ЖЭТФ, 2000, том 117, вып. 2, стр. 350–361 © 2000

ЛОКАЛИЗАЦИЯ АКУСТИЧЕСКИХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ МОД В РЕШЕТКЕ ЦЕПОЧЕЧНОГО ТИПА

А. П. Жернов*

Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

Е. П. Чулкин

Физико-технический институт Уральского отделения Российской академии наук
426001, Ижевск, Россия

Поступила в редакцию 17 июня 1999 г.

Рассматривается вопрос о слабой локализации акустических фононных мод в неидеальной кристаллической решетке цепочечного типа. Получено выражение для тензора коэффициента диффузии D. Исследована роль процессов обратного когерентного рассеяния. Установлено, что за счет таких процессов в области относительно низких частот, где законы дисперсии фононных мод проявляют квазиодномерные свойства, может иметь место существенная перенормировка коэффициента диффузии D.

PACS: 63.50.+x, 66.70.+f

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в литературе определенное внимание уделяется проблеме локализации фононных мод, а также звуковых и световых волн в неупорядоченных системах в условиях, когда существенными оказываются процессы когерентного многократного рассеяния. Значительный интерес здесь вызывают явления, связанные с эффектом когерентного обратного рассеяния. При этом исследован ряд вопросов для слабоанизотропных трехмерных решеток, включая случай систем с резонансно рассеивающими примесными центрами (см., например, [1–7]).

По сравнению со стандартными трехмерными соединениями в низкоразмерных системах локализационные явления должны быть более выраженными. Существенно, что в подобных решетках в условиях диагонального беспорядка не возникают хорошо определенные квазилокальные моды [8, 9]. В результате чего при наличии примесей важными могут оказаться эффекты, связанные со слабой локализацией. Поэтому представляется интересным проведение теоретических исследований локализации колебательных мод в слоистых и квазиодномерных соединениях. В нашей работе [10] обсуждалась возможность локализации колебательных возбуждений в сильноанизотропных слоистых решетках. Цель данной работы — анализ ситуации для неидеальных кристаллов цепочечного типа.

Конкретно рассматривается вопрос о локализации акустических мод с векторами смещений, ориентированными параллельно и перпендикулярно слабосвязанным цепочкам. Колебательные моды первого типа являются продольно поляризованными возбуждениями (l-моды). Моды второго типа — это так называемые изгибные возбуждения (b-моды) [11]. В достаточно широком интервале низких частот сильноанизотропный цепочечный кристалл может проявлять квазиодномерные динамические свойства. А именно, частота l-моды слабо зависит от поперечной компоненты квазиимпульса, а частота b-моды приближенно пропорциональна квадрату продольной компоненты квазиимпульса. Что касается модели беспорядка, то мы ограничиваемся случаем диагонального беспорядка и анализируем поведение тензора коэффициента диффузии. Предполагается, что колебательные возбуждения упруго рассеиваются на дефектах точечного типа. При этом определяется усредненная по примесным конфигурациям двухчастичная решеточная гриновская функция с учетом процессов когерентного обратного рассеяния.

*E-mail: zhernov@isssph.kiae.ru

Отметим, что нами используется для описания законов дисперсии l- и b-мод феноменологическая теория Борна—Кармана, в рамках которой при определении динамических силовых параметров учитываются свойства симметрии решетки вещества. Фигурирующие в этой теории силовые параметры задаются как производные второго порядка от реальной структурно-зависящей части энергии E_{st} по конкретным компонентам атомных смещений. (Энергия E_{st} представляет собою сумму энергий ионной решетки и конфигурационной части электронной энергии.) Определенные таким образом силовые параметры содержат вклады и от парного, и от многочастичного межатомных взаимодействий, а также зависят от распределения электронной плотности. При этом число координационных сфер, на которые распространяется взаимодействие, может быть значительным. Ограничиваясь качественной стороной явления, мы учитываем в низкочастотном представлении для l- и b-мод только взаимодействие между атомами, расположенными в ближайших цепочках. В принципе, если законы дисперсии специфических гармонических мод (в цепочечной решетке) известны, то их можно аппроксимировать посредством приведенных в следующем разделе формул.

В связи со сказанным обратим внимание на теоретические работы по проблеме водорода в металлическом состоянии [12–15]. В этих работах принималось, что в металлическом водороде электроны целиком коллективизируются, так что протоны лишены орбитальных электронов. При этом формфактор электрон-ионного взаимодействия оказывается точно известным. В [12–15] в микроскопическом подходе исследованы свойства металлического состояния, как при нулевом давлении $P = 0$ [12], так и при конечных давлениях [13–15]. Авторы использовали теорию возмущений по электрон-ионному взаимодействию. Они учитывали вклады второго, третьего и четвертого порядков. Таким образом, рассматривалась ситуация, когда взаимодействие в системе не только парное, но и непарное (ковалентного типа). Было установлено, что существует металлическая фаза и что система динамически устойчива. Очень интересно, что при $P = 0$ реализуются структуры с резко выраженной анизотропией. А именно, возникают нитевидные структуры (с протонными цепочками), и минимальное расстояние между атомами вдоль цепочек заметно меньше расстояния между цепочками.

Физически возникновение цепочечной структуры в водороде связано с компенсацией в структурно-зависящей энергии E_{st} вкладов от ионной решетки и от членов второго порядка по формфактору в электронной энергии. На структурные свойства существенно влияют члены третьего порядка. Проявление членов четвертого порядка, включая те, которые связаны с перенормировкой химического потенциала и фермиевской энергии, сравнительно слабое.

Подчеркнем, что при анализе фононного спектра, который рассматривался во всей зоне Бриллюэна, были обнаружены специфические низкочастотные моды и l- и b-типов (см. некоторые детали в [12]).

Одним из обстоятельств, стимулирующих исследования структур цепочечного типа, является недавно открытая новая фаза углерода — карболайт [16]. Хотя кристаллическая структура этой фазы детально не исследована, есть основания полагать, что она состоит из углеродных цепей, которые связаны друг с другом слабым ван-дер-ваальсовским взаимодействием. Косвенным подтверждением квазиодномерной структуры карболайта может служить аномальное поведение его теплоемкости при низких температурах [17].

2. ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЦЕПОЧЕЧНОГО КРИСТАЛЛА

Законы дисперсии. Будем предполагать, что в кристаллической решетке эффективное силовое взаимодействие между атомами вдоль оси z существенно сильнее, чем взаимодействие в плоскости xy. Тогда можно говорить об атомных цепочках, в которых связь сильнее, чем между отдельными цепочками. Простоты ради считается также, что матрицы силовых параметров диагональны по декартовым индексам. При этом колебания вдоль оси z и с вектором смещений $\mathbf{u}$, лежащим в плоскости xy, являются независимыми.

Решетка принимается тетрагональной с параметрами элементарной ячейки $\{a, b\}$. При этом b — параметр, который характеризует расстояние между атомами в цепочке, а a — параметр, определяющий расстояние между цепочками. В условиях сильной анизотропии межатомного взаимодействия параметры решетки могут иметь разный порядок величины.

Мы будем рассматривать колебательные моды с относительно низкими частотами. Предполагается выполненным условие $bk_z \ll 1$. Что касается величин ak_x и ak_y, они могут быть и не малыми.

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

$$\Phi_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{s}} \Phi^{0\mathbf{s}}_{\alpha\alpha'} \left[\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R_s}) - 1\right]. \tag{2.1}$$

Принимая во внимание сказанное, определим закон дисперсии для акустической колебательной моды, описывающей смещения атомов с массой M_0, которые ориентированы параллельно слабосвязанным цепочкам, т. е. вдоль оси z. Имеем

$$M_0\omega_l^2(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{s}_\perp}\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\perp}R_{\mathbf{s}_\perp}^z R_{\mathbf{s}_\perp}^z \mathbf{k}_z^2 + \frac{1}{2}\times \times\sum_{\mathbf{s}_\parallel}\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\parallel}\left[\cos(\mathbf{k}_\parallel\cdot\mathbf{R}_{\mathbf{s}_\parallel})-1\right]. \qquad (2.2)$$

Заметим, что силовые параметры $\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\perp}$ и $\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\parallel}$ характеризуют взаимодействие соответственно вдоль оси z и в плоскости xy, при этом

$$|\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\parallel}| \ll |\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\perp}|. \qquad (2.3)$$

Учтем динамическое взаимодействие только между ближайшими соседними атомами. Тогда вместо (2.2) получаем

$$\omega_l^2(\mathbf{k}) \approx \frac{\omega_\perp b^2}{2}k_z^2 + \omega_\parallel^2\left(\sin^2\frac{k_x a}{2} + \sin^2\frac{k_y a}{2}\right). \quad (2.4)$$

Частоты $\omega_\perp$ и $\omega_\parallel$ выражаются через параметры $\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\perp}$ и $\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\parallel}$. Существенно, что согласно условию (2.3) выполняется неравенство $\omega_\parallel^2 \ll \omega_\perp^2$.

Перейдем к модам изгибного типа. В случае колебательных мод такого типа векторы смещений ориентированы перпендикулярно слабосвязанным цепочкам. С использованием определения (2.1) и условия $bk_z \ll 1$ можно написать

$$M_0\omega_b^2(\mathbf{k}) \approx -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{s}_\perp}\Phi_{xx}^{0\mathbf{s}_\perp}(R_{\mathbf{s}_\perp}^z)^2 k_z^2 + \frac{1}{4}\times \times\sum_{\mathbf{s}_\perp}\Phi_{xx}^{0\mathbf{s}_\perp}(R_{\mathbf{s}_\perp}^z)^4 k_z^4 - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{s}_\parallel}\Phi_{xx}^{0\mathbf{s}_\parallel}\sin^2\frac{bk_\parallel}{2}. \quad (2.5)$$

Известно, что в отсутствие напряжений в кристалле силовые параметры удовлетворяют условию типа (см., например, [18, 19])

$$\sum_{\mathbf{s}_\parallel}\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\parallel}R_{\mathbf{s}_\parallel}^x R_{\mathbf{s}_\parallel}^x = \sum_{\mathbf{s}_\perp}\Phi_{xx}^{0\mathbf{s}_\perp}R_{\mathbf{s}_\perp}^z R_{\mathbf{s}_\perp}^z. \qquad (2.6)$$

Отсюда следует, что в законе дисперсии для изгибных мод (поскольку переопределяется первый член в (2.5)) должны фигурировать три характерных силовых параметра. А именно, наряду с параметрами $\Phi_{xx}^{0\mathbf{s}_\perp}$ и $\Phi_{xx}^{0\mathbf{s}_\parallel}$ возникает также и параметр $\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\parallel}$, причем в принятой модели

$$|\Phi_{zz}^{0\mathbf{s}_\parallel}| \ll |\Phi_{xx}^{0\mathbf{s}_\parallel}| \ll |\Phi_{xx}^{0\mathbf{s}_\perp}|. \qquad (2.7)$$

Итак, с использованием (2.6) вместо (2.5) имеем [11]

$$\omega_b^2(\mathbf{k}) = (\omega_1 a)^2 k_z^2 + \left(\frac{\omega_3 b^2}{\pi}\right)^2 k_z^4 + + \omega_2^2\left(\sin^2\frac{k_x a}{2} + \sin^2\frac{k_y a}{2}\right). \qquad (2.8)$$

Фигурирующие здесь три характерные частоты отвечают трем силовым параметрам (2.7). На эти частоты наложены условия $\omega_1^2 \ll \omega_2^2 \ll {\omega_3}^2$. Отметим, что $\omega_3 \approx \omega_\perp$ и $\omega_1 \approx \omega_\parallel$.

Обсудим выражения для анизотропных законов дисперсии l- и b-мод, (2.4) и (2.8). Из их рассмотрения следует, что в области самых низких частот, $\omega \le \omega_1$, величины ω_l и ω_b зависят, вообще говоря, от компонент квазиимпульса k_x, k_y и k_z. Если частота продольной моды лежит в интервале

$$2\omega_\parallel^2 \le \omega_l^2 < \omega_\perp^2, \qquad (2.9)$$

то второй член в (2.4) сравнительно мал. Следовательно, величина ω_l^2 слабо зависит от поперечных компонент квазиимпульса, k_x и k_y, и закон дисперсии для l-мод соответствует случаю квазиодномерной решетки. В то же время для изгибной моды в интервале частот, удовлетворяющих условию

$$2\omega_2^2 \ll \omega_b^2 < \omega_3^2, \qquad (2.10)$$

можно пренебречь первым и третьим членами в выражении (2.8). Оказывается, что частота ω_b не зависит от компонент квазиимпульса k_x и k_y. Она пропорциональна k_z^2. Таким образом, закон дисперсии для b-моды также обнаруживает квазиодномерное поведение.

Как уже отмечалось во Введении, изгибные моды ввел в рассмотрение И. М. Лифшиц. Он же исследовал их влияние на низкотемпературное поведение теплоемкости и коэффициента теплового расширения (см., например, [11]).

Плотности колебательных состояний. Приведем конкретные выражения для плотностей состояний l- и b-мод. Они явно фигурируют в соотношениях для парциальных коэффициентов диффузии (см. ниже разд. 3).

Начнем со случая l-мод. Можно показать, что функция квадрата плотности фононных состояний в интервале частот $0 \le \omega^2 < 2\omega_\parallel^2$ определяется выражением вида

$$g_l(\omega^2) = \frac{b}{\pi^3\omega_\parallel^2}\int dk_z K\left(\sqrt{\xi^2(2-\xi^2)}\right), \quad \xi^2 = \frac{\omega^2 - \dot{v}_\perp^{(l)2}k_z^2}{\omega_\parallel^2}. \qquad (2.11)$$

Здесь K — полный эллиптический интеграл первого рода, $\dot{v}_\perp^{(l)} = b\omega_\perp/\sqrt{2}$ — групповая скорость. При $\omega \to 0$, когда закон дисперсии соответствует трехмерному случаю, из (2.11) имеем

$$g_l(\omega^2) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\frac{\omega}{\omega_\parallel^2\omega_\perp}\left(1+\frac{\omega^2}{3\omega_\parallel^2}+\frac{\omega^4}{6\omega_\parallel^4}+\dots\right). \quad (2.12)$$

В квазиодномерной области (2.9), как показано в Приложении А, плотность состояний выражается через интегралы эллиптического типа:

$$g_l(\omega^2) = \frac{4\sqrt{2}}{\pi^3\omega_\perp}\frac{1}{\omega+\sqrt{\omega^2-\omega_\parallel^2}} \times \\ \times K'\left(\frac{\sqrt{\omega^2-\omega_\parallel^2}+\sqrt{\omega^2-2\omega_\parallel^2}}{\omega+\sqrt{\omega^2-\omega_\parallel^2}}\right) \times \\ \times K\left(\frac{\sqrt{\omega^2-\omega_\parallel^2}-\sqrt{\omega^2-2\omega_\parallel^2}}{\omega+\sqrt{\omega^2-\omega_\parallel^2}}\right), \quad (2.13)$$

$$K'(k) = K(k'), \quad k' = \sqrt{1-k^2}\,. \quad (2.14)$$

Здесь k — эллиптический модуль, а k' — дополнительный эллиптический модуль. Если выполняется условие $\omega_l^2 \ll \omega_\perp^2$, то

$$g_l(\omega^2) \approx \frac{1}{\sqrt{2}\,\pi\omega_\perp\omega}\left(1+\frac{\omega_\parallel^2}{4\omega^2}+\frac{5\omega_\parallel^4}{16\omega^4}+\dots\right). \quad (2.13')$$

Таким образом, в интервале частот (2.9) функция плотности состояний продольных мод $g_l(\omega) = 2\omega g_l(\omega^2)$ слабо зависит от частоты.

Что касается квадрата парциальной плотности фононных состояний b-мод, при $0 < \omega_b^2 < 2\omega_2^2$ имеем

$$g_b(\omega^2) = \frac{1}{\pi^2\omega_2^2}\sum_{k_z} K\left(\sqrt{\xi^2(2-\xi^2)}\right), \\ \xi^2 = \frac{\omega^2-(\omega_1 a)^2 k_z^2}{\omega_2^2}. \quad (2.15)$$

При $\omega \to 0$ (точнее, в длинноволновом пределе при $0 \le \omega^2 \ll 2(a/b)^4\omega_1^4/\omega_\perp^2$) из выражения (2.15) следует, что

$$g_b(\omega^2) = \frac{b\omega}{(2\pi)^2 a\omega_1\omega_2^2} \times \\ \times \left(1+\frac{1}{3}\frac{\omega^2}{\omega_2^2}+\frac{1}{6}\frac{\omega^4}{\omega_2^4}+\dots\right), \quad (2.15')$$

т. е. зависимость имеет квазитрехмерный характер.

Наконец, в области частот $2\omega_2^2 < \omega^2 < \omega_\perp^2 \approx \omega_3^2$ имеем согласно результатам Приложения А:

$$g_b(\omega^2) = \frac{1}{8\pi^2\sqrt{\pi\omega_\perp\omega^3}}\Psi_0^{(b)}. \quad (2.16)$$

При условии $\omega_b^2 \gg \omega_2^2$ это выражение принимает вид

$$g_b(\omega^2) = \frac{1}{8\sqrt{\pi\omega_\perp\omega^3}} \times \\ \times \left(1+\frac{3}{4}\frac{\omega_2^2}{\omega^2}+\frac{657}{1024}\frac{\omega_2^4}{\omega^4}+\dots\right). \quad (2.16')$$

Обратим внимание на то, что плотность состояний $g_b(\omega) = 2\omega g_b(\omega^2)$, определяемая формулой (2.16′), представляет собой убывающую функцию частоты.

Отметим еще, что функции g_l и g_b определены соответственно посредством соотношений (2.12)–(2.14) и (2.15), (2.16) во всем интервале низких и промежуточных частот.

Групповые скорости. В соотношения для парциальных коэффициентов диффузии входят также групповые скорости колебательных мод. Ниже дается сводка формул. Во-первых, в случае l-мод имеем

$$v_\perp^{(l)}(\mathbf{k}) = \frac{\partial\omega_l(\mathbf{k})}{\partial k_z} = \frac{\dot{v}_\perp^{(l)2}k_z}{\omega_l(\mathbf{k})}, \quad (2.17)$$

где $\dot{v}_\perp^{(l)} = b\omega_\perp/\sqrt{2}$ и

$$v_{x(y)}^{(l)}(\mathbf{k}) = \frac{\partial\omega_l(\mathbf{k})}{\partial k_{x(y)}} = \frac{a\omega_\parallel^2}{2\omega_l(\mathbf{k})}\sin\left(k_{x(y)}a\right). \quad (2.17')$$

Средние скорости задаются выражениями вида

$$\sqrt{\langle v_{x(y)}^{(l)2}\rangle} = \frac{v_{x(y),max}^{(l)}}{\sqrt{2}}, \quad \langle v_\parallel^{(l)2}\rangle = \langle v_x^{(l)2}\rangle + \langle v_y^{(l)2}\rangle = \\ = \frac{\omega_\parallel^4 a^2}{4\omega_l^2(\mathbf{k})}. \quad (2.17'')$$

Для b-мод имеем

$$v_\perp^{(b)}(\mathbf{k}) = \frac{\partial\omega_b(\mathbf{k})}{\partial k_z} = \frac{2k_z^3 b^4\omega_\perp^2}{\omega_b^2(\mathbf{k})\pi^2} \simeq \\ \simeq \frac{2b}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\omega_b(\mathbf{k})\,\omega_\perp}, \quad (2.18)$$

$$v_{x(y)}^{(b)}(\mathbf{k}) = \frac{\partial\omega_b(\mathbf{k})}{\partial k_{x(y)}} = \frac{a\omega_2^2}{4\omega_b(\mathbf{k})}\sin\left(k_{x(y)}a\right). \quad (2.18')$$

Соответствующие средние скорости определяются как

$$\sqrt{\langle v_{x(y)}^{(b)2}\rangle} = \frac{v_{x(y),max}^{(b)}}{\sqrt{2}}, \\ \langle v_\parallel^{(b)2}\rangle = \langle v_x^{(b)2}\rangle + \langle v_y^{(b)2}\rangle = \frac{\omega_2^2}{4\omega_b^2(\mathbf{k})}\frac{\omega_2^2 a^2}{4}. \quad (2.18'')$$

Об одноузельной матрице рассеяния и массовом операторе. Рассмотрим особенности поведения одноузельной t-матрицы рассеяния, а также массового оператора $P(\omega)$, обусловленные упругим рассеянием фононных мод на примесных атомах. Мы приняли, что беспорядок диагональный и примеси отличаются от атомов матрицы только массой. При этом M и M_0 суть массы атомов дефектов и регулярной матрицы, c — концентрация дефектов. Величина параметра $c\epsilon^2$, где $\epsilon = 1 - M/M_0$, определяет меру беспорядка. Отметим, что концентрация дефектов c предполагается низкой ($c \ll 1$). В такой ситуации полное возмущение представляется как сумма вкладов от отдельных дефектов. При определении массового оператора практически достаточно ограничиться учетом членов второго порядка по параметру c. Влияние взаимодействия фононов с группами из более чем двух примесей из-за решеточного ангармонизма должно быть выражено слабо.

В случаях колебательных мод с векторами смещений, ориентированными параллельно и перпендикулярно слабосвязанным цепочкам ($j = l, b$), оператор $P_j(\omega)$ задается посредством соотношений вида

$$P_j(\omega) = c t_j(\omega)[1 + \Delta_j(\omega)], \tag{2.19}$$

где t_j — одноузельная матрица рассеяния, фактор Δ_j описывает парное динамическое взаимодействие примесей:

$$\begin{aligned}\Delta_j(\omega) = c\, t_j^2(\omega) \left[-\frac{\partial G_j^0}{\partial \omega^2} - {G_j^0}^2(\omega)\right] + \\ + \frac{c}{2}\sum_{\mathbf{s}\neq 0} G_{j,0\mathbf{s}}^{02}(\omega)\, t_j^2(\omega) \left[\frac{1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}}}{1 - t_j(\omega) G_{j,0\mathbf{s}}^0} - 2\right] + \\ + \frac{c}{2}\sum_{\mathbf{s}\neq 0} G_{j,0\mathbf{s}}^{02} t_j^2(\omega) \frac{1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}}}{1 + t_j(\omega) G_{j,0\mathbf{s}}^0} + \ldots\end{aligned} \tag{2.20}$$

Здесь через $G_{j,\mathbf{ss}'}^0$ обозначена гриновская функция идеальной решетки, собранная на операторах компонент динамических атомных смещений $u_{\mathbf{s}}^{\alpha}$ ($\alpha = z, x(y)$), G_j^0 — функция Грина с совпадающими узельными индексами.

Что касается конкретно t_j-матрицы, она определяется выражением

$$t_j^{-1}(\omega) = V\left[1 - V G_j^0(\omega^2)\right]^{-1}, \quad V = -\epsilon\omega^2. \tag{2.21}$$

Критерий сходимости ряда для $P_j(\omega)$ (2.19) такой:

$$c\left| t_j^2(\omega) \frac{\partial G_j^0(\omega)}{\partial \omega^2}\right| \ll 1. \tag{2.22}$$

Рассмотрим теперь поведение одноузельной t-матрицы рассеяния (2.21) в области частот $\omega^2 \gg 2\omega_{\parallel}^2$, где колебательный спектр проявляет квазиодномерные свойства. Для таких частот

$$\begin{aligned}\operatorname{Im} G_l^0(\omega^2) = \pi g_l(\omega^2) \approx \frac{1}{\sqrt{2}\,\omega_\perp \omega}, \\ \operatorname{Im} G_b^0(\omega^2) = \pi g_b(\omega^2) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{8}\frac{1}{\sqrt{\omega_3\omega^3}}.\end{aligned} \tag{2.23}$$

С использованием соотношений (2.23) и Крамерса—Кронига для соответствующих действительных частей функций Грина получаем

$$\begin{aligned}\operatorname{Re} G_l^0(\omega^2) = \int_0^\infty \frac{d\omega'^2}{\pi} P\frac{1}{\omega^2 - \omega'^2}\times \\ \times \operatorname{Im} G_l^0(\omega'^2) \approx \frac{\sqrt{2}}{\pi\omega_\perp^2}, \\ \operatorname{Re} G_b^0(\omega^2) = \int_0^\infty \frac{d\omega'^2}{\pi} P\frac{1}{\omega^2 - \omega'^2}\times \\ \times \operatorname{Im} G_b^0(\omega'^2) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{8}\frac{1}{\sqrt{\omega_3\omega^3}}.\end{aligned} \tag{2.24}$$

Таким образом, полные гриновские функции приближенно имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}G_l^0(\omega^2) \approx \frac{\sqrt{2}}{\pi\omega_\perp^2} + i\frac{1}{\sqrt{2}\omega_\perp\omega}, \\ G_b^0(\omega^2) \approx \frac{\sqrt{\pi}}{8}\frac{1}{\sqrt{\omega_3\omega^3}}(1 + i).\end{aligned} \tag{2.25}$$

Обратим внимание на то, что в случае l-мод в широком интервале частот выполняется неравенство $\operatorname{Re} G_l^0(\omega^2) \ll \operatorname{Im} G_l^0(\omega^2)$. В то же время для b-мод действительная и мнимая части функции $G_l^0(\omega^2)$ имеют одинаковый порядок величины.

С учетом явного вида функций Грина $G_{l,b}^0(\omega^2)$ (2.25) и диагонального оператора возмущения $V = -\epsilon\omega^2$ находим, что знаменатели $R_{l,b}$ одноузельной t-матрицы рассеяния представляются в форме

$$\begin{aligned}R_l(\omega^2) = 1 - V G_l^0(\omega^2) \approx 1 - \frac{\sqrt{2}}{\pi}|\epsilon|\frac{\omega^2}{\omega_\perp^2} - i\frac{|\epsilon|\omega}{\sqrt{2}\omega_\perp}, \\ R_b(\omega^2) \approx 1 - \frac{\sqrt{\pi}}{8}|\epsilon|\sqrt{\frac{\omega}{\omega_3}}(1 + i),\end{aligned} \tag{2.26}$$

откуда видно, что действительные части t-матриц в случае сильного беспорядка обращаются в нуль при значениях частот ω_r, являющихся корнями уравнений

$$\operatorname{Re} R_{l(b)}(\omega_r^2) = 0. \tag{2.27}$$

При этом сами частоты задаются соотношениями вида

$$\omega_r^{(l)2} \approx \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{\omega_\perp^2}{|\epsilon|}, \quad \omega_r^{(b)} \approx \frac{64}{\pi} \frac{\omega_3}{\epsilon^2}. \qquad (2.28)$$

Уширение уровня с характерной частотой ω_r, по определению, порядка величины

$$\Gamma_r^{l(b)} = \frac{\operatorname{Im} R_{l(b)}(\omega_r^2)}{\dfrac{d}{d\omega}\left[\operatorname{Re} R_{l(b)}(\omega^2)\right]\Big|_{\omega=\omega_r}}. \qquad (2.29)$$

С использованием приведенного выражения для Γ_r получаем

$$\Gamma_r^{(l)} \approx \frac{\pi}{4}\omega_\perp = \sqrt{2\pi|\epsilon|}\omega_r, \quad \Gamma_r^{(b)} \approx 2\omega_r^{(b)}. \qquad (2.30)$$

Сопоставим выражения (2.29) и (2.30). Оказывается, что для области значений частот $\omega^2 \gg 2\omega_\parallel^2$ условие $\Gamma_r/\omega_r \ll 1$ не выполняется, в результате чего не имеет смысла говорить о квазилокальных уровнях, существующих в узком интервале частот, а также о резонансного типа рассеянии на таких уровнях. (Квазилокальные моды в квазиодномерных кристаллах возникают в случае недиагонального беспорядка и слабосвязанных примесей [8,9]. Случай одномерных кристаллов рассмотрен в Приложении Б.)

Мы выполнили с использованием (2.19) и (2.20) конкретные оценки величин массового оператора для случая сильного диагонального беспорядка, когда $c \ll 1$ и одновременно $\epsilon^2 c \le 1$. Сделано это было с целью определить приближенный вид $\bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)+}(\omega)$ — пространственной фурье-компоненты одночастичной гриновской функции фононной j-моды с квазиимпульсом $\mathbf{k}$, усредненной по примесным конфигурациям. Рассмотрена была область частот, в которой законы дисперсии для l- и $b-$ мод обнаруживают поведение квазиодномерного типа. Оказывается, можно пренебречь перенормировкой частот колебательных мод. Что касается затухания, в выражении для мнимой части массового оператора достаточно удержать член, линейный по концентрации c. Вследствие сказанного имеем

$$\bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)+}(\omega) \approx \left[\omega^2 - \omega^2(\mathbf{k}) - i\,\frac{\omega}{\tau_i^{(j)}(\omega)}\right]^{-1}. \qquad (2.31)$$

Здесь $\omega/\tau_i(\omega)$ — мнимая часть массового оператора, причем (см., например, [19])

$$\frac{\omega}{\tau_i^{(j)}(\omega)} = \frac{\pi}{2}c\epsilon^2\omega^2 g_j(\omega)\,. \qquad (2.32)$$

3. КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ И СЛАБАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ

Коэффициент диффузии и двухчастичная гриновская функция. При определении тензора коэффициента диффузии для фононов гармонического кристалла мы основываемся на строгом выражении типа Кубо для решеточной теплопроводности. Принимая во внимание сказанное, определим тензор теплопроводности κ для интервала низких температур, в котором длина свободного пробега диктуется упругим рассеянием фононов дефектами. Случай слоистого кристалла подробно обсуждался в нашей работе [10]. Здесь рассматривается цепочечный кристалл.

В случае цепочечного кристалла решетка обладает осевой симметрией и тензор κ имеет два главных значения, которые обозначаем как $\kappa_\parallel$ и $\kappa_\perp$. Соответствующее выражение для $\kappa_{\alpha\alpha}$ представляет собой суммы вкладов l- и b-мод. Аналогично тому как это было сделано в [10], можно показать, что

$$\kappa_{\alpha\alpha} = \frac{1}{NT^2}\sum_{\mathbf{k}j}\omega_j^2(\mathbf{k})n(\omega_j(\mathbf{k})) \times \\ \times [n(\omega_j(\mathbf{k}))+1]\,D_{\alpha\alpha}^{(j)}(\omega_j(\mathbf{k})), \quad j=l,b. \qquad (3.1)$$

В (3.1) через D обозначен коэффициент диффузии; $n(\omega)$ — равновесная планковская функция распределения фононов; α — декартов индекс. Имеем

$$D_{\alpha\alpha'}^{(j)}(\omega) = \frac{4}{\pi g_j(\omega)}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} v_\alpha^{(j)}(\mathbf{k})v_{\alpha'}^{(j)}(\mathbf{k}') \times \\ \times \omega_j(\mathbf{k})\omega_j(\mathbf{k}')G_2^{(j)}(\mathbf{k};\mathbf{k}';\omega). \qquad (3.2)$$

Напомним, что в выражениях (3.1), (3.2) величины $\omega_j(\mathbf{k})$ и $\mathbf{v}^{(j)} = \partial\omega_j(\mathbf{k})/\partial\mathbf{k}$ суть закон дисперсии и групповая скорость фононной моды с квазиимпульсом $\mathbf{k}$; $g_j(\omega)$ — функция парциальной плотности колебательных состояний. Пространственная фурье-компонента двухчастичной гриновской функции G_2 выражается через одночастичные гриновские функции посредством равенства

$$G_2^{(j)}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\omega,\Omega) = \\ = \lim_{\Omega\to 0}\langle\, G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{(j)+}(\omega)G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{(j)-}(\omega-\Omega)\rangle_c, \qquad (3.3)$$

где символ $\langle ...\rangle_c$ означает усреднение по различным примесным конфигурациям.

В общем случае в импульсном представлении уравнение для двухчастичной функции

Грина представляется в форме уравнения типа Бете—Солпитера:

$$G_2^{(j)}(\mathbf{k},\mathbf{k}';\omega,\Omega)=\lim_{\Omega\to 0}\langle\, G^{(j)+}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\omega)\,G^{(j)-}_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\omega-\Omega)\rangle_c=$$

$$=\lim_{\Omega\to 0}\left\{\bar G^{(j)+}_{\mathbf{k}}(\omega)\bar G^{(j)-}_{\mathbf{k}}(\omega-\Omega)\,\times\right.$$

$$\left.\times\left[\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}+\sum_{\mathbf{k}_1}U_j(\mathbf{k},\mathbf{k}_1;\omega,\Omega)G_2^{(j)}(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}',\omega,\Omega)\right]\right\}. \quad (3.4)$$

Мы рассматриваем роль процессов обратного когерентного рассеяния (некоторых специфических интерференционных процессов, возникающих при рассеянии фононов на флуктуациях фононной плотности состояний вблизи дефектов). Как известно, они определяют режим слабой локализации, реализующийся при выполнении условий

$$ql^{(j)}\ll 1,\quad \Omega\tau_i^{(j)}(\omega)\ll 1, \quad (3.5)$$

где $l^{(j)}=v^{(j)}\tau_i^{(j)}(\omega)$ — длина пробега фонона j-го типа, ограниченная упругим рассеянием на примесях. В интересующем нас случае фигурирующая в (3.4) вершинная часть U определяется диаграммами «веерного» типа. Оказывается, что

$$\begin{aligned}U_j(\mathbf{k},\mathbf{k}';\omega,\Omega)&=\Gamma_j\left[1-J_j(\mathbf{q},\omega,\Omega)\right]^{-1},\\ J_j(\mathbf{q},\omega,\Omega)&=\frac{\Gamma_j}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}\bar G^{(j)+}_{\mathbf{k}_1}(\omega)\bar G^{(j)-}_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q}}(\omega+\Omega),\end{aligned} \quad (3.6)$$

$\mathbf{q}=\mathbf{k}+\mathbf{k}'$. При этом для затравочной вершины Γ_j мы нашли (см. также [10])

$$\Gamma_j^{-1}(\omega)=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\bar G^{(j)^+}_{\mathbf{k}}(\omega)\bar G^{(j)^-}_{\mathbf{k}}(\omega)\,. \quad (3.7)$$

В области относительно низких частот (2.9) и (2.10), т. е. в области, где решетка проявляет квазиодномерные свойства,

$$\Gamma_j(\omega)\approx\frac{\omega}{\pi\tau_i^{(j)}(\omega)g_j(\omega^2)}. \quad (3.7')$$

Диффузионные вершины. Будем рассматривать только частотные интервалы, в которых фононные законы дисперсии имеют квазиодномерные свойства. Заметим, что расчет полных вершин $U_j(\mathbf{k},\mathbf{k}';\omega,\Omega)$ в диффузионном пределе является сравнительно громоздким. Для случая $j=l$ с целью иллюстрации соответствующие вычисления выполнены в Приложении В. Ниже дается сводка результатов.

Во-первых, для случая продольных l-мод для области частот (2.9) с использованием (3.6), (3.7), а также (А.3) и (В.2) из Приложений имеем

$$U_l(\mathbf{q};\omega,\Omega)\approx\frac{\Gamma_l}{\tau_i^{(l)}}\left[-i\Omega+\left(1-\frac{2\omega_\parallel^2}{\omega^2}\,\frac{\Psi_2^{(l)}}{\Psi_0^{(l)}}\right)\tau_i^{(l)}\,v_\perp^{(l)2}q_\perp^2+\right.$$

$$+\frac{4(\Psi_2^{(l)}-\Psi_4^{(l)})}{\Psi_0^{(l)}}\,\frac{\langle v_\parallel^{(l)2}\rangle\tau_i^{(l)}}{a^2}\times$$

$$\left.\times\left(\sin^2\frac{q_xa}{2}+\sin^2\frac{q_ya}{2}\right)\right]^{-1}. \quad (3.8)$$

Здесь

$$\Psi_n^{(l)}=\Psi_n^{(l)}\left(\frac{\omega_\parallel}{\omega}\right)=\int\limits_0^{\pi/2}du\,\sin^2\frac{nu}{2}\,f\left(u,\frac{\omega_\parallel}{\omega}\right)\times$$

$$\times K\left(\frac{\omega_\parallel}{\omega}\,f\left(u,\frac{\omega_\parallel}{\omega}\right)\right),\quad n=2,4. \quad (3.9)$$

Выше с целью сокращения записи положено

$$f\left(u,\frac{\omega_\parallel}{\omega}\right)=\frac{1}{\sqrt{1-(\omega_\parallel^2/\omega^2)\,\sin^2u}}.$$

Когда $\omega\gg\omega_\parallel$, величины $\Psi_n^{(l)}$ (3.9) приближенно равны

$$\Psi_0^{(l)}\approx\frac{\pi^2}{4},\quad \Psi_2^{(l)}\approx\frac{\pi^2}{8},\quad \Psi_4^{(l)}\approx\frac{3\pi^2}{32}. \quad (3.9')$$

При этом упрощается выражение для U_l (3.8). Оно имеет следующий вид:

$$U_l(\mathbf{q};\omega,\Omega)\approx\frac{\Gamma_l}{\tau_i^{(l)}}\left[-i\Omega+D_\perp^{(l)0}q_\perp^2+\frac{D_\parallel^{(l)0}}{a^2}\times\right.$$

$$\left.\times\left(\sin^2\frac{q_xa}{2}+\sin^2\frac{q_ya}{2}\right)\right]^{-1}, \quad (3.10)$$

где

$$D_\perp^{(l)0}=v_\perp^{(l)2}\tau_i^{(l)},\quad D_\parallel^{(l)0}=\langle v_\parallel^{(l)2}\rangle\tau_i^{(l)}/2\,.$$

Для случая изгибных b-мод вершина U_b в области частот (2.10) определяется как

$$U_b(\mathbf{q};\omega,\Omega)\approx\frac{\Gamma_b}{\tau_i^{(b)}}\left[-i\Omega+\frac{4}{\pi}\,\frac{\Psi_1^{(b)}}{\Psi_0^{(b)}}\tau_i^{(b)}\,v_\perp^{(b)2}q_\perp^2+\right.$$

$$\left.+\frac{4\Psi_2^{(b)}}{\Psi_0^{(b)}}\,\frac{\langle v_\parallel^{(b)2}\rangle\tau_i^{(b)}}{a^2}\left(\sin^2\frac{q_xa}{2}+\sin^2\frac{q_ya}{2}\right)\right]^{-1}. \quad (3.11)$$

Здесь

$$\Psi_0^{(b)} = \Psi_0^{(b)}\left(\frac{\omega_2}{\omega}\right) = \int\limits_0^{\pi/2}\int\limits_0^{\pi/2} du\, dt\, P(u,t),$$

$$\Psi_1^{(b)} = \iint\limits_0^{\pi/2} du\, dt\, P^{-1}(u,t),$$

$$\Psi_2^{(b)} = \iint\limits_0^{\pi/2} du\, dt\, \sin^2(2u)\, P(u,t),$$

$$P(u,t) = \left[1 - \frac{\omega_2^2}{\omega^2}(\sin^2 u + \sin^2 t)\right]^{-3/4}.$$

Когда $\omega \gg \omega_2$, величины $\Psi_n^{(b)}$ приближенно равны

$$\Psi_0^{(b)} = \Psi_1^{(b)} = \frac{\pi^2}{4}, \quad \Psi_2^{(b)} = \frac{\pi^2}{16}. \tag{3.11$'$}$$

В результате вместо (3.11) получаем

$$U_b(\mathbf{q};\omega,\Omega) \approx \frac{\Gamma_b}{\tau_i^{(b)}}\left[-i\Omega + D_\perp^{(b)0} q_\perp^2 + \frac{D_\parallel^{(b)0}}{a^2} \times \left(\sin^2\frac{q_x a}{2} + \sin^2\frac{q_y a}{2}\right)\right]^{-1}, \tag{3.12}$$

где

$$D_\perp^{(b)0} = v_\perp^{(b)2}\tau_i^{(b)}, \quad D_\parallel^{(b)0} = \langle v_\parallel^{(b)2}\rangle \tau_i^{(b)}/2\,.$$

Обратим внимание на то, что через функции $\Psi_0^{(l)}$ и $\Psi_0^{(b)}$ выражаются парциальные плотности колебательных состояний:

$$g_l(\omega^2) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi^3\omega_\perp}\Psi_0^{(l)}, \quad g_b(\omega^2) = \frac{1}{2\pi^{5/2}}\,\frac{\Psi_0^{(b)}}{\sqrt{\omega_\perp\omega^3}}. \tag{3.13}$$

Парциальные коэффициенты диффузии. Перейдем теперь к определению парциальных коэффициентов диффузии в режиме слабой локализации. Определим главные значения тензора $D^{(j)}$ в ситуации, когда выполнены условия (3.5). С учетом соотношений (3.2) и (3.4) имеем

$$\{D_\parallel^{(j)}\,,\, D_\perp^{(j)}\} = \{D_\parallel^{(j,1)}\,,\, D_\perp^{(j,1)}\} - \{D_\parallel^{(j,2)}\,,\, D_\perp^{(j,2)}\}\,, \tag{3.14}$$

где

$$\{D_\parallel^{(j,1)}, D_\perp^{(j,1)}\} = \frac{1}{\pi g_j(\omega)}\times \lim_{\Omega\to 0}\sum_{\mathbf{k}}\left\{\frac{\partial\omega_j^2(\mathbf{k})}{\partial k_\parallel}, \frac{\partial\omega_j^2(\mathbf{k})}{\partial k_z}\right\}\times \bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)+}(\omega)\bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)-}(\omega+\Omega), \tag{3.15}$$

$$\{D_\parallel^{(j,2)}, D_\perp^{(j,2)}\} = \frac{1}{\pi g_j(\omega)}\lim_{\Omega\to 0}\sum_{\mathbf{q}\le \mathbf{q}_j^{(\parallel)}, q_j^{(\perp)}} U_j(\mathbf{q};\omega,\Omega)\times \sum_{\mathbf{k}}\left\{\frac{\partial\omega_j^2(\mathbf{k})}{\partial k_\parallel}\frac{\partial\omega_j^2(\mathbf{k})}{\partial k_z}\right\}\times \bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)+}(\omega)\bar{G}_{\mathbf{k}}^{(j)-}(\omega+\Omega)\bar{G}_{\mathbf{k+q}}^{(j)+}(\omega)\bar{G}_{\mathbf{k+q}}^{(j)-}(\omega+\Omega). \tag{3.16}$$

Первое слагаемое в (3.14) определяет стандартные значения коэффициента диффузии. Второе слагаемое в (3.16) описывает влияние интерференционных процессов рассеяния вблизи дефектов. В исследуемом нами случае решетки с сильноанизотропным межатомным силовым взаимодействием суммирование по $\mathbf{q}$ ограничено сверху малыми величинами $q_j^{(\parallel,\perp)} \approx \pi/l_{\parallel,\perp}^{(j)}(\omega)$. При этом если $a \approx b$, то $l_{\parallel,\perp}^{(j)} = v_{\parallel,\perp}^{(j)}\tau_i^{(j)}(\omega)$. 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 статическим случаем, когда $\Omega \to 0$. Опираясь на соотношения (3.14)–(3.16) и используя представления для гриновских функций (2.31) и вершинных частей (3.10) и (3.12), можно вычислить парциальные коэффициенты диффузии в области частот, в которой колебательный спектр мод проявляет квазиодномерные свойства.

Определим для примера коэффициент диффузии $D^{(l)}$ для области частот (2.9). Рассмотрим сначала вклад в $D^{(l)}$, задаваемый (3.15). Перейдем в (3.15) от суммирования к интегрированию. Интегрирование по dk_z можно осуществить через вычет и затем по dk_x и dk_y непосредственно. Находим

$$\{D_\perp^{(l,1)}(\omega),\, D_\parallel^{(l,1)}(\omega)\} = 4b\tau_i^{(l)}(\omega)\frac{\Psi_0^{(l)}}{\pi^3 g_l(\omega)v_\perp}\times \left\{v_\perp^2\left(1 - \frac{2\omega_\parallel^2\Psi_2^{(l)}}{\omega^2\Psi_0^{(l)}}\right), \frac{a^2\omega_\parallel^4}{4\omega^2}\frac{4(\Psi_2^{(l)} - \Psi_4^{(l)})}{\Psi_0^{(l)}}\right\} \tag{3.17}$$

(функции $\Psi_n^{(l)}$ определены соотношением (3.9). Далее, перейдем к интерференционному слагаемому

(3.16). После проведения вычислений, аналогичных описанным выше, получаем

$$\{D_\perp^{(l,2)}(\omega,\Omega)\,,\, D_\parallel^{(l,2)}(\omega,\Omega)\} = \\ = \{D_\perp^{(l,1)}(\omega), D_\parallel^{(l,1)}(\omega)\}\frac{\tau_i^{(l)2}}{2\omega^2}\sum_{\mathbf{q}} U_l(\mathbf{q};\omega,\Omega). \quad (3.18)$$

С учетом (3.17) и (3.18) имеем

$$\{D_\perp^{(l)}(\omega,\Omega), D_\parallel^{(l)}(\omega,\Omega)\} = \\ = \{D_\perp^{(l,1)}(\omega), D_\parallel^{(l,1)}(\omega)\}F^{(l)}(\omega,\Omega), \quad (3.19)$$

где

$$F^{(l)}(\omega,\Omega) = 1 - \frac{\tau_i^{(l)2}(\omega)}{2\omega^2}\sum_{\mathbf{q}} U_l(\mathbf{q};\omega,\Omega) \quad (3.20)$$

(диффузионная вершина U_l задается выражением (3.8)).

Для области частот $\omega^2 \gg \omega_\parallel^2$ с учетом (3.9′), (2.13′) выражение (3.17) принимает вид

$$\{D_\perp^{(l,1)}(\omega), D_\parallel^{(l,1)}(\omega)\} \approx \left\{\tau_i^{(l)}v_\perp^2, \frac{a^2\omega_\parallel^4\tau_i^{(l)}}{8\omega^2}\right\} = \\ = \left\{\tau_i^{(l)}v_\perp^2, \frac{\langle v_\parallel^{(l)2}\rangle\tau_i^{(l)}}{2}\right\}. \quad (3.21)$$

Для фактора $F^{(l)}$ (3.20) в статическом пределе $\Omega \to 0$ с учетом (3.10) одновременно с (3.21) можно получить представление в форме

$$F^{(l)}(\omega) \approx 1 - \Delta F^{(l)}, \\ \Delta F^{(l)} = \frac{c\epsilon^2}{\pi}\,\frac{\omega}{\omega_\perp}\,\frac{\omega^2}{\omega_\parallel^2}\,\frac{C_e}{\sqrt{1-\omega_\parallel^2/\omega^2}}, \quad (3.21')$$

причем

$$C_e = K\left(\sqrt{2}-1\right)K'(\sqrt{2}-1) = \sqrt{2}\,K^2(\sqrt{2}-1) \approx 3.83.$$

Аналогичным образом можно показать, что в случае изгибных b-мод при $\omega^2 \gg \omega_2^2$

$$\{D_\perp^{(b)},\, D_\parallel^{(b)}\} \approx \\ \approx \left\{\left[\frac{4}{\pi}b^2\omega_3\omega\tau_i^{(b)},\, \frac{a^2}{16\pi}\,\frac{\omega_2^4}{\omega^2}\tau_i^{(b)}(\omega)\right]F^{(b)}(\omega)\right\}, \quad (3.22)$$

где

$$F^{(b)}(\omega) = 1 - \Delta F^{(b)}, \\ \Delta F^{(b)} = \sqrt{\pi}c\epsilon^2\,\frac{\omega^2}{\omega_2^2}\sqrt{\frac{\omega}{\omega_3}}\;\frac{C_e}{1-3\omega_2^2/4\omega^2}. \quad (3.22')$$

Подчеркнем, что отклонение фактора $F^{(l,b)}$ от единицы связано с влиянием процессов обратного когерентного рассеяния. Из рассмотрения выражений (3.21′) и (3.22′) непосредственно следует, что в условиях диагонального беспорядка, когда $c\epsilon^2 \sim 0.1$, в некоторых интервалах промежуточных частот (2.9) и (2.10) парциальные коэффициенты диффузии могут существенно измениться из-за интерференционных процессов. В принципе в спектре $D(\omega)$ возникает щель, т. е. при ослаблении взаимодействия между цепочками (когда уменьшаются величины частот $\omega_\parallel, \omega_2$) усиливается перенормировка парциальных диффузионных факторов.

Как уже отмечалось, $\omega_3 \approx \omega_\perp$, $\omega_1 \approx \omega_\parallel$ и $\omega_1 \ll \omega_2$. Поэтому, поскольку

$$\frac{\Delta F^{(b)}}{\Delta F^{(l)}} = \sqrt{\pi^3}\,\frac{\omega_\parallel^2}{\omega_2^2}\sqrt{\frac{\omega_\perp}{\omega}} \approx \sqrt{\pi^3}\,\frac{\omega_1^2}{\omega_2^2}\sqrt{\frac{\omega_\perp}{\omega}} < 1, \quad (3.23)$$

изгибные моды по сравнению с продольными модами начинают локализоваться при больших значениях параметра $c\epsilon^2$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проанализирован вопрос о возможности проявления слабой локализации акустических колебательных мод в неидеальной сильноанизотропной гармонической кристаллической решетке цепочечного типа. Принималось, что связь между атомами в цепочках много сильнее, чем между атомами отдельных цепочек и решетка проявляет квазиодномерные свойства. Рассмотрены продольно поляризованные возбуждения и возбуждения, напоминающие волны изгиба в невзаимодействующих цепочках.

Для области температур, в которой длины пробега фононов определяются упругим рассеянием на точечных дефектах, получены аналитические выражения для тензоров коэффициентов диффузии D мод. Показано, что в определенных частотных интервалах, где законы дисперсии мод обладают квазиодномерными свойствами, при значениях параметра беспорядка около нескольких десятых за счет процессов обратного когерентного рассеяния возможна существенная перенормировка коэффициента диффузии. В принципе в спектре $D(\omega)$ возникает интервал запрещенных частот.

Сравним результаты для кристалла цепочечного типа с результатами для трехмерного и слоистого кристаллов. В случае трехмерного кристалла и диагонального беспорядка в дебаевской низкочастотной части спектра существуют квазилокальные моды. Иными словами, возникает система резонансно рассеивающих примесных центров. Если концентрация c примесей больше критической c_{cr} и в спектре появляется низкочастотная щель, то на ее краях возникают области, в которых моды локализуются. В условиях, когда $c < c_{cr}$ (щель отсутствует), процессы локализации проявляются слабо по сравнению с эффектом задержки [6]. Случай слоистого кристалла рассмотрен в [10]. Если беспорядок диагональный, то в области, где решетка проявляет квазидвумерные (или квазиодномерные) свойства, примесные моды квазилокального типа отсутствуют. Согласно [10], из-за специфических интерференционных процессов рассеяния щель в спектре $D(\omega)$ появляется только при сильном беспорядке, когда $c\epsilon^2 \geq 1$. Таким образом, как и следовало ожидать, процессы когерентного обратного рассеяния наиболее четко должны проявляться для цепочечных соединений.

К сожалению, нам не известны экспериментальные данные по теплопроводности существенно неупорядоченных квазиодномерных кристаллов. Поиск предсказываемой в данной работе перенормировки тензора D требует проведения специальных экспериментов на соединениях типа карболайта.

Авторы благодарны рецензенту за очень ценные замечания.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Определим плотности состояний продольных и изгибных мод в областях, где решетка проявляет квазиодномерные свойства. Во-первых, по определению

$$g_l(\omega^2) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega^2 - \omega_l^2(\mathbf{k})). \tag{A.1}$$

Перейдем в (A.1) от суммирования по $\mathbf{k}$ к интегрированию по $d\mathbf{k}$. При этом

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} ... = \frac{a^2 b}{(2\pi)^3} \iint\limits_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x dk_y \int dk_z ... \tag{A.2}$$

Для неизгибных мод, если частота лежит в интервале $2\omega_\parallel^2 \leq \omega^2 < \omega_\perp^2$, с учетом (A.2) плотность состояний задается соотношениями

$$g_l(\omega^2) = \frac{a^2 b}{(2\pi)^3} \iint\limits_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x dk_y \times$$
$$\times \int dk_z \delta\left(\omega^2 - \dot{v}_\perp^2 k_z^2 - \omega_\parallel^2\left(\sin^2\frac{k_x a}{2} + \sin^2\frac{k_y a}{2}\right)\right) =$$
$$= \frac{2\sqrt{2}a^2}{\pi^3\omega_\perp} \iint\limits_{0}^{\pi/a} dx\, dy \left(\omega^2 - \omega_\parallel^2 \sin^2 x\right)^{-1/2} \times$$
$$\times \left(1 - \frac{\omega_\parallel^2}{\omega^2 - \omega_\parallel^2\sin^2 x}\sin^2 y\right)^{-1/2} =$$
$$= \frac{2\sqrt{2}}{\pi^3\omega_\perp\omega}\Psi_0^{(l)}\left(\frac{\omega_\parallel}{\omega}\right),$$
$$\Psi_0^{(l)}(w) = \int\limits_0^{\pi/2} dx \left(1 - w^2\sin^2 x\right)^{-1/2} \times \tag{A.3}$$
$$\times K\left(\sqrt{\frac{w^2}{1 - w^2\sin^2 x}}\right), \quad w^2 = \frac{\omega_\parallel^2}{\omega^2}.$$

В (A.3) сделаем замену переменных. Положим

$$z = \frac{\sqrt{1-w^2}}{\sqrt{1 - w^2\sin^2 x}}. \tag{A.4}$$

В результате вместо (A.3) получаем

$$\Psi_0^{(l)}(\omega^2) = \int\limits_{\sqrt{1-w^2}}^{1} \frac{dz\, K\left(\dfrac{wz}{\sqrt{1-w^2}}\right)}{\sqrt{[z^2 - (1-w^2)]\,(1-z^2)}}. \tag{A.5}$$

Интеграл (A.5) выражается через функции эллиптического типа. Согласно [20],

$$\Psi_0^{(l)}(\omega^2) = \frac{2}{1+\sqrt{1-w^2}} \times$$
$$\times K'\left(\frac{\sqrt{1-w^2}\left(1 + \sqrt{1 - \dfrac{w^2}{1-w^2}}\right)}{1+\sqrt{1-w^2}}\right) \times$$
$$\times K\left(\frac{\sqrt{1-w^2}\left(1 - \sqrt{1 - \dfrac{w^2}{1-w^2}}\right)}{1+\sqrt{1-w^2}}\right). \tag{A.6}$$

Для b-мод в интервале частот $2\omega_2^2 \leq \omega^2 \ll \omega_3^2$ имеем

$$g_b(\omega^2) = \frac{a^2 b}{(2\pi)^3} \iint\limits_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x\, dk_y \times$$

$$\times \int dk_z \delta\Big(\omega^2 - \omega_b(\mathbf{k})^2\Big) =$$

$$= \frac{1}{2\pi^3 \omega_\perp b} \iint\limits_{-\pi/a}^{\pi/a} dx\, dy \int \frac{d\Big(k_z^2 \omega_\perp b^2\Big)}{2k_z} \times$$

$$\times \delta\bigg[\bigg(\sqrt{\omega^2 - \omega_2^2(\sin^2 x + \sin^2 y)} - \frac{k_z^2 \omega_\perp b^2}{\pi}\bigg) \times$$

$$\times \bigg(\sqrt{\omega^2 - \omega_2^2(\sin^2 x + \sin^2 y)} + \frac{k_z^2 \omega_\perp b^2}{\pi}\bigg)\bigg] =$$

$$= \frac{\Psi_0^{(b)}}{2\pi^2 \sqrt{\pi \omega_\perp \omega^3}},$$

$$\Psi_0^{(b)} = \int\limits_0^{\pi/2} dx \bigg(1 - \frac{\omega_2^2}{\omega^2}\sin^2 x\bigg)^{-3/4} \times \tag{A.7}$$

$$\times \int\limits_0^{\pi/2} dy \bigg(1 - \frac{\omega_2^2}{\omega^2 - \omega_2^2 \sin^2 x}\sin^2 y\bigg)^{-3/4}.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Рассмотрим одномерную цепочку с законом дисперсии

$$\tilde{\omega}_l^2(\mathbf{k}) = 2\omega_\perp^2 \sin^2 \frac{k_z b}{2} \tag{Б.1}$$

и с тяжелыми примесями. В этом случае можно получить точные аналитические выражения для гриновской функции $G_l^0(\omega^2)$, а также для параметров квазилокального уровня.

Во-первых, с использованием (Б.1) имеем

$$\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\tilde{G}_l^0(\omega^2) = \tilde{g}_l(\omega^2) = \frac{1}{N}\sum_{k_z} \delta(\omega^2 - \tilde{\omega}_l^2(\mathbf{k})) =$$

$$= \frac{b}{2\pi\omega_\perp^2}\frac{1}{b}\int \frac{d\cos(k_z b)}{-\sin(k_z b)} \times$$

$$\times \delta\left(\cos(k_z b) - \frac{\omega_\perp^2 - \omega^2}{\omega_\perp^2}\right) = \frac{1}{\pi\omega}\frac{1}{\sqrt{2\omega_\perp^2 - \omega^2}}. \tag{Б.2}$$

Во-вторых, по определению

$$\operatorname{Re}\tilde{G}_l^0(\omega^2) = \int\limits_0^\infty \frac{d\omega'^2}{\pi} P \frac{1}{\omega^2 - \omega'^2}\operatorname{Im}\tilde{G}_l^0(\omega^2). \tag{Б.3}$$

Фигурирующий в (Б.3) интеграл берется с помощью подстановки

$$\omega'^2 = 2\omega_\perp^2 \sin^2 u. \tag{Б.4}$$

Получаем

$$\operatorname{Re}\tilde{G}_l^0(\omega^2) = \frac{2}{\pi\omega}\frac{1}{\sqrt{2\omega_\perp^2 - \omega^2}}. \tag{Б.5}$$

С использованием соотношений (2.27), (2.29) и (Б.2), (Б.5) можно определить характерную частоту и ширину квазилокального уровня:

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_r &= \frac{\pi}{\sqrt{2}|\epsilon|}\frac{\omega_\perp}{\sqrt{1 + \pi/2|\epsilon|}}, \\ \tilde{\Gamma}_r(l) &= \frac{\pi}{2}\,\omega_r\left(1 - \frac{\omega_r^2}{2\omega_\perp^2}\right). \end{aligned} \tag{Б.6}$$

Сопоставим $\tilde{\omega}_r$ и $\tilde{\Gamma}_r(l)$. Согласно (Б.6) условие существование примесного уровня, $\tilde{\Gamma}_r(l)/\tilde{\omega}_r \ll 1$, выполняется только вблизи верхней границе спектра, когда $\tilde{\omega}_r \leq 2\omega_\perp^2$.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Рассмотрим случай l-моды и получим некоторое конкретное выражение для фактора $J_l(\mathbf{q};\omega,\Omega)$, который фигурирует в формуле (3.6) для вершинной части в уравнении типа Бете—Солпитера для двухчастичной гриновской функции. С этой целью перейдем в выражении для J_l от суммирования по $\mathbf{k}$ к интегрированию по $d\mathbf{k}$, для чего воспользуемся соотношением (А.2). Возьмем интеграл по dk_z, используя представление для функций Грина в форме (2.31), через вычеты. Получаем

$$J_l(\mathbf{q};\omega,\Omega) = \frac{\sqrt{2}\pi\, a^2 \tau_i^{(l)}}{2\pi^3 \omega^2 \omega_\perp} \times$$

$$\times \iint\limits_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk_x dk_y}{\sqrt{1 - \dfrac{\omega_\parallel^2}{\omega^2}\left(\sin^2 \dfrac{q_x a}{2} + \sin^2 \dfrac{q_y a}{2}\right)}} \times$$

$$\times \left\{1 + i\Omega\tau_i^{(l)} + i\frac{\tau_i^{(l)}\omega_\parallel^2}{2\omega} \times\right.$$

$$\times \left[\sin\frac{q_x a}{2}\sin(k_x a) + \sin\frac{q_y a}{2}\sin(k_y a)\right] - i(\mathbf{v}_\perp \mathbf{q}_\perp) \times$$

$$\left.\times\, \tau_i^{(l)}\left[1 - \frac{\omega_\parallel^2}{\omega^2}\left(\sin^2\frac{q_x a}{2} + \sin^2\frac{q_y a}{2}\right)\right]^{1/2}\right\}^{-1}. \tag{В.1}$$

В ситуации, когда имеют место процессы обратного когерентного рассеяния, должны выполняться условия $q_\perp l_i \ll 1$ и $\Omega\,\tau_i^{(l)}(\omega) \ll 1$ (здесь

$l_i = \mathbf{v}_\perp \tau_i^{(l)}$ — упругая длина свободного пробега). Будем рассматривать также интервал частот таких, что $(\omega_\parallel^2 \tau_i^{(l)}/\omega) \ll 1$ (напомним, что $\omega_\parallel$ — параметр, характеризующий «зацепление» цепочек). Принимая во внимание все сказанное, представим выражение в фигурных скобках в (B.1) в виде ряда геометрической прогрессии. Интегралы от нечетных функций обращаются в нуль. В результате оказывается, что

$$J_l(\mathbf{q};\omega,\Omega) \approx \frac{2\sqrt{2}\tau_i^{(l)}}{\pi^2\omega^2\omega_\perp} \left\{ \left(1+i\Omega\tau_i^{(l)} - \tau_i^{l2} v_\perp^{(l)2} q_\perp^2\right)\Psi_0^{(l)} - \right.$$
$$- 4(\Psi_2^{(l)} - \Psi_4^{(l)}) \left(\frac{\tau_i^{(l)}\omega_\parallel^2}{2\omega}\right)^2 \left(\sin^2\frac{q_x a}{2} + \sin^2\frac{q_y a}{2}\right) +$$
$$\left. + \Psi_2^{(l)} \frac{2\omega_\parallel^2}{\omega^2} v_\perp^{(l)2} \tau_i^{(l)2} q_\perp^2 \right\}. \qquad \text{(B.2)}$$

Функции $\Psi_n^{(l)}$ определены выше в основной части текста.

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Akkermans and R. Maynard, Phys. Rev. B **32**, 7860 (1985).
2. T. R. Kirpatrik, Phys. Rev. B **31**, 5746 (1985).
3. J. E. Graebner, B. Golding, and L. C. Allen, Phys. Rev. B **34**, 5696 (1986).
4. Qian-Jin Chu and Zhao-Oing Zhag, Phys. Rev. B **38**, 4906 (1988).
5. H. Bottger and M. Theuerkauf, Phys. Stat. Sol. (b) **150**, 73 (1988).
6. A. P. Zhernov, E. I. Salamatov, and E. P. Chulkin, Phys. Stat. Sol (b) **165**, 355 (1991); **168**, 81 (1991).
7. А. П. Жернов, Е. П. Чулкин, ЖЭТФ **109**, 602 (1996).
8. М. А. Иванов, Ю. В. Скрипник, ФТТ **32**, 2965 (1990).
9. М. А. Иванов, А. М. Косевич, Е. С. Сыркин, Ю. В. Скрипник, И. А. Господарев, С. Б. Феодосьев, ФНТ **19**, 434 (1993).
10. А. П. Жернов, Е. П. Чулкин, ЖЭТФ **113**, 930 (1998).
11. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **22**, 475 (1952).
12. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, ЖЭТФ **61**, 2429 (1971).
13. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, А. Холас, ЖЭТФ **62**, 1492 (1972).
14. Ю. М. Каган, В. В. Пушкарев, А. Холас, ЖЭТФ **73**, 967 (1977).
15. N. W. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. **21**, 1748 (1968).
16. S. Tanuma and A. V. Palnichenko, J. Mater. Res. **10**, 1120 (1995).
17. A. S. Gurov, V. N. Kopylov, and K. Kusano, Phys. Rev. B **56**, 11629 (1997).
18. Г. Лейбфрид, В. Людвиг, *Теория ангармонических эффектов в кристаллах*, ИИЛ, Москва (1968).
19. Г. Лейбфрид, Н. Бройер, *Точечные дефекты в металлах*, Мир, Москва (1981).
20. А. А. Прудников, Ю. А. Бычков, О. И. Марычев, *Интегралы и ряды. Дополнительные главы*, Наука, Москва (1986), стр. 184.