

АМОРФНОЕ И ЖИДКОЕ СОСТОЯНИЯ

УДК 539.2

PACS numbers: 63.50.+x

Е. П. Никонова, В. Н. Соловьев

Криворожский государственный педагогический институт,
кафедра информатики и прикладной математики
Украина, 324086 Кривой Рог, просп. Гагарина, 54

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ АНОМАЛИИ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ

Низкотемпературные свойства металлических стекол проявляют универсальные аномалии, не наблюдаемые в кристаллах. Одна из причин их возникновения — в избыточной (по сравнению с дебаевской) плотности колебательных состояний, практически не зависящей от химической природы неупорядоченного материала. В рамках модели мягких атомных потенциалов произведена классификация атомных возбуждений и рассчитаны явные энергетические зависимости плотности колебательных возбуждений в широком интервале температур. Для учета взаимодействия возбуждений использован метод когерентного потенциала.

Низькотемпературні властивості металевого скла проявляють універсальні аномалії, що не спостерігається у кристалах. Однією з причин їх виникнення є надлишкова (порівняно з дебаєвською) щільність коливних станів, які не залежать від хімічної природи неупорядкованих матеріалів. В межах моделі м'яких атомних потенціалів проведено класифікацію атомних збуджень та знайдено енергетичні залежності щільності коливних збуджень у широкому інтервалі температур. Для врахування взаємодії збуджень використано метод когерентного потенціалу.

Low-temperature properties of metallic glasses show universal anomalies not observed in crystals. One of the reasons for their appearance consists in the excess density of vibrational states in comparison with standard Debye's theory and is independent on the chemical nature of disordered solid. Within the framework of the soft-potential model, the classification of atom excitations is made, and energy dependences of vibration-excitations' density over a wide temperature range are calculated. To take into account the excitations' interaction, the method of coherent potential is used.

Ключевые слова: металлические стекла, когерентный потенциал, квазилокальные возбуждения, бозонный пик, аномалии.

1. Введение

Известно, что отсутствие трансляционной симметрии в неупорядоченных структурах приводит к характерным отличиям их физических свойств от свойств кристаллических аналогов. Одним из ярких примеров служит существование дополнительных низкоэнергетических колебательных мод, отождествляемых в ранних работах [1] с двухуровневыми системами (ДУС), возникающими в двухъямных

потенциалах. Позже оказалось, что кроме ДУС имеются и другие (тоже дополнительные к кристаллическим) избыточные колебательные состояния [2], проявляющиеся при более высоких температурах.

В [3] построена теория колебательных спектров стекол, основанная на учете статистических флуктуаций локальных упругих констант. Передав качественно универсальное поведение плотности состояний $n(E)$, мы не конкретизировали явную энергетическую зависимость

$n(E)$ в области низких и промежуточных энергий. Кроме того, считалось, что в области ДУС $n(E) \approx \text{const}$. Однако это не подтверждается экспериментами по измерению низкотемпературной теплоемкости [4], ширины бесфононных линий в примесных центрах [5], указывающих на слабую энергетическую зависимость $n \propto E^\mu$, $\mu = 0,2-0,4$.

В настоящей работе произведены численные расчеты энергетической зависимости плотности состояний в широком интервале температур от сверхнизких до температур порядка Дебая.

2. Плотность состояний невзаимодействующих ангармонических осцилляторов

В последние пять лет модель мягких атомных потенциалов стала общепризнанной моделью стеклообразных материалов, достаточно полно учитывая их аномальные свойства (см., например, обзор [2] и ссылки в нем). Основная идея модели сводится к утверждению, что квазилокальные низкочастотные моды в стеклах описываются гамильтонианом мягкого ангармонического осциллятора

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad (1)$$

где M — эффективная масса осциллятора. Потенциальная энергия $V(x)$ имеет вид одномерного разложения

$$V(x) = \varepsilon_0 [\eta(x/a)^2 + t(x/a)^3 + (x/a)^4]. \quad (2)$$

Здесь a — характерный атомный размер, ε_0 — энергия, порядка энергии связи атомов стекла; η , t — случайные величины, функции распределения которых для конкретных материалов получены в [6].

Характерными параметрами модели являются величины η_L и W . Первый характеризует масштаб безразмерной величины η . Значение W определяет масштаб энергий в потенциале (2) при $\eta = t = 0$: $\eta_L = \left(\frac{\hbar^2}{2M} a^2 \varepsilon_0\right)^{1/3} \approx 10^{-2}$, $W/k = \varepsilon_0 \eta_L^2 \approx 5$ К, k — константа Больцмана. При η , $t \ll 0$ модель мягких атомных потенциалов

(МАП) является моделью ДУС с расстояниями между наименьшими уровнями $E \ll W$ и высотой барьера V_b между минимумами $V_b = W/4(\eta/\eta_L)^2$. Другому предельному случаю $E \gg W$ в модели МАП отвечают два вида возбуждений. В одноямных потенциалах возникают квазилокальные гармонические потенциалы с быстро растущей плотностью состояний. В двухямных асимметричных потенциалах при достаточно высоком барьере V_b в кинетических явлениях при $kT \gg W$ наиболее важными становятся не переходы между уровнями в одной яме, а термоактивационные переходы между ямами. Они названы релаксационными системами [2]. В промежуточной области энергий $E \geq W$ существуют возбуждения одноямных и слабо неоднородных ангармонических осцилляторов, отвечающие переходам между несколькими нижайшими уровнями энергии.

Энергетический спектр в потенциале (2) определяется путем численного решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (1). Плотность состояний квазилокальных возбуждений находилась как количество состояний в энергетическом интервале $(\tilde{E}, \tilde{E} + d\tilde{E})$, где $\tilde{E} = E/W$. Результаты расчетов представлены на рис. 1.

3. Учет взаимодействия возбуждений методом когерентного потенциала

С ростом энергии резко возрастает концентрация гармонических осцилляторов и их уже нельзя рассматривать независимо друг от друга. Поскольку изложенная выше расчетная схема не позволяет учесть такое взаимодействие, воспользуемся методами, развитыми в теории динамики решетки [7].

Известно, что наилучшим приближением для спектральных характеристик неупорядоченной системы служит метод когерентного потенциала. Припишем каждому узлу системы эффективный потенциал $\sigma(\varepsilon)$, где $\varepsilon = (\hbar\omega)^2$. Роль узельных возмущений играют величины $U_\alpha - \sigma$. $U_\alpha(\hbar\omega)$ — узельный псевдопотенциал, зависящий от энергии. Самосогласованное

условие для определения $\sigma(\epsilon)$ состоит в том, что среднее по ансамблю значение t -матрицы равно нулю:

$$\langle t \rangle = \left\langle \frac{U_\alpha - \sigma}{1 - (U_\alpha - \sigma)P(\epsilon - \sigma)} \right\rangle = 0, \quad (3)$$

т. е. система ведет себя как эффективно когерентная.

Узловая функция Грина

$$P(\epsilon - \sigma) = \int_0^\infty d\epsilon' \frac{g(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon' - \sigma(\epsilon)}, \quad (4)$$

входящая в (3), сама содержит σ . Поэтому выражения (3), (4) представляют собой систему 4-х уравнений (по два для действительной и мнимой частей) с неизвестными $\text{Re}\sigma$, $\text{Im}\sigma$, $\text{Re}P$, $\text{Im}P$. Их и следует находить для каждого значения ϵ .

Получаемая система нелинейных интегральных уравнений решалась численно градиентным методом [8] для потенциала U вида

$$U = \frac{\epsilon\epsilon_0}{\epsilon - \epsilon_0}, \quad \epsilon_0 = \hbar\xi/M, \quad (5)$$

где ξ — силовая постоянная. Затравочное распределение гармонических осцилляторов выбиралось в форме

$$n_0(\epsilon) \propto C \frac{1}{\epsilon_D^2} \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_D} \right)^{3/2}, \quad C = \text{const}. \quad (6)$$

Зависимость (8) следует из распределения квазиупругих констант, полученных нами ранее путем компьютерного моделирования реальных

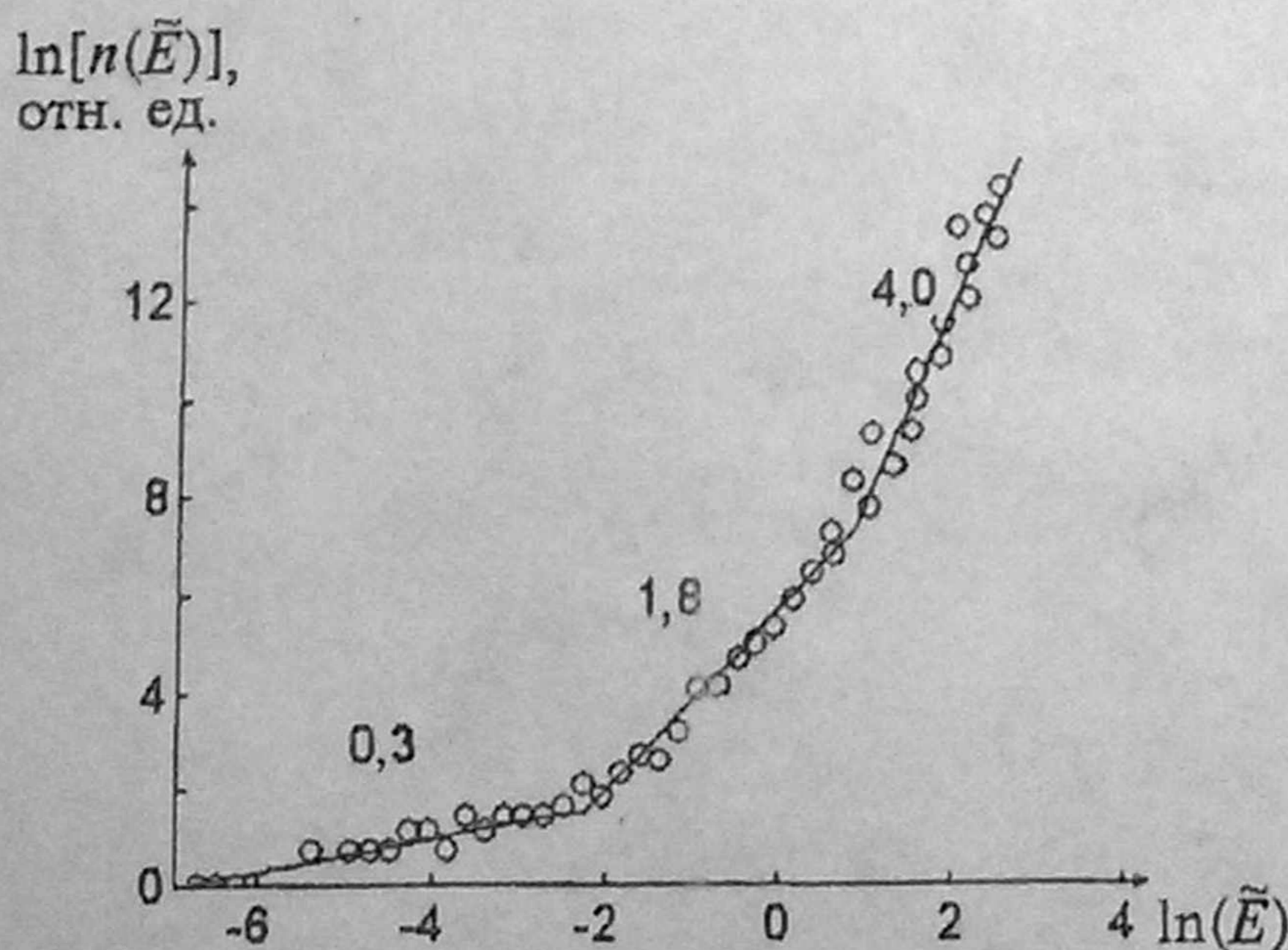


Рис. 1. Плотность состояний низкоэнергетических возбужденных состояний. Цифры — показатель степени μ в выражении $n(E) \propto E^\mu$

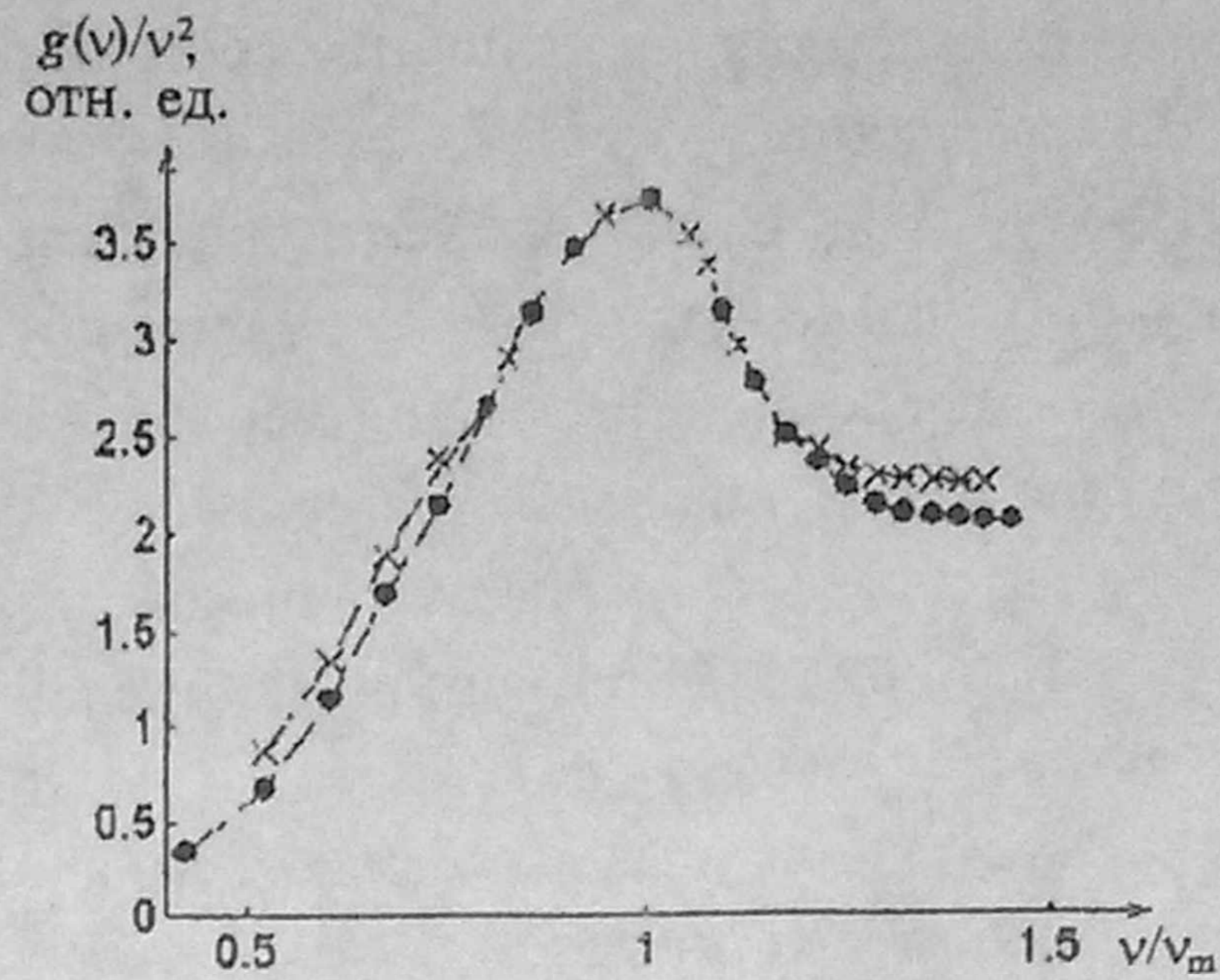


Рис. 2. Низкоэнергетические колебательные спектры стекол в масштабе, нормированном на частоту максимума ν_m : \times — $\text{Mg}_{70}\text{Zn}_{30}$, \bullet — расчет методом когерентного потенциала

аморфных структур [6]. Плотность состояний когерентной среды считалась дебаевской.

Для вычисления плотности состояний использовалось выражение [3]

$$n(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\langle P(\epsilon - \sigma) \left[1 - \frac{dU/d\epsilon}{1 - (U - \sigma)P(\epsilon - \sigma)} \right] \right\rangle. \quad (7)$$

Результаты расчетов изображены на рис. 2 в виде зависимости $g(v)/v^2$ от $\nu_h = v/\nu_m$, а ν_m — частота максимума в плотности состояний. Здесь же для сравнения приведены аналогичные зависимости для $\text{Mg}_{70}\text{Zn}_{30}$ [9].

4. Обсуждение результатов

Наиболее значительным результатом рассчитанной плотности состояний на рис. 1 есть установление зависимости плотности ДУС вида $n(E) \propto E^\mu$, где $\mu \approx 0,3$. Это позволяет интерпретировать многочисленные экспериментальные данные по измерению низкотемпературной теплоемкости [4, 10], ширины бесфоновых линий в примесных центрах [5]. Впервые также получено численное решение для плотности состояний гармонических осцилляторов. Возрастание их плотности пропорционально четвертой степени энергии соответствует теоретическим предсказаниям модели МАП [2].

Расчеты методом когерентного потенциала позволили учесть взаимодействие гармонических осцилляторов и воспроизвести уни-

версальный характер плотности состояний (рис. 2). Как видно из рис. 2, форма пика в разных материалах одинакова. Это свидетельствует о том, что обсуждаемые аномалии обусловлены универсальными закономерностями в структуре стеклообразных материалов [2]. Удовлетворительное согласие экспериментальных кривых с кривой, полученной из численных расчетов, говорит в пользу того, что взаимодействующие гармонические осцилляторы отвечают за форму пика.

Отметим, что подобная универсальность наблюдается и в спектрах комбинационного рассеяния света в стеклах [11]. Избыточная плотность состояний приводит к возникновению в спектрах рассеяния света так называемого бозонного пика. В [9] показано, что форма бозонного пика в координатах, нормированных на частоту максимума, одинакова в широком ряде стекол. Природа бозонного пика также хорошо описывается в модели МАП [12].

Таким образом, в рамках единого подхода построена теория низкоэнергетических колебательных состояний в неупорядоченных материалах. Полученные плотности атомных возбуждений позволяют интерпретировать широкий класс универсальных аномалий физиче-

ских свойств этих веществ.

1. P. W. Anderson, B. I. Halperin, C. M. Varma // *Philos. Mag.* — 1972. — 25, No. 1. — P. 1; W. A. Phillips // *J. Low Temp. Phys.* — 1972. — 7, No. 2. — P. 351.
2. Д. А. Паршин // *ФТТ.* — 1994. — 36, № 7. — С. 1809.
3. Ю. М. Гальперин, В. Г. Карпов, В. Н. Соловьев // *ЖЭТФ.* — 1988. — 94. — С. 373.
4. W. A. Phillips // *Rep. Prog. Phys.* — 1987. — 50. — P. 1657.
5. R. Silbey, K. Kassner // *J. Lumin.* — 1987. — 36. — P. 283.
6. Г. А. Дядына, В. Г. Карпов, В. Н. Соловьев // *ФТТ.* — 1990. — 32. — С. 2661.
7. А. М. Косевич. *Физическая механика реальных кристаллов.* — Киев: Наук. думка, 1981.
8. Б. П. Демидович, И. А. Марон. *Основы вычислительной математики.* — Москва: Физматиз, 1963.
9. М. Г. Землянов, В. К. Малиновский, В. Н. Новиков и др. // *Письма в ЖЭТФ.* — 1989. — 49, вып. 9. — С. 521.
10. D. A. Van de Straat, J. Baak, H. B. Brom et al. // *Phys. Rev. B.* — 1996. — 53, No. 5. — P. 2179.
11. A. Brodin, A. Fontana, L. Börjesson et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — 73. — P. 2067.
12. V. L. Gurevich, D. A. Parshin, J. Pelous, H. R. Schöber // *Phys. Rev. B.* — 1993. — 48. — P. 16318.

Получено 21.06.1998 (оконч. вариант — 23.09.1998)