b$ -моды). Именно

$$\begin{aligned} \varkappa_{\alpha\alpha} &= \frac{1}{NT^2} \sum_{\mathbf{k}j} \omega_j^2(\mathbf{k}) n(\omega_j(\mathbf{k})) (n(\omega_j(\mathbf{k})) + 1) \\ &\times D_{\alpha\alpha}^{(j)}(\omega_j(\mathbf{k})), \quad j = l, b \end{aligned} \quad (4)$$

( $N$  — число атомов решетки на единицу объема). По определению

$$\begin{aligned} D_{\alpha\alpha'}^{(j)}(\omega) &= \frac{1}{g_j(\omega)} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} v_\alpha^{(j)}(\mathbf{k}) v_{\alpha'}^{(j)}(\mathbf{k}') \omega_j(\mathbf{k}) \omega_j(\mathbf{k}') \\ &\times G_2^{(j)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega). \end{aligned} \quad (5)$$

В (4), (5)  $\omega_j(\mathbf{k})$  и  $\mathbf{v}^{(j)} = \frac{\partial \omega_j(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$  — закон дисперсии и групповая скорость фононной моды с квазиимпульсом  $\mathbf{k}$ ,  $g_j(\omega)$  — спектральная функция парциальной плотности колебательных состояний. Считается, что  $\omega_l^2(\mathbf{k}) = \sum_s \Phi_{xx}^{0s} \cos(\mathbf{k}\mathbf{R}_s)$ . Если  $j = b$ , то  $\omega_b^2$  выражается через  $\Phi_{zz}^{0s}$  (см. раздел 3). Кроме того, мы положили, что пространственные фурье-компоненты двух- и одночастичной  $G$ -функций связаны равенством

$$G_2^{(j)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) = \lim_{\Omega \rightarrow 0} \langle G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{(j)+}(\omega) G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{(j)-}(\omega - \Omega) \rangle_c.$$

Принимается, что конфигурационно усредненная одночастичная гриновская функции  $j$ -моды описывается соотношением вида

$$\bar{G}_{(k)}^{(j)+}(\omega) = \left( \omega^2 - \omega_j^2(\mathbf{k}) - i \frac{\omega}{\tau_i^{(j)}(\omega)} \right)^{-1}. \quad (6)$$

Здесь  $\omega/\tau_i^{(j)}(\omega)$  — мнимая часть поляризационного оператора, отвечающего упругому взаимодействию фононных мод с точечными дефектами. При этом (см., например, [17])

$$1/\tau_i^{(j)}(\omega) = \sigma_m \omega^3 g_j(\omega^2), \quad (7)$$

где

$$\sigma_m = \frac{\pi}{2} c \left( \frac{M - M_0}{M_0} \right)^2 = \frac{\pi}{2} c \varepsilon^2$$

— параметр диагонального беспорядка.

Поясним физический смысл фактора  $D$  (5). Обратим внимание на то, что вероятность возникшего в узле  $s$  в момент  $t = 0$  локализованного возбуждения достигнуть узла  $s'$  в момент  $t \neq 0$  пропорциональна фактору

$$W_{ss'}(t) = [\dot{G}_{ss'}(t)]^2.$$

Фурье-компонента фактора  $W$ , усредненного по реализующимся примесным конфигурациям, выражается через

Фурье-компоненту двухчастичной гриновской функции  $G_2 = \langle G^+ G^- \rangle_c$  посредством соотношения

$$\begin{aligned} W(\mathbf{q}) &= N^{-1} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \omega(\mathbf{k})\omega(\mathbf{k}') G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega) \\ &= N^{-1} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \omega(\mathbf{k})\omega(\mathbf{k}') \langle G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^+(\omega) G_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^-(\omega) \rangle_c. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что величина  $D_{\alpha\alpha'}(\omega)$  представляет собой одну из компонент тензора коэффициента диффузии. Выражение для коэффициента  $D$  в форме типа (5) для фоновых мод см. также, например, в [17–19].

Как хорошо известно, в случае диэлектриков в области предельно низких температур длины пробега фононов  $l_{ph}$  определяются геометрическими размерами образца. При сравнительно высоких температурах величина  $l_{ph}$  диктуется ангармоническими процессами рассеяния с перебросом. В промежуточной области длина пробега чувствительна к дефектам (см., например, [20]). Соотношение (4) с разумной точностью описывает поведение  $\varkappa$  именно в интервале промежуточных температур.

В разделе 2 излагается модель слоистой решетки и задаются фигурирующие в выражениях для теплопроводности и коэффициента диффузии параметры фоновой спектра  $\omega_j(\mathbf{k})$ ,  $v_{\alpha}^{(j)}(\mathbf{k})$  и  $g_j(\omega)$ . Что касается двухчастичной функции  $G_2^{(j)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega)$ , то она определяется в режиме слабой локализации в разделе 3. Там же определяются продольные и поперечные составляющие парциальных коэффициентов диффузии  $D_{\parallel}^{(j)}$  и  $D_{\perp}^{(j)}$ . В разделе 4 обсуждаются эксперименты по теплопроводности.

## 2. Модель кристаллической решетки

1) **З а к о н ы д и с п е р с и и.** Будем считать, что в кристаллической решетке взаимодействие между атомами в базисной плоскости ( $xOy$ ) намного сильнее вдоль оси  $z$ . Иными словами, отдельные слои решетки слабо связаны между собой. Простоты ради примем, что колебания с вектором смещений  $\mathbf{u}$ , лежащим в плоскости  $xOy$ , и колебания вдоль оси  $z$  являются независимыми.

В общем случае частоты акустических колебательных мод суть собственные значения Фурье-компоненты матрицы динамических силовых параметров второго порядка. Эта матрица задается посредством соотношения вида

$$\Phi_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) = \sum_s \Phi_{\alpha\alpha'}^{0s} (\cos(\mathbf{k}\mathbf{R}_s) - 1). \quad (8)$$

Мы будем рассматривать колебательные моды с относительно низкими частотами. При этом соответствующие значения квазиимпульсов  $\mathbf{k}$  ограничены условием

$$ak_{x(y)} \ll 1. \quad (9)$$

Что касается величины  $bk_z$ , то она может быть и не малой. Здесь и далее под  $\{a, b\}$  подразумеваются компоненты трансляционного вектора решетки ( $a$  — параметр

решетки в слое и  $b$  — параметр, характеризующий расстояние между слоями).

Зададим закон дисперсии для продольных колебаний атомов в плоскости слоя. Согласно определению (8) и условию (9), имеем

$$\begin{aligned} M_0\omega_l^2(\mathbf{k}) &\approx -\frac{1}{2} \sum_{s_{\parallel}} \Phi_{xx}^{0s_{\parallel}} R_{s_{\parallel}}^x R_{s_{\parallel}}^x k_{\parallel}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{s_{\perp}} \Phi_{xx}^{0s_{\perp}} (\cos(\mathbf{k}_{\perp}\mathbf{R}_{s_{\perp}}) - 1), \quad (10) \end{aligned}$$

где  $k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2$  и  $k_{\perp} \parallel z$ . Заметим, что силовые параметры  $\Phi_{xx}^{0s_{\parallel}}$  и  $\Phi_{xx}^{0s_{\perp}}$  характеризуют взаимодействие в плоскости  $xOy$  и вдоль оси  $z$ . Выше принято

$$|\Phi_{xx}^{0s_{\perp}}| \ll |\Phi_{xx}^{0s_{\parallel}}|. \quad (11)$$

В предположении, что взаимодействуют только ближайшие соседние атомы, вместо (10) получаем

$$\omega_l^2(\mathbf{k}) \approx v_{\parallel}^{(l)2} k_{\parallel}^2 + 2\omega_1^2 \sin^2 \frac{bk_{\perp}}{2}, \quad v_{\parallel}^{(l)} = a\omega_3/2. \quad (12)$$

Здесь  $v_{\parallel}^{(l)}$  — продольная скорость звука  $l$ -моды. Частоты  $\omega_1$  и  $\omega_3$  выражаются через параметры  $\Phi_{xx}^{0s_{\perp}}$  и  $\Phi_{xx}^{0s_{\parallel}}$ . В силу (11)  $\omega_1^2 \ll \omega_3^2$ .

Перейдем к модам изгибного типа. С использованием (8) и (9) можно написать, что

$$\begin{aligned} M_0\omega_b^2(\mathbf{k}) &\approx -\frac{1}{2} \sum_{s_{\parallel}} \Phi_{zz}^{0s_{\parallel}} (R_{s_{\parallel}}^z)^2 k_{\parallel}^2 + \frac{1}{4} \sum_{s_{\parallel}} \Phi_{zz}^{0s_{\parallel}} (R_{s_{\parallel}}^z)^4 k_{\parallel}^4 \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{s_{\perp}} \Phi_{zz}^{0s_{\perp}} \sin^2 \frac{bk_{\perp}}{2}. \quad (13) \end{aligned}$$

Как хорошо известно, в общем случае в отсутствие напряжений тензор

$$S_{\alpha\alpha',\alpha_1\alpha_1'} = \sum_s \Phi_{\alpha\alpha'}^{0s} R_s^{\alpha_1} R_s^{\alpha_1'}$$

симметричен относительно перестановки пар индексов  $\alpha, \alpha'$  и  $\alpha_1, \alpha_1'$ . Применительно к рассматриваемой ситуации это означает, что

$$\sum_{s_{\parallel}} \Phi_{zz}^{0s_{\parallel}} R_{s_{\parallel}}^x R_{s_{\parallel}}^x = \sum_{s_{\perp}} \Phi_{xx}^{0s_{\perp}} R_{s_{\perp}}^z R_{s_{\perp}}^z. \quad (14)$$

Отсюда следует, что в законе дисперсии для изгибных мод (поскольку переопределяется первый член в (13)) должны фигурировать три характерных силовых параметра, а именно: наряду с параметрами  $\Phi_{zz}^{0s_{\perp}}$  и  $\Phi_{zz}^{0s_{\parallel}}$  ( $|\Phi_{zz}^{0s_{\parallel}}| \approx |\Phi_{xx}^{0s_{\parallel}}|$ ) возникает также и параметр  $\Phi_{xx}^{0s_{\perp}}$ . Величина  $\Phi_{\alpha\alpha}^{0s}$  определяется преимущественно центральными силами. Поэтому поперечные силовые параметры много

меньше, чем продольные. В результате с учетом слабого взаимодействия между слоями имеем

$$|\Phi_{xx}^{0s\perp}| \ll |\Phi_{zz}^{0s\perp}| \ll |\Phi_{zz}^{0s\parallel}|. \quad (15)$$

С использованием (14) вместо (13) получаем

$$\omega_b^2(\mathbf{k}) \approx \omega_1^2 b^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2 + \left(\frac{\tilde{\omega}_3 a^2}{\pi}\right)^2 \mathbf{k}_{\parallel}^4 + 2\omega_2^2 \sin^2\left(\frac{bk_{\perp}}{2}\right). \quad (16)$$

Трем характерным частотам соответствуют три силовых параметра (15). Эти частоты удовлетворяют условиям  $\omega_1^2 \ll \omega_2^2 \ll \tilde{\omega}_3^2$ . В дальнейшем ради простоты мы полагаем, что фигурирующие в (12) и (16) частоты  $\omega_3$  и  $\tilde{\omega}_3$  одного порядка и не делаем между ними различия.

Обратим внимание на следующее обстоятельство. Мы предполагаем наличие сильной анизотропии силового межатомного взаимодействия. Одновременно считается, что параметры элементарной ячейки могут иметь разный порядок величины (мы рассматриваем оба случая:  $a \approx b$  и  $a \ll b$ ). В принципе, если при описании изгибных колебаний ограничиться взаимодействием только ближайших соседей в базисной плоскости, то могут нарушаться условия инвариантности потенциальной энергии взаимодействия атомов решетки друг с другом как целого относительно произвольного поворота. Дело в том, что в кристаллических решетках со слоистой структурой реально межатомные связи ковалентные и потенциал не парный, а многочастичный. Поэтому при описании изгибных мод, вообще говоря, необходимо учитывать, что фактически межатомные взаимодействия в базисной плоскости распространяются на несколько координационных сфер.

Итак, мы определили анизотропные законы дисперсии для  $l$ - и  $b$ -мод. Проанализируем соответствующие формулы (12) и (16). Из формул следует, что в низкочастотной области вплоть до частоты  $\omega_1$  величины  $\omega_l$  и  $\omega_b$  зависят, вообще говоря, от обеих составляющих квазиимпульсов  $\mathbf{k}_{\parallel}$  и  $\mathbf{k}_{\perp}$ . Если частота продольной моды лежит в интервале  $2\omega_1^2 \leq \omega_l^2 < \omega_3^2$ , то второй член в (12) сравнительно мал. Поэтому  $\omega_l$  слабо зависит от поперечной составляющей квазиимпульса  $\mathbf{k}_{\perp}$ . Вследствие чего закон дисперсии  $l$ -мод для таких частот приближенно отвечает случаю двумерной решетки. Одновременно для изгибной моды в интервале  $\omega_2^2 \ll \omega_b^2 \ll \omega_3^2$  можно пренебречь в выражении для  $\omega_b$  (16) первым и третьим членами. При этом оказывается, что  $\omega_b$  не зависит от составляющей квазиимпульса  $\mathbf{k}_{\perp}$  и пропорционально  $\mathbf{k}_{\parallel}^2$ . Таким образом в более узком интервале закон дисперсии  $\omega_b$  также оказывается квазидвухмерным.

Подробно о модели см. [21].

2) Спектральные плотности парциальных колебательных состояний. Спектральная парциальная функция квадрата плотности фононных состояний  $g_{l,b}(\omega^2)$  определяется как

$$g_{l,b}(\omega^2) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega^2 - \omega_{l,b}^2(\mathbf{k})). \quad (17)$$

При конкретных вычислениях удобно перейти в (17) от суммирования по  $\mathbf{k}$  к интегрированию по  $d\mathbf{k}$ . При этом в слоистой решетке сумму  $\sum_{\mathbf{k}}$  удобно заменить на

$$\frac{a^2 b}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/b}^{\pi/b} dk_{\perp} \int_0^{2\pi} d\varphi \int dk_{\parallel} \dots \quad (17a)$$

Рассмотрим спектральную плотность продольных мод  $g_l(\omega^2)$ . С использованием соотношений (12), (17) и (17a) после ряда преобразований получаем

$$g_l(\omega^2) \approx \begin{cases} \frac{1}{\pi^2 \omega_3} \arccos \left[ \frac{\omega_1^2 - \omega^2}{\omega_1^2} \right], & 0 < \omega^2 \leq 2\omega_1^2, \\ \frac{1}{\pi \omega_3^2}, & 2\omega_1^2 \leq \omega^2 < \omega_3^2. \end{cases} \quad (18)$$

Прокомментируем формулу (18). Во-первых, в низкочастотной области  $0 < \omega^2 < 2\omega_1^2$  она применима, когда одновременно выполнены условия  $ak_{x(y)} \ll 1$  и  $bk_z \ll 1$  (при этом  $g_l(\omega^2) \sim \frac{\omega}{\omega_3^2 \omega_1}$ ). Она остается справедливой, когда  $k_{x(y)} a \ll 1$ , а условие  $bk_z \ll 1$  нарушается. Интересно также, что в интервале  $2\omega_1^2 \leq \omega^2 < \omega_3^2$  функция  $g_l(\omega^2)$  слабо зависит от частоты.

Перейдем к случаю изгибных колебаний. Опираясь на соотношения (16), (17) и (17a), можно показать, что

$$g_b(\omega^2) \approx \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{(2\pi^2)^3} \frac{a^2}{b^2} \frac{\omega}{\omega_1^2 \omega_2}, & 0 < \omega^2 < \omega_1^2, \\ \frac{1}{4\sqrt{2}} \frac{1}{\omega_2 \omega_3} \arccos \left( \frac{\omega_*}{\omega} \right), & \omega_1^2 < \omega_*^2 < \omega^2 < \omega_2^2, \\ \frac{\pi}{8} \frac{1}{\omega_3 \omega}, & 2\omega_2^2 < \omega^2 < \omega_3^2 \end{cases} \quad (19)$$

(вывод (19) дан в Приложении). Отметим, что величина  $g_b$  представляет собой возрастающую функцию от частоты при  $\omega \leq \omega_2$ . В области же  $2\omega_2^2 < \omega^2 < \omega_3^2$  она является (в отличие от  $g_l$ ) функцией убывающей.

Обратим внимание на то, что функции  $g_l$  и  $g_b$  посредством (18) и (19) определены практически во всем интервале низких частот.

### 3. Коэффициент диффузии в случае анизотропной нерегулярной гармонической системы

Мы рассматриваем решетки, для которых в спектре акустических мод отсутствуют точки вырождения. По этой причине вклады  $l$ - и  $b$ -мод в коэффициент диффузии оказываются независимыми. Принимая во внимание сказанное, перейдем к определению двухчастичных функций  $G_2^{(l)}$  и  $G_2^{(b)}$ .

1) Уравнение Бете-Солпитера. Функцию Грина  $G_2^{(j)}$ , где  $j = \{l, b\}$ , можно представить в виде ряда по концентрации дефектов  $c$ . В случае гармонической атомной системы с дефектами точечного типа отдельные члены ряда в координатном представлении

графически изображается следующим образом:

$$\langle G_{ss_1}^{(j)+} G_{s'_1 s'}^{(j)-} \rangle_c =$$

$$+ \dots \quad (20)$$

Выше  $s \longrightarrow s' = \bar{G}_{ss'}^{(j)}$  — конфигурационно усредненная одночастичная гриновская функция для моды  $j$ -типа. Индексами  $s$  и  $d$  обозначены произвольный и примесный узлы решетки. Штриховая линия соответствует ”затравочной” вершине  $\Gamma_j = ct_j^+ t_j^-$ , где  $t_j^\pm = \lambda(1 - \lambda \bar{G}_{ss}^{(j)\pm})^{-1}$  — одноузловая матрица рассеяния. С целью сокращения записи положено  $\lambda = (M - M_0)\omega^2$  (см. вывод уравнения (20) в [9]).

Отметим, что формально в (20) фигурируют все графики, которые описывают перенормировку одночастичной  $G$ -функции нерегулярной решетки и не содержат взаимодействия между входящими линиями. Из числа графиков, содержащих взаимодействие между входящими линиями, приведены три первых. Они описывают одно- и двухкратное рассеяние.

В импульсном представлении уравнение (20) можно записать в форме

$$\begin{aligned} G_2^{(j)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega) &= \lim_{\Omega \rightarrow 0} \langle G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{(j)+}(\omega) G_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{(j)-}(\omega - \Omega) \rangle_c \\ &= \lim_{\Omega \rightarrow 0} \left( \bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)+}(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)-}(\omega - \Omega) \right. \\ &\quad \times \left( \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}_1} U_j(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \omega, \Omega) \right. \\ &\quad \left. \left. \times G_2^{(j)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}', \omega, \Omega) \right) \right). \end{aligned} \quad (21)$$

Подобные соотношения называют уравнениями Бете-Солпитера.

Фигурирующая здесь гриновская функция  $\bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)+}(\omega)$  задается посредством формулы (6). Затем мы принимаем, что в вершинную часть  $U_j$  вносят вклад только ”веерные” диаграммы, т. е. вторая, четвертая и подобные ей в уравнении (20). Диаграммы такого типа описывают процессы обратного когерентного рассеяния и определяют режим слабой локализации. Имеем

$$U_j(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega, \Omega) = \frac{\Gamma_j}{N} \left( 1 - \frac{\Gamma_j}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} \bar{G}_{\mathbf{k}_1}^{(j)+}(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}}^{(j)-}(\omega - \Omega) \right)^{-1},$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{k}'.$$

Существенно, что вершинные части  $\Gamma_j$  удовлетворяют тождеству Уорда

$$c(t_j^+(\omega) - t_j^-(\omega)) = \frac{\Gamma_j}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)+}(\omega) - \bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)-}(\omega)).$$

Отсюда для области частот  $0 \leq \omega^2 \leq \omega_3^2$  с учетом (6) и (7) находим

$$\Gamma_j(\omega) \approx \frac{1}{\pi} \frac{\omega}{\tau_i^{(j)}(\omega) g_j(\omega^2)}. \quad (22)$$

2) Д и ф ф у з и о н н ы е в е р ш и н ы. Определим явным образом вершинные части  $U_j(\mathbf{q}; \omega; \Omega)$  в режиме слабой локализации, когда выполнены условия

$$ql_{\text{ph}}^{(j)} \ll 1, \quad \Omega \tau_i^{(j)}(\omega) \ll 1. \quad (23)$$

Здесь  $l_{\text{ph}}^{(j)} = v^{(j)} \tau_i^{(j)}(\omega)$  — длина пробега фонона  $j$ -го типа.

В пределе низких частот  $0 < \omega^2 \leq 2\omega_1^2$ , когда решетку можно рассматривать как трехмерную, согласно [2,9], вершинная часть  $U_j$  описывается соотношениями

$$U_j(\mathbf{q}; \omega; \Omega) = \frac{\omega}{(\tau_i^{(j)}(\omega))^2} \frac{1}{\pi g_j(\omega^2)} \frac{1}{(\dot{D}(\omega)q^2 - i\Omega)},$$

$$\dot{D} = \frac{1}{3} v_j^2 \tau_i^{(j)}(\omega). \quad (24)$$

Перейдем к промежуточным частотам, при которых фононные моды ведут себя как квазидвухмерные возбуждения. В случае  $l$ -мод с использованием (12), (18) и (21) можно показать, что в интервале  $2\omega_1^2 \leq \omega^2 < \omega_3^2$  выполняется приближенное равенство вида

$$U_l(\mathbf{q}; \omega; \Omega) \approx \frac{\omega \omega_3^2}{(\tau_i^{(l)}(\omega))^2} \frac{1}{(R_l(\mathbf{q}, \omega) \tau_i^{(l)}(\omega) - i\Omega)}. \quad (25)$$

где

$$R_l(\mathbf{q}, \omega) = \frac{q_{\parallel}^2 v_{\parallel}^{(l)2}}{2} \left( 1 - \frac{\omega_1^2}{\omega^2} \right) + \frac{\omega_1^4}{2\omega^2} \sin \frac{q_{\perp} b}{2},$$

$$q_{\parallel}^2 = q_x^2 + q_y^2, \quad q_{\perp} \parallel z.$$

Что касается мод  $b$ -типа, то с использованием (16), (19) и (21) в интервале частот  $2\omega_2^2 < \omega^2 < \omega_3^2$  имеем

$$U_b(\mathbf{q}; \omega; \Omega) \approx \frac{2\omega^2\omega_3}{\pi^2(\tau_i^{(b)}(\omega))^2} \times \frac{1}{(R_b(\mathbf{q}, \omega)\tau_i^{(b)}(\omega) - i\Omega)}, \quad (26)$$

где

$$R_b(\mathbf{q}, \omega) = 2q_{\parallel}^2 v_{\parallel}^{(b)2}(\omega) \left(1 - \frac{\omega_2^2}{\omega^2}\right) + \frac{\omega_2^4}{2\omega^2} \sin^2 \frac{q_{\perp} b}{2},$$

$$v_{\parallel}^{(b)} = \frac{1}{\pi} \sqrt{\omega\omega_3}.$$

Подразумевается  $\omega \approx \omega_j(\mathbf{k})$ , так что  $v_{\parallel}^{(b)}(\omega) \approx \frac{a}{\pi} \sqrt{\omega_b(\mathbf{k})\omega_3}$  — групповая скорость изгибной моды. Отметим, что выражения (24)–(26) имеют сходную структуру.

3) Определение коэффициента диффузии в режиме слабой локализации. Найдем главные значения тензора  $D^{(j)}$  в ситуации, когда выполнены условия (23). С учетом соотношений (5) и (21) можно положить, что

$$\{D_{\parallel}^{(j)}, D_{\perp}^{(j)}\} = \{D_{\parallel}^{(j,1)}, D_{\perp}^{(j,1)}\} - \{D_{\parallel}^{(j,2)}, D_{\perp}^{(j,2)}\}, \quad (27)$$

где

$$\{D_{\parallel}^{(j,1)}, D_{\perp}^{(j,1)}\} = \frac{1}{4\pi g_j(\omega)} \lim_{\Omega \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{\partial \omega_j^2(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}_{\parallel}}, \frac{\partial \omega_j^2(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}_{\perp}} \right\} \times \bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)+}(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)-}(\omega + \Omega), \quad (28)$$

$$\{D_{\parallel}^{(j,2)}, D_{\perp}^{(j,2)}\} = \frac{1}{4\pi g_j(\omega)} \lim_{\Omega \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{q} \leq \mathbf{q}_j^{(\parallel)}, \mathbf{q}_j^{(\perp)}} U_j(\mathbf{q}; \omega, \Omega) \times \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{\partial \omega_j^2(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}_{\parallel}}, \frac{\partial \omega_j^2(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}_{\perp}} \right\} \bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)+}(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)-}(\omega + \Omega) \times \bar{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{+}(\omega) \bar{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(j)-}(\omega + \Omega). \quad (29)$$

Первое слагаемое в (27) представляет собой коэффициент диффузии без учета процессов, описываемых веерными диаграммами. Второе слагаемое определяет изменение его величины из-за вклада от веерных диаграмм (т.е. из-за специфических интерференционных процессов рассеяния вблизи дефектов). В решетках с сильно анизотропным межатомным силовым взаимодействием суммирование по  $\mathbf{q}$  ограничено двумя малыми величинами  $q_j^{(\parallel, \perp)} \approx \pi/l_{\parallel, \perp}^{(j)}(\omega)$ . При этом если  $a \approx b$ , то длины пробега  $l_{\parallel, \perp}^{(j)} = v_{\parallel, \perp}^{(j)} \tau_i^{(j)}(\omega)$ . Если же параметры элементарной ячейки  $a$  и  $b$  сильно различаются, т.е.  $a \ll b$ , то может реализоваться ситуация, когда  $q_j^{(\perp)} \approx \pi/b$ .

Ограничимся далее статическим случаем  $\Omega \rightarrow 0$ . Рассмотрим сначала  $p$ -моды. В низкочастотной трехмерной области  $0 < \omega^2 \leq 2\omega_1^2$  (она ниже помечается индексом 1) с учетом явного вида закона дисперсии (12) после ряда преобразований вместо (28) находим

$$\{D_{\parallel}^{(l,1)}, D_{\perp}^{(l,1)}\}_1 \approx \left\{ \frac{\omega_1^2 \tau_i^l(\omega)}{2\pi g_l(\omega) \omega \omega_3^2} \times \left[ 4v_{\parallel}^{(l)2} Z_{\parallel}^{(l)} \left( \frac{\omega^2}{\omega_1^2} \right), v_{\perp}^2 Z_{\perp}^{(l)} \left( \frac{\omega^2}{\omega_1^2} \right) \right] \right\}_1, \quad (30)$$

где

$$Z_{\parallel}^{(l)}(x) = (x-1) \arccos(1-x) + \sqrt{2x-x^2},$$

$$Z_{\perp}^{(l)}(x) = \arccos(1-x) - (1-x) \sqrt{2x-x^2}.$$

В пределе  $\omega \rightarrow 0$  из (30) получается обычного вида формула для коэффициента диффузии

$$\{D_{\parallel}^{(l,1)}, D_{\perp}^{(l,1)}\}_1 \approx \frac{1}{3} \left\{ \tau_i^{(l)}(\omega) \left[ 4v_{\parallel}^{(l)2}, v_{\perp}^{(l)2} \right] \right\}_1. \quad (31)$$

Что касается интерференционного члена (29), то, как показано в [2,9], по сравнению с величинами, которые определяются выражениями (30), (31), он порядка

$$-\frac{3a^2b}{2\pi^2 g_l(\omega) \tau_i^{(l)2}(\omega) v_{\parallel}^{(l)3}}. \quad (32)$$

Когда механизм релаксации фононных мод является рэлеевским, подобная поправка (порядка  $c^2 \frac{\omega_D^6}{\omega^6}$ , где  $\omega_D$  — дебаевская частота) незначительна. Но при наличии в системе резонансно рассеивающих примесных центров возможно кроссовое расщепление колебательных ветвей. В окрестности щелей оказывается малой групповая скорость фононов. Здесь учет интерференционного механизма важен. Применительно к слоистой решетке такой случай требует специального рассмотрения.

Определим коэффициент диффузии  $D^{(l)}$  в области  $2\omega_1^2 \leq \omega^2 < \omega_3^2$  (она маркируется индексом  $2l$ ), в которой закон дисперсии  $l$ -мод является квазидвухмерным. С этой целью в (28) выполним интегрирование по  $dk_{\parallel}$ , основываясь на применении теоремы о вычетах, затем по  $dk_{\perp}$  непосредственно. Имеем

$$\{D_{\parallel}^{(l,1)}, D_{\perp}^{(l,1)}\}_{2l} \approx \left\{ \frac{1}{2\pi g_l(\omega)} \frac{\tau_i^l(\omega)}{\omega \omega_3} \times [4v_{\parallel}^{(l)2}(\omega^2 - \omega_1^2), \omega_1^4 b^2] \right\}_{2l}.$$

Затем рассмотрим (29). После проведения аналогичных вычислений находим

$$\{D_{\parallel}^{(l,2)}, D_{\perp}^{(l,2)}\}_{2l} \approx \left\{ \frac{1}{2\pi g_l(\omega) \omega^2} \sum_{\mathbf{q} \leq \mathbf{q}_l^{(\parallel)}, \mathbf{q}_l^{(\perp)}} \frac{1}{R_l(\mathbf{q}, \omega)} \times [4v_{\parallel}^{(l)2}(\omega^2 - \omega_1^2), \omega_1^4 b^2] \right\}_{2l}.$$

Получим явное выражение для  $\sum_{\mathbf{q} \leq \mathbf{q}_i^{(l)}} R_l^{-1}$ . Если  $b \ll l_{\perp}^{(l)}$ , то

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{q} \leq \mathbf{q}_i^{(l)}, q_{\perp}^+} \frac{1}{R_i(\mathbf{q}, \omega)} &= \frac{a^2 b}{(2\pi)^2} \int_{-\pi/l_{\perp}^{(l)}}^{\pi/l_{\perp}^{(l)}} dq_{\perp} \\ &\times \int_0^{\pi/l_{\parallel}^{(l)}} \frac{dq_{\parallel}^2}{q_{\parallel}^2 \frac{v_{\parallel}^{(l)2}}{2} \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_1^2}\right) + \frac{\omega_1^4 \tau_i^{(l)}(\omega)}{2\omega^2} \sin^2 \frac{q_{\perp} b}{2}} \\ &\approx \frac{2a^2}{\pi^2} \frac{1}{v_{\parallel}^{(l)2} \tau_i^{(l)}(\omega) \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_1^2}\right)} \frac{b}{l_{\perp}} \ln \left[ 2\sqrt{2} \frac{l_{\perp}}{b} \frac{\omega}{\tau_i^{(l)} \omega_1^2} \right] \end{aligned}$$

(здесь и далее  $l_{\parallel} = l_{\text{ph},\parallel}$ ,  $l_{\text{ph},\perp} = l_{\perp}$ ). Объединим слагаемые стандартного и интерференционного типов. В результате получаем выражение в форме

$$\left\{ D_{\parallel}^{(l)}, D_{\perp}^{(l)} \right\}_{2l} \approx \left\{ \left[ v_{\parallel}^2 \tau_i^{(l)}(\omega) \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_1^2}\right), \frac{b^2 \omega_1^4 \tau_i^{(l)}(\omega)}{2\omega^2} \right] \times F^{(l)}(\omega) \right\}_{2l}, \quad (33)$$

$$\begin{aligned} F^{(l)}(\omega) &\approx 1 - \frac{2}{\pi} c \varepsilon^2 \frac{\omega^2}{\omega_3^2} \frac{1}{\left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_1^2}\right)} \\ &\times \frac{b}{l_{\perp}} \ln \left[ \sqrt{2} \pi \frac{l_{\perp}}{b} c \varepsilon^2 \frac{\omega^4}{\omega_1^2 \omega_3^2} \right] \end{aligned} \quad (34)$$

(при  $l_{\perp} \approx b$  соотношение (34) также остается справедливым).

Перейдем к  $b$ -модам изгибного типа. В интервале  $0 < \omega^2 < 2\omega_2^2$  их колебательный спектр является трехмерным. Вследствие чего влиянием на коэффициент  $D^{(b)}$  процессов когерентного обратного рассеяния можно пренебречь. В области  $2\omega_2^2 < \omega^2 < \omega_3^2$  закон дисперсии  $\omega_b(\mathbf{k})$  приближенно такой, как и в двумерной решетке. В подобной ситуации перенормировка фактора  $D^{(b)}$  вследствие интерференционного механизма должна быть конечной.

Конкретно для изгибных мод в длинноволновом пределе, когда  $0 < \omega^2 < \omega_1^2$ , вместо (28) имеем

$$\left\{ D_{\parallel}^{(b,1)}, D_{\perp}^{(b,1)} \right\}_1 \approx \left\{ \frac{1}{3} \tau_i^{(b)}(\omega) \left[ 1 v_{\parallel}^{(b)2}, v_{\perp}^{(b)2} \right] \right\}_1, \quad (35)$$

где  $\tau_i^{(b)}$  определяется соотношением (7) и  $v_{\parallel}^{(b)} = b\omega_1$ ,  $v_{\perp}^{(b)} = b\omega_2/\sqrt{2}$ .

В области частот  $\omega_1^2 < \omega^2 < \omega_2^2$  (мы маркируем ее символом  $2b$ ) ситуация следующая. В выражении для  $\omega_b^2$  (16) можно пренебречь членом, пропорциональным  $\omega_b^2$ . Остающиеся два члена одного порядка. При вычислении интегралов в (28) введем в рассмотрение частоту  $\omega_*$ , которая удовлетворяет неравенствам  $\omega_1 < \omega_* < \omega < \omega_2$ .

Проинтегрируем снова по  $dk_{\parallel}$  с использованием теоремы о вычетах и по  $dk_{\perp}$  непосредственно. В результате находим, что

$$\begin{aligned} \left\{ D_{\parallel}^{(1,b)}, D_{\perp}^{(1,b)} \right\}_{2b} &\approx \left\{ \frac{\pi}{4\sqrt{2}} \frac{\tau_i^{(b)}(\omega)\omega}{\omega_2 \omega_3 g_b(\omega)} \right. \\ &\times \left. \left[ \frac{8}{\pi^2} \omega_3 \omega a^2 \left( \sin z - \frac{\sin^3 z}{3} \right), \frac{\omega^2 b^2}{2} \left( z - \frac{\sin 2z}{2} \right) \right] \right\}_{2b}, \\ z &= \arccos \left( \frac{\omega_*}{\omega} \right). \end{aligned} \quad (36)$$

Наконец, рассмотрим область  $\omega_2^2 \ll \omega^2 \ll \omega_3^2$  (она помечается символом  $3b$ ), в которой частота  $\omega_b \sim k_{\parallel}^2$ . Если  $b \ll l_{\perp}$ , то можно показать, что

$$\left\{ D_{\parallel}^{(b)}, D_{\perp}^{(b)} \right\}_{3b} = \left\{ \left[ \frac{8}{\pi} a^2 \omega_3 \omega \tau_i^{(b)}(\omega), \frac{\pi}{4} b^2 \frac{\omega_2^4}{\omega^2} \tau^{(b)}(\omega) \right] \times F^{(b)}(\omega) \right\}_{3b}, \quad (37)$$

где

$$\begin{aligned} F^{(b)}(\omega) &\approx 1 - \frac{c \varepsilon^2}{4} \frac{\omega}{\omega_3} \frac{1}{1 - \omega_2^2/\omega^2} \\ &\times \frac{b}{l_{\perp}} \ln \left[ \frac{\pi^2}{2\sqrt{2}} \frac{l_{\perp}}{b} c \varepsilon^2 \frac{\omega^3}{\omega_2^2 \omega_3} \right] \end{aligned} \quad (38)$$

(выражение для фактора  $F^{(b)}$  (38) приближенно справедливо и при  $b \approx l_{\perp}$ ).

Прокомментируем полученные выражения для коэффициентов  $D^{(l,b)}$ . Из соотношений (33), (34) и (37), (38) прямо следует, что в случае сильного недиагонального беспорядка, когда параметр  $c\varepsilon^2$  порядка нескольких десятых и больше, за счет интерференционного механизма значения коэффициента диффузии  $D$  могут существенно изменяться. Подчеркнем также, что совокупности формул (30)–(34) и (35)–(38) позволяют исследовать вклады продольных и изгибных мод в низкотемпературную теплопроводность в условиях преобладания в качестве механизма релаксации упругого рассеяния этих мод на дефектах.

Мы выполнили численные расчеты факторов  $F^{(l)}$  (34) и  $F^{(b)}$  (38). Рассмотрены были интервалы частот, в которых частоты продольной и изгибной мод слабо зависят от поперечной составляющей квазиимпульса  $k_{\perp}$ . Предполагалось также, что  $l_{\text{ph},\perp} \approx b$ . В расчетах и для  $l$  и для  $b$ -мод параметр  $c\varepsilon^2$  варьировался от 0.25 до 1. Кроме того, варьировались значения  $\omega_1/\omega_3$  и  $\omega_2/\omega_3$ . Их величины определяются соотношением между силовыми параметрами, характеризующими взаимодействие вдоль оси  $z$  и в плоскости  $xOy$ . Результаты расчетов для факторов  $F^{(l,b)}(\omega)$  представлены на рис. 1, 2. Откуда видно, что, во-первых, в случае сильного недиагонального беспорядка в областях "квазидвухмерия" значения парциальных коэффициентов диффузии могут весьма

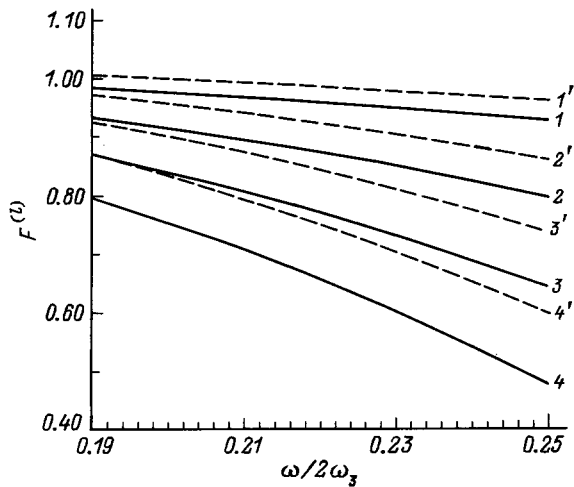


Рис. 1. Зависимость фактора  $F^{(l)}$  от  $\omega/2\omega_3$ .  $c\varepsilon^2$ : 1, 1' — 0.25, 2, 2' — 0.50, 3, 3' — 0.75, 4, 4' — 1.00.  $\omega_1/\omega_3 = 0.15$  (1–4) и 0.1 (1'–4').

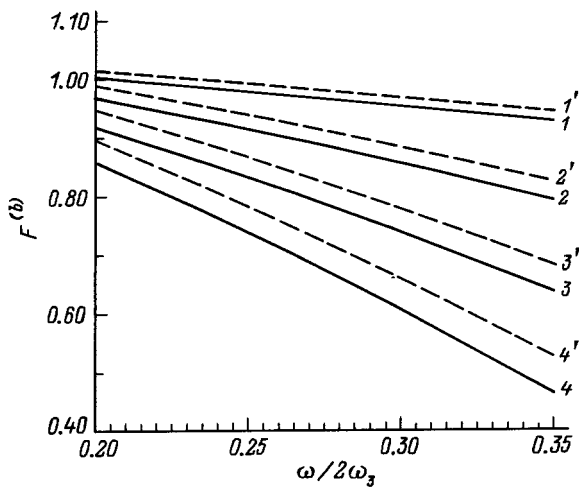


Рис. 2. Зависимость величины  $F^{(b)}$  от  $\omega/2\omega_3$ .  $c\varepsilon^2$ : 1, 1' — 0.25, 2, 2' — 0.50, 3, 3' — 0.75, 4, 4' — 1.00.  $\omega_2/\omega_3 = 0.3$  (1–4) и 0.25 (1'–4'),  $\omega_1/\omega_3 = 0.15$  (1–4) и 0.1 (1'–4').

ощутимо изменяться. В принципе при  $c\varepsilon^2 > 1$  в спектре  $D(\omega)$  появляется щель. Во-вторых, при ослаблении взаимодействия между слоями перенормировки стандартного коэффициента диффузии усиливаются.

#### 4. О природе низкотемпературного плато в теплопроводности соединений BSCCO и BSYCO

В литературе обсуждается вопрос о необычной температурной зависимости теплопроводности монокристаллов слоистых систем ВТСП BSCCO и его диэлектрического аналога BSYCO (см., например, [22–24]). Принято считать, что в названных системах в широкой области температур от 10 до 100 К перенос тепла осуществляет-

ся преимущественно фононами. Весьма интересен здесь факт наличия плато в теплопроводности BSCCO и BSYCO в интервале температур  $10 \leq T \leq 30$  К (подобное плато в зависимости  $\kappa$  от  $T$  отсутствует для трехмерных относительно фононных свойств сверхпроводников 1–2–3, причем в названном интервале температур  $\kappa$  монотонно возрастает (см., например, [24])). Иными словами, теплопроводность имеет черты, характерные для теплопереноса в аморфных диэлектриках. Авторы экспериментальных работ отмечают также сильную катионную разупорядоченность в реальных кристаллах из-за катионной нестехиометрии в слоях, содержащих висмут и стронций.

Вместе с тем хорошо известно, что висмутовые купраты  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{4+2n}$ , где  $n = 1, 2, 3$ , обладают кристаллической решеткой с псевдо-тетрагональной симметрией  $14/mmm - D_{4h}^{17}$  и представляют собой блочные структуры. Они состоят из чередующихся слоев типа каменной соли  $-\text{BiO}-\text{SrO}$  и дефектного по кислороду перовскита  $-\text{Ca}-\text{CuO}_2$ . Отличительная черта соединений на основе Bi — слабая связь Bi—O слоев из-за относительно большого расстояния  $\approx 3 \text{ \AA}$  между ними. Это свойство делает висмутовые соединения подобными слюде. В частности, авторы работ [25–28] рассмотрели их оптические спектры и пришли к заключению о квазидвухмерном характере фононной подсистемы. В [28] на основе анализа спектров неупругого некогерентного рассеяния нейтронов, полученных методом изотопического контраста, сделан вывод о слабости взаимодействия между структурными блоками BiO—SrO и Ca—CuO<sub>2</sub>.

В разделе 3 установлено, что в области низких частот в условиях сильного беспорядка может иметь место существенная перенормировка коэффициента диффузии за счет специфических интерференционных процессов. Из-за подобной перенормировки коэффициента диффузии очевидным образом возникает плато в низкотемпературной зависимости теплопроводности (см., например, [2,9]).

Таким образом, учитывая все сказанное, можно предположить, что в соединениях BSCCO и BSYCO в области низких температур фононная подсистема в теплопереносе обнаруживает двухмерные свойства. Основываясь на результатах настоящей работы, можно качественно объяснить экспериментально наблюдаемое для нерегулярных монокристаллов BSCCO и BSYCO плато в температурной зависимости теплопроводности, как результат действия специфических примесных интерференционных процессов. При этом процессы когерентного обратного рассеяния играют важную роль постольку, поскольку взаимодействие между слоями относительно слабое.

Итак, мы обсудили вопрос о слабой локализации акустических колебательных мод в неидеальной сильно анизотропной гармонической кристаллической решетке. Принималось, что слои решетки слабо связаны между собой и проявляют двумерные свойства. Рассмотрены два типа колебательных мод с векторами смещений,



ориентированными соответственно параллельно и перпендикулярно слоям. Колебательные моды первого типа представляют собой продольно поляризованные возбуждения, а моды второго типа напоминают волны изгиба в невзаимодействующих слоях.

В случае диагонального беспорядка для области температур, в которой длины пробега фононов определяются упругим рассеянием на точечных дефектах, получены аналитические выражения для тензоров коэффициентов теплопроводности и диффузии. Показано, что в определенных частотных интервалах, где законы дисперсии акустических фононных мод обладают двухмерными свойствами, в условиях сильного беспорядка за счет специфических интерференционных процессов может иметь место существенная перенормировка коэффициента диффузии. При этом при ослаблении взаимодействия между слоями перенормировка коэффициента диффузии усиливается. Отмечено, что в рамках развитой теории (за счет сильной перенормировки коэффициента диффузии) можно качественно объяснить экспериментально наблюдаемое для неидеальных монокристаллов слоистых систем ВТСП BSCCO и его диэлектрического аналога BSYCO плато в температурной зависимости теплопроводности в области низких температур  $10 \leq T \leq 30$  К.

Обратим внимание на то, что в рассмотренном случае слоистых решеток с тяжелыми примесями в области квазидвухмерия не возникают хорошо определенные квазилокальные моды, т.е. отсутствуют так называемые резонансно рассеивающие примесные центры (см. [29–31]). Однако если беспорядок недиагональный, то в области квазидвухмерия могут существовать квазилокальные моды. Этот случай мы исследуем в другой работе.

Авторы благодарят Д.А. Жернова за компьютерный набор рукописи. Мы признательны Н.М. Плакиде и Х. Шоберу за поддержку, а также А.Н. Талденкову, М.Г. Землянову и П.П. Паршину за ценные замечания.

Работа выполнена благодаря гранту Российского фонда фундаментальных исследований № 96-02-16602-а.

## Приложение

Приведем вывод соотношения (19) для спектральной плотности изгибных мод. Во-первых, в области частот  $\omega_1^2 < \omega^2 < 2\omega_2^2$  можно пренебречь в выражении для  $\omega_b^2$  (16) членом, пропорциональным  $\omega_1^2$ . Остающиеся два члена, пропорциональные  $\omega_2$  и  $\omega_3$ , имеют одинаковый порядок величины. С использованием (17) и (17а) можно показать, что

$$g_b(\omega^2) \approx \frac{a}{4\pi} \int dk_{\parallel}^2 \frac{1}{\sqrt{\omega^2 - \omega_3^2 a^2 k_{\parallel}^4}} \times \frac{1}{\sqrt{2\omega_2^2 - \omega^2 + \omega_3^2 a^4 k_{\parallel}^4 / \pi^4}}.$$

Введем в рассмотрение частоту  $\omega_*$ , которая удовлетворяет соотношениям  $\omega_1 < \omega_* < \omega < \omega_2$ . Тогда при  $\omega_* < \omega$  имеем приближенное равенство

$$g_b(\omega^2) \approx \frac{1}{4\sqrt{2}} \frac{1}{\omega_2 \omega_3} \arccos\left(\frac{\omega_*}{\omega}\right). \quad (П1)$$

В интервале  $2\omega_2^2 < \omega^2 < \omega_3^2$  частота  $\omega_b \sim k_{\parallel}^2$ . Член, пропорциональный  $\omega_2$ , сравнительно мал. Вследствие этого имеем

$$g_b(\omega^2) \approx \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{d(k_{\perp} b)}{2\omega_3} \pi^2 \int \frac{d\left(k_{\parallel} \frac{a^2 \omega_3}{\pi^2}\right)}{\omega \sqrt{Y\left(\frac{\omega_2}{\omega}, k_{\perp} b\right)}} \times \delta\left(\frac{k_{\parallel} a^2 \omega_3}{\pi^2} - \omega \sqrt{Y\left(\frac{\omega_2}{\omega}, k_{\perp} b\right)}\right), \quad (П2)$$

где положено

$$Y\left(\frac{\omega_2}{\omega}, k_{\perp} b\right) = 1 - 2 \frac{\omega_2^2}{\omega^2} \sin^2 \frac{k_{\perp} b}{2}.$$

Из (П2) получаем

$$g_b(\omega^2) \approx \frac{1}{4\omega_3 \omega} K\left(\frac{2\omega_2^2}{\omega^2}\right).$$

Здесь с целью сокращения записи через

$$K(m) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - m \sin^2 \varphi}}$$

обозначен полный эллиптический интеграл первого рода. Поскольку  $\omega_2^2 < \omega^2$ ,  $m \approx 0$  и  $K(0) \approx \frac{\pi}{2}$ . В результате находим

$$g_b(\omega^2) \approx \frac{\pi}{8} \frac{1}{\omega_3 \omega}. \quad (П3)$$

Соотношения (П1) и (П3) определяют  $g_b$  в области промежуточных частот.

## Список литературы

- [1] T.R. Kirkpatrick. Phys. Rev. **B31**, 5746 (1985).
- [2] E. Akkermans, R. Maynard. Phys. Rev. **B32**, 7860 (1985).
- [3] J.E. Graebner, B. Golding, L.C. Allen. Phys. Rev. **B34**, 5696 (1986).
- [4] Qian-Jin Chu, Zhao-Qing Zhang. Phys. Rev. **B38**, 4906 (1988).
- [5] H. Bottger, M. Theuerkauf. Phys. Stat. Sol. (b) **150**, 73 (1988).
- [6] M.P. Albada, M.B. Mark, A. Lagendijk. In: Scattering and localization of classical waves in random media / Ed. P. Sheng. World Scientific, Singapore (1990). P. 97.
- [7] C.M. Soukoulis, S. Datta, C.M. Economou. Phys. Rev. **49**, 3800 (1994).
- [8] Ping Sheng, Minyao Zhou, Zhao-Qing Zhang. Phys. Rev. Lett. **72**, 234 (1994).
- [9] A.P. Zhernov, E.I. Salamatov, E.P. Chulkin. Phys. Stat. Sol. (b) **165**, 355 (1991).
- [10] A.P. Zhernov, E.I. Salamatov, E.P. Chulkin. Phys. Stat. Sol. (b) **168**, 81 (1991).

- [11] А.П. Жернов, Е.П. Чулкин. ФТТ **36**, 8, 2302 (1994).
- [12] A.P. Zhernov, E.P. Chulkin. Phys. Stat. Sol. (b) **193**, 67 (1996).
- [13] А.П. Жернов, Е.П. Чулкин. ЖЭТФ **109**, 456 (1996).
- [14] A.P. Zhernov. Phys. Stat. Sol. (b) **193**, 311 (1996).
- [15] И.М. Лифшиц. ЖЭТФ **22**, 475 (1952).
- [16] Э.Е. Андерс, И.Н. Кудрявцев, К.Э. Немченко. ФТТ **34**, 7, 2069 (1992).
- [17] H. Bettger. In: Principles of the theory of lattice dynamics. Akademie-Verlag, Berlin (1983).
- [18] R.J. Elliot, J.A. Krumhansl. P.L. Leath. Rev. Mod. Phys. **46**, 465 (1974).
- [19] E.N. Economou. In: Green's Function in Quantum Physics. 2nd ed. Springer-Verlag, N.Y. (1983).
- [20] Р. Берман. Теплопроводность твердых тел. Мир, М. (1979).
- [21] А.М. Косевич. Теория кристаллической решетки. Вища шк., Харьков (1988).
- [22] P.V. Allen, X. Du, L. Mihaly, L. Forgo. Phys. Rev. **B49**, 9073 (1994).
- [23] В.Б. Ефимов, Л.П. Межов-Деглин. Письма в ЖЭТФ **62**, 934 (1995).
- [24] А.Н. Талденков, А.В. Инюшкин, С.Ю. Шабанов. СФХТ **7**, 1502 (1994).
- [25] А.А. Буш, И.Н. Гончарук, Ю.Э. Китаев. ЖЭТФ **102**, 1587 (1992).
- [26] Yu. Kitaev, M.F. Limonov, A.G. Panfilov. Phys. Rev. **B49**, 9933 (1994).
- [27] Ю.Э. Китаев, М.Ф. Лимонов, А.П. Миргородский, А.Г. Панфилов, Р.А. Эварестов. ФТТ **36**, 4, 865 (1994).
- [28] П.П. Паршин, М.Г. Землянов, А.В. Иродова, П.И. Солдатов, С.Х. Сулейманов. ФТТ **38**, 6, 1665 (1996).
- [29] М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник. ФТТ **32**, 10, 2965 (1990).
- [30] М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник. УФЖ **35**, 1856, (1990).
- [31] М.А. Иванов, А.М. Косевич, Е.С. Сыркин, Ю.В. Скрипник, И.А. Господарев, С.Б. Феодосьев. ФНТ **19**, 434 (1993).