Письма в ЖЭТФ, том 54, вып. 6, стр. 325 — 328 25 сентября 1991 г.

УНИВЕРСАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА СТЕКОЛ В ПСЕВДОСПИНОВОЙ МОДЕЛИ

А.Л.Бурин

Институт атомной энергии им.И.В.Курчатова
123182, Москва

Поступила в редакцию 1 августа 1991 г.

Изучаются свойства псевдоспиновой модели ориентационно-неупорядоченных кристаллов. Показано, что низкотемпературное поведение модели определяется возбуждениями, эквивалентными двухуровневым системам в стеклах, что позволяет объяснить стеклоподобное поведение, наблюдаемое в таких материалах.

Известно, что при низких температурах свойства стекол заметно отличаются от свойств обычных кристаллов [1]. Это отличие проявляется прежде всего в температурном поведении теплоемкости ($C \sim T$) и теплопроводности ($k \sim T^2$), а также логарифмической зависимости теплоемкости от времени эксперимента в области температур $T \lesssim 1$K. При более высоких температурах ($1 \lesssim T \lesssim 10$ K) наблюдается плато в теплопроводности ($k = \mathrm{const}$) и "горб" в температурной зависимости (C/T^3). Для объяснения этих аномалий была предложена гипотеза о существовании в этих материалах двухуровневых систем (ДУС), в которых переходы между уровнями носят туннельный характер [2,3]. ДУСы характеризуются случайными энергией ϵ и туннельной амплитудой Δ_0 с заданным распределением

$$P(\epsilon,\ \Delta_0) = P_0\epsilon(\Delta_0)^{-1}(\epsilon^2 - \Delta_0^2)^{-1/2}. \qquad (1)$$

Микроскопическое происхождение ДУС (1) в настоящий момент остается не до конца ясным.

Важную роль в решении этого вопроса может сыграть изучение свойств ориентационно-неупорядоченных кристаллов, которые демонстрируют стеклоподобное поведение в области низких температур [1]. В этих материалах туннельные состояния связаны с наличием примесей, обладающих вращательными степенями свободы. При низких температурах переходы между вращательными уровнями отдельной примеси (ротатора) носят туннельный характер. Взаимодействие ротаторов ведет к разбросу энергий возбуждения. Однако, нет никаких причин ожидать появления вследствие взаимодействия распределения типа (1) для туннельных амплитуд отдельных примесей. Анализ экспериментальных данных для наиболее хорошо исследованной системы $(\mathrm{KBr})_{1-x}(\mathrm{KCN})_x$ показывает (см. [4]), что ДУСы, ответственные за низкотемпературные аномалии свойств, не могут быть отождествлены с однопримесными возбуждениями.

Ниже на примере простой псевдоспиновой модели ориентационно-неупорядоченного кристалла мы изучим более сложные (чем однопримесные) возбуждения и покажем, что они характеризуются распределением (1), если взаимодействие ротаторов убывает с расстоянием по закону R^{-3}.

Вращательные уровни отдельной примеси мы будем рассматривать в двуямном приближении, сопоставляя каждой примеси оператор спина $S = 1/2$. Спины σ_i (концентрация спинов n) находятся в случайном внешнем поле $\omega(-\omega_i\sigma_i^z)$, распределенном симметрично и равномерно в интервале энергий $(-W,\ W)$. Каждый спин взаимодействует с окружающими спинами

через дальнодействующее взаимодействие U_{ik} $(-U_{ik}\sigma_i^z\sigma_j^z)$, которое убывает с расстоянием r_{ik} между спинами i, k по закону $|U_{ik}| \approx U_0/r_{ik}^3$. Знак взаимодействия может быть как положителен так и отрицателен, существенно, что угловое среднее от него обращается в нуль. Примем, что минимальное расстояние между спинами равно $(U_0/W)^{1/3}$. Учет туннелирования произведем, вводя в рассмотрение одинаковое для каждого спина слабое поперечное поле Δ_0 ($\Delta_0\sigma^x$; $\Delta_0 < U_0 n$; $U_0 n$ - взаимодействие спинов на среднем расстоянии).

Для нас существенно, чтобы выполнялось следующее условие слабости взаимодействия спинов по сравнению с разбросом случайных энергий

$$\xi < 1; \quad \xi = U_0 n/W \ln(W/\Delta_0). \tag{2}$$

Ограничение (2) позволяет, в частности, игнорировать дипольную щель в плотности возбуждений [5], поскольку она может сказываться при энергиях $\epsilon \lesssim U_0 n \exp(-W/(U_0 n))$, где более существенную роль играет отталкивание уровней (см. ниже).

Рассмотрим возбуждения системы при очень низких температурах

$$T < \Delta_0. \tag{3}$$

Выделим подсистему спинов, участвующих в возбуждениях с низкими энергиями $\epsilon \lesssim \eta\Delta_0$ $(\eta \gtrsim 1)$, и спроецируем полный гамильтониан системы на состояния этой подсистемы. При выделении низкоэнергетических возбуждений можно ограничиться продольной (изинговской) частью гамильтониана $(\hat{H}_0)$, поскольку туннельная часть $(\hat{V})$ переопределяет энергии возбуждений в масштабе $\Delta_0 \lesssim \eta\Delta_0$. При $\Delta_0 = 0$ состояние системы характеризуется определенными значениями всех спинов $(\sigma_i^z = \sigma_i^{(0)})$. Простейшее возбуждение в системе (одночастичное) возникает при перевороте одного спина $(\sigma_i^z = \sigma_i^{(0)} \Rightarrow \sigma_i^z = -\sigma_i^{(0)})$ и характеризуется энергией

$$\Delta_i = -2\sigma_i^{(0)}(\omega_i + \sum_k U_{ik}\sigma_k^{(0)}). \tag{4}$$

Спин i входит в подсистему, если выполняется условие малости энергии возбуждения $\Delta_i \lesssim \eta\Delta_0$. Концентрация таких спинов (одиночек) $n_i \simeq n\eta\Delta_0/W$. Более сложные (парные) возбуждения связаны с переворотом двух спинов $(\sigma_i^z = \sigma_i^{(0)},\ \sigma_k^z = \sigma_k^{(0)} \Rightarrow \sigma_k^z = -\sigma_k^{(0)},\ \sigma_i^z = -\sigma_i^{(0)})$ и характеризуются энергией

$$\Delta_{ik}^{(2)} = \Delta_i + \Delta_k + 4U_{ik}\sigma_i^{(0)}\sigma_k^{(0)}. \tag{5}$$

Нас будут интересовать только такие пары, для которых взаимодействие понижает энергию возбуждения $(U_{ik}\sigma_i^{(0)}\sigma_k^{(0)} < 0)$. В этом случае энергия $\Delta_{ik}^{(2)}$ может быть мала по сравнению с Δ_0 при Δ_i, $\Delta_k \gg \Delta_0$. Пары спинов, обладающие этим свойством, также должны быть включены в подсистему. Концентрация спинов, входящих в пары, $n_2 \simeq n_1\xi$ мала по сравнению с концентрацией одиночек в силу неравенства (2). Вклад тройных и более сложных возбуждений имеет дополнительную малость по параметру ξ, и мы будем их игнорировать. Учет парных возбуждений необходим в области температур (3) из-за сильного туннельного расщепления энергий однопримесных возбуждений.

В спроецированном на состояния подсистемы гамильтониане для пары (5) следует учитывать только состояния $\sigma_i^z = \sigma_i^{(0)}$, $\sigma_k^z = \sigma_k^{(0)}$; $\sigma_k^z = -\sigma_k^{(0)}$, $\sigma_i^z = -\sigma_i^{(0)}$, которые мы будем описывать эффективным спином σ_{ik}, значениям проекции которого $\sigma_{ik}^z = \pm 1/2$, отвечают указанные состояния. В области температур (3) спины, не входящие в подсистему, находятся в состоянии, отвечающем

наименьшей энергии (вероятность возбужденного состояния экспоненциально мала, $W_\pm \propto \exp(-\eta\Delta_0/T)$). Учет этих спинов приводит в изинговском приближении просто к переопределению случайного поля, действующего на спины, входящие в подсистему. В результате остается система слабо (в силу малости концентрации n_1, $U_0 n_1 \ll \Delta_0$) взаимодействующих одиночек и пар. Взаимодействие одиночка-пара и пара-пара несущественно отличается от затравочного взаимодействия одиночек, и учет этого отличия не сказывается на результатах.

Туннелирование мы будем учитывать по теории возмущений. В первом приближении возникает туннелирование одиночек $\hat{V}_1 = \Sigma' \Delta_0 \sigma_i^x$ (суммирование ведется только по спинам, входящим в подсистему). Заметим, что взаимодействие одиночек на среднем расстоянии мало по сравнению с их характерной энергией Δ_0 (одиночки, расположенные близко, составляют пары). Поэтому при расчете спектра возбуждений мы можем считать одиночки изолированными. Энергия изолированного спина не может быть меньше Δ_0 вследствие туннельного расщепления. Поэтому в области температур (3) вклад одиночек в термодинамические характеристики системы экспоненциально мал и им можно пренебречь по сравнению с вкладом парных возбуждений, для которых туннельное расщепление слабее и возникает только во втором порядке теории возмущений. Туннельная часть гамильтониана для пар имеет вид (см. [5])

$$\hat{V}_2 = \Sigma' \Delta_{0ik}^{(2)} \sigma_{ik}^x, \quad \Delta_0^{(2)} \approx U_0 \Delta_0^2 / (\Delta_i \Delta_k r_{ik}^3). \tag{6}$$

Для исключения "нефизического" возрастания парной туннельной амплитуды при Δ_i, $\Delta_k \Rightarrow 0$ примем ограничение Δ_i, $\Delta_k > \Delta_0$, учитывающее отталкивание уровней. Заметим, что во втором и следующих порядках теории возмущений возникают поправки к взаимодействию U и туннельной амплитуде Δ_0, малые по параметру ξ. Мы не будем их учитывать.

Рассмотрим подробнее парные возбуждения. Их взаимодействие также оказывается слабым в силу малости концентрации n_2 и пары можно приближенно считать изолированными. Каждая пара характеризуется туннельной амплитудой $\Delta_0^{(2)}$ и энергией $\epsilon^{(2)} = ((\Delta_0^{(2)})^2 + (\Delta^{(2)})^2)^{1/2}$. Парные возбуждения описываются функцией распределения по энергиям и туннельным амплитудам, которая определяется интегрированием:

$$P(\epsilon^{(2)}, \Delta_0^{(2)}) \approx n^2/W^2 \int\limits_{r_{min}} dr_{ik} \int\limits_{\Delta_0} d\epsilon_i \int\limits_{\Delta_0} d\epsilon_k \times$$

$$\times \delta(\epsilon^{(2)} - ((\epsilon_i + \epsilon_k - U_0/r_{ik}^3)^2 + (\Delta_0^{(2)})^2)^{1/2}) \times \tag{7}$$

$$\delta(\Delta_0^{(2)} - U_0 \Delta_0^2/(\epsilon_i \epsilon_k r_{ik}^3)), \quad r_{min} = (U_0/W)^{1/3}.$$

В интересующей нас области энергий $\epsilon^{(2)} < \Delta_0$ получаем

$$P(\epsilon^{(2)}, \ \Delta_0^{(2)}) \approx \tilde{P}_0 \epsilon^{(2)} (\Delta_0^{(2)})^{-1} ((\epsilon^{(2)})^2 - (\Delta_0^{(2)})^2)^{-1/2} \tag{8}$$

$$\Theta(\Delta_0 - \Delta_0^{(2)}) \Theta(\Delta_0^{(2)} - \Delta_0^2/W), \quad \tilde{P}_0 = n U_0 W^{-2}.$$

Распределение (8) в широком интервале энергий совпадает с распределением (1) ДУС в стеклах. Отсюда следует, что теплоемкость системы в области температур (3) должна демонстрировать характерные для стекол

аномалии температурной и временной зависимости. Оценку низкотемпературной теплопроводности легко получить, исходя из однофононного взаимодействия спинов со средой, диагонального по σ^z. При этом воспроизводится известный результат для стекол $k \sim T^2$. Заметим, что в рассматриваемой модели возможно объяснение плато в теплопроводности и горба в теплоемкости в области температур $T > \Delta_0$. Действительно, при этих температурах включаются возбуждения одиночек, плотность которых превосходит плотность пар. Рассеяние фононов резко усиливается и должен прекратиться рост теплопроводности с температурой. Горб в теплоемкости также может быть связан с возрастанием плотности возбуждений.

Таким образом, мы показали что модель взаимодействующих по закону r^{-3} псевдоспинов в сильном случайном поле (подобная модель для описания стекол была предложена в недавней работе [6]) демонстрирует стеклоподобное поведение при достаточно низких температурах и может быть использована для объяснения низкотемпературных свойств стеклоподобной фазы ориентационно-неупорядоченных кристаллов.

В заключение автор благодарит Гальперина Ю.М., Кагана Ю.М., Клингера М.И., Максимова Л.А., Манжелия В.Г. за интерес к работе и ценные замечания.

---

1. Hunklinger S., Raychaudhari A.K. Progress in Low Temp. Phys., 1982, 9, 267.
2. Anderson P.W., Halperin B.I., Varma C. Phil. Mag., 1972, 25, 1.
3. Phillips W.A. J. Low Temp. Phys., 1972, 7, 351.
4. De Yoreo J.J., Knaak W., Meissner M., Pohl. R.O. Phys. Rev. B, 1986, 34, 8888.
5. Бурин А.Л., Максимов Л.А., Полищук И.Я. Письма в ЖЭТФ, 1989, 49, 680.
6. Yu C.C., Leggett A. Comm. Cond. Matter Phys., 1989, 14, 231.