Письма в ЖЭТФ, том 56, вып.10, стр.508 - 510 25 ноября 1992 г.

О ПОГЛОЩЕНИИ СВЕТА СТЕКЛАМИ В ДАЛЬНЕЙ ИК ОБЛАСТИ СПЕКТРА

Л.И.Дейч

Институт физики Сибирского отделения РАН,
660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 1 октября 1992 г.

Предложено объяснение отклонения формы кривой поглощения стекол в дальней ИК области от дебаевской.

В настоящее время общепринято, что основные особенности динамики стекол в области терагерцевых частот связаны с наличием квазилокальных колебаний (КК) [1]. С плотностью состояний КК связывают и появление максимума на кривой поглощения, представленной в виде $\Gamma(\omega)/\omega^2$ (Γ – коэффициент поглощения, ω – частота), в дальнем ИК диапазоне [2]. Однако данные по неупругому рассеянию нейтронов в α-SiO_2 [3] показывают, что симметрия КК в этом материале не позволяет им быть активными в ИК поглощении [2]. В данной статье анализируется влияние КК на ИК спектры в такой ситуации.

В основе нашего рассмотрения лежит учет взаимодействия КК с фононами, а также ближнего и среднего порядка в пространственном распределении параметра фотон-фононной связи. Единственное отличие в выражении для поглощения по сравнению с дебаевской моделью в данном случае заключается в необходимости учета перенормировки фононной функции Грина. Если предположить, что основной вклад в поглощение вносят фононы какой-то одной из поляризаций, то можно записать для поглощения $\Gamma(\epsilon)$:

$$\Gamma(\epsilon) \propto \sqrt{\epsilon}\int c(k)\mathrm{Im}G(\epsilon,k)d^3k, \tag{1}$$

где $\epsilon=\omega^2$. Эффективный параметр фотон-фононной связи $c(k)$ пропорционален спектральной плотности $S(k)$ неоднородностей реального параметра взаимодействия. Коэффициент пропорциональности зависит от модели этого взаимодействия и равен либо const [4], либо k^2 [5,6].

Трактуя КК, как в [7], в терминах резонансного рассеяния фононов на случайном псевдопотенциале, перенормированную функцию Грина фононов запишем в виде $G(k)=(\epsilon-s^2k^2-\Sigma(\epsilon))^{-1}$, где s – скорость звука, а массовый оператор Σ учитывает влияние КК. Мы пренебрежем его действительной частью, а мнимую запишем в виде: $\mathrm{Im}\Sigma=\epsilon\xi(\epsilon)$, где ξ следуя [7] будем считать равной $\xi=p\xi^{5/2}$.

Для того чтобы получить общее представление о поведении интеграла (1) удобно рассмотреть сначала его асимптотики для специального случая функции $c_0(k)$, которая ведет себя как k^2 при $k\ll k_c$ и убывает быстрее чем k^{-2} при $k\gg k_c$ (k_c характеризует масштаб неоднородностей $r_c\approx k_c^{-1}$). В этом случае нетрудно получить:

$$\frac{A(\epsilon)}{\epsilon}=\begin{cases} c_0(k)+a_0\sqrt{\epsilon}\xi & \epsilon\ll\epsilon_c=s^2k_c^2, \quad \xi\ll 1\\ c_0(k)+a_\infty\xi\epsilon^{-3/2} & \epsilon\gg\epsilon_c, \quad \xi\ll 1\\ a_\infty\xi^{-1}\epsilon^{-3/2} & \epsilon\gg\epsilon_c, \quad \xi\gg 1\end{cases}, \tag{2}$$

где мы предположили, что ϵ_c лежит в области слабого рассеяния $\xi \ll 1$. Теперь мы можем получить аналогичные выражения для двух других типов функций $c(k)$: $c_1(k)$, которая $\propto$const при $k \ll k_c$ и убывает быстрее чем k^{-2} при $k \gg k_c$ и $c_2(k)$, которая $\propto k^2$ при малых k и $\propto$ const при $k \gg k_c$:

$$\frac{A(\epsilon)}{\epsilon} = c_{1(2)}(k) + \left\{ \begin{array}{ll} \mp a_0^{1(2)}\sqrt{\epsilon}\xi & \epsilon \ll \epsilon_c \\ \pm a_\infty^{1(2)}\xi\epsilon^{-3/2} & \epsilon \gg \epsilon_c \end{array} \right\} \xi \ll 1, \qquad (3)$$

где верхние знаки относятся к $c_1(k)$, а нижние – к $c_2(k)$. В качестве нетривиального факта следует отметить, что КК в рассматриваемой ситуации могут давать отрицательный вклад в поглощение. В области сильного рассеяния асимптотика кривой поглощения для функций типа c_2 имеет вид

$$\frac{\Gamma(\epsilon)}{\epsilon} \approx (1+\xi^2)^{1/4}\cos(1/2\mathrm{arctg}\xi), \qquad (4)$$

а в случае функций c_1 поглощение в этом предельном случае ведет себя также как и для c_0.

Полученные результаты позволяют провести более детальное исследование кривой поглощения. Для этого удобно выбрать функцию $c(k)$ в виде

$$c_{SHL}(k) = (1-z^{-3})^{-1}[zS_0(k/z) - z^{-3}S_0(k)], \qquad (5)$$

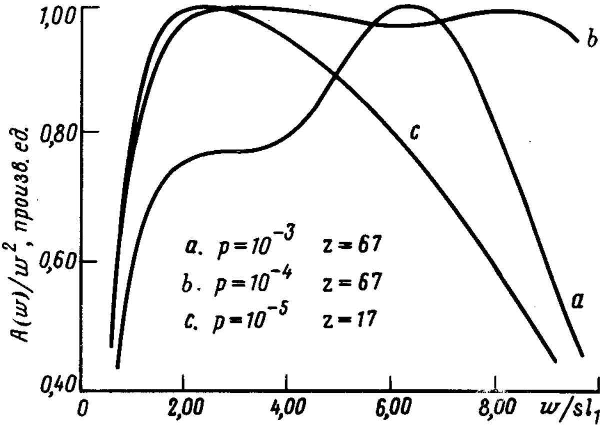
где S_0 считается функцией типа c_1. Эта функция характеризуется двумя корреляционными радиусами r_1 и r_2, $z = r_1/r_2 \geq 1$ и может рассматриваться как обобщение функции Шлеманна, которую он использовал для описания экспериментальных результатов в модели заряженных дефектов [4]. Последняя получается из (5) в пределе $r_2 \Rightarrow 0$. Использование этой функции удобно тем, что в зависимости от величины параметра z можно получить различные виды кривых поглощения, характерные для каждой из введенных выше функций c. Кроме того, учет $r_2 \neq 0$ означает учет ближнего порядка, что является вполне естественным с физической точки зрения и оказывается чрезвычайно важным для рассматриваемой проблемы.

Используя формулы (2) – (4) можно получить любую асимптотику кривой поглощения для функции c_{SHL}, однако наибольший интерес представляет промежуточная асимптотика $sr_1^{-1} \ll \omega \ll sr_2^{-1}$ $(\xi \ll 1)$, которая имеет вид

$$\frac{A(\epsilon)}{\epsilon} \propto c_{SHL}(k) - \xi(a_\infty\epsilon^{-3/2} + z^{-1}a_0\sqrt{\epsilon}). \qquad (6)$$

Видно, что учет ближнего порядка привел к появлению в (6) отрицательного вклада, быстро растущего с частотой. При определенных условиях этот член может привести к появлению максимума на кривой $A(\epsilon)/\epsilon$.

Для получения численных оценок мы вычислили кривую поглощения с использованием функции $c_{SHL}(k)$, где S_0 была выбрана в виде соответствующем экспоненциальной корреляционной функции. На рисунке изображена зависимость функции $A(\epsilon)/\epsilon^2$ от нормированной частоты ω/sr_1^{-1}. В зависимости от параметра z мы нашли два типа кривых поглощения. При $z \leq 20\, A(\epsilon)/\epsilon^2$ имеет один максимум, лежащий в области слабого рассеяния $\xi \ll 1$ (кривая c). Его положение определяется главным образом корреляционным радиусом r_1. При увеличении параметра p и уменьшении z этот максимум становится все более резким. При $z \geq 20$ могут появиться два максимума: один по-прежнему



Различные виды кривых поглощения $\Gamma(\epsilon)/\epsilon$ для функции $c_{SHL}(k)$

в области слабого рассеяния, а второй при $\xi \gg 1$ (кривая b). Форма кривой в окрестности первого максимума может быть описана выражением (6), а его положение определяется как обоими корреляционными радиусами, так и параметром p. При увеличении p и z он становится более пологим пока не исчезает совсем (кривая a). Положение второго максимума определяется выражением $\omega_m \cong s r_2^{-1} \xi^{-1}(\omega_m)$, с увеличением p он сдвигается в сторону более низких частот, становясь при этом более ярко выраженным.

В качестве иллюстрации мы оценили величины $r_{1(2)}$ и $\xi(\omega_m)$ для кривой b используя экспериментальные данные [2] и наши результаты. Для корреляционных радиусов мы получили вполне приемлимые цифры 100 и 1,4Å для среднего и ближнего порядка, соответственно. Параметр $\xi(\omega_m)$ оказался примерно 0,025, в то время как оценка этой же величины по результатам измерения теплопроводности [8] дала примерно 0,006.

Таким образом, предложенная в данной работе теория поглощения дальнего ИК излучения аморфным SiO_2 приводит к разумным оценкам основных параметров и позволяет объяснить как КК влияют на кривую поглощения в ситуации, когда они не взаимодействуют со светом непосредственно и их плотность состояний не дает прямого вклада в поглощение. Отметим также, что качественно наши результаты не изменятся при выборе другой достаточно быстро возрастающей функции $\xi(\epsilon)$.

---

1. Yu.M.Galperin, V.G.Karpov, and V.I.Kozub, Adv. Phys. **38**, 669 (1989).
2. L.Ghivelder and W.A.Phillips, J. Non. Cryst. Sol. **109**, 280 (1989).
3. U.Buchenau, M.Prager et al. Phys. Rev. **B34**, 5665 (1986).
4. E.Schlömann, Phys. Rev. **A135**, 413 (1964).
5. E.Whalley, J. of The Chem. Soc. Faraday Transactions II **68**, 662 (1972); D.D.Klug and E.Whalley, Physica A **156**, 376 (1989).
6. L.I.Deich and V.A.Ignatchenko, Waves in Random Media **1**, 133 (1991).
7. Ю.М.Гальперин, В.Г.Карпов, В.Н.Соловьев, ЖЭТФ, **94**, 373 (1988).
8. J.E.Graebner, B.Golding, and L.C.Allen, Phys. Rev. **B34**, 5696 (1986).