

## ОБОЗРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

## Кинетические явления в металлах с квантовыми дефектами

А.И. Морозов, А.С. Сигов

*Изучено взаимодействие квантовых дефектов (дефектонов) с электронами проводимости и проведен последовательный учет инфракрасных перенормировок, вызванных этим взаимодействием и существенно влияющих на ширину зоны дефектонов и их вклад в физические свойства металла. Рассмотрено взаимодействие дефектонов друг с другом и другими дефектами кристаллической решетки металла и исследованы обусловленные этим взаимодействием процессы кластеризации квантовых дефектов. Найдены температурные зависимости кинетических коэффициентов металла, содержащего как свободные дефектоны, так и двухуровневые системы, которые возникают в ряде случаев при захвате квантового дефекта тяжелой неподвижной примесью.*

PACS numbers: 72.15. Eb, 74.70, 75.15. C, 78.70. Er

## Содержание

1. Введение (243).
  2. Инфракрасные перенормировки (244).
    - 2.1. Инфракрасные перенормировки в идеальном кристалле.
    - 2.2. Инфракрасные перенормировки в случае локализованных дефектонных состояний.
    - 2.3. Инфракрасные перенормировки в случае двухуровневой системы.
  3. Кластеризация подвижных дефектов в металлах (251).
    - 3.1. Дальнедействующая часть дефектон-дефектонного взаимодействия и наличие связанных состояний.
    - 3.2. Кластеризация дефектов.
  4. Кинетические коэффициенты металлов с квантовыми дефектами (254).
    - 4.1. Металл со свободными дефектонами.
    - 4.2. Металл с локализованными дефектонными состояниями.
    - 4.3. Металл, содержащий двухуровневые системы.
  5. Заключение (259).
    - 5.1. Выводы.
    - 5.2. Предложения.
- Список литературы (260).

## 1. Введение

Хорошо известно, что многие физические свойства металлов при низких температурах (например, кинетические явления) определяются видом и концентрацией примесей, имеющихся в образце. Примеси внедрения могут переходить из первоначально занимаемого междоузлия в соседнее, вообще говоря, как надбарьерным, так и туннельным путем. Поскольку вероятность тунне-

лирования экспоненциально падает с увеличением массы примеси, то для тяжелых примесей она пренебрежимо мала, и этот переход происходит активационным образом с энергией активации порядка 0,1—10 эВ. В области низких температур вероятность такого перескока за характерное время измерения становится исчезающе малой. Поэтому такие точечные дефекты при теоретическом расчете характеристик металла предполагают "замороженными" в определенных положениях. В этом случае они, по сути, создают статическое поле, действующее на электроны. Соответствующая "крестовая" техника расчета времени примесного рассеяния широко известна (см., например, [1]). Заметим, что такая система дефектов является существенно неравновесной.

Однако ряд легких примесей внедрения (изотопы водорода, гелий) сохраняет свою подвижность и при низких температурах, туннелируя из одного эквивалентного междоузлия в другое. Такие квантовые дефекты мы в дальнейшем будем называть дефектонами. Их, в отличие от "замороженных" дефектов, следует рассматривать как внутренние степени свободы кристалла, которые могут прийти в равновесие за время эксперимента.

Вследствие указанного различия в поведении дефектов взаимодействие электронов с дефектонами существенно отличается от взаимодействия с "замороженными" тяжелыми дефектами. Оно ведет к возникновению инфракрасных (ИК) расходимостей при вычислении перенормированных параметров дефектонной подсистемы, на что первым обратил внимание Кондо [2]. Для вычисления этих перенормировок нельзя ограничиться первыми порядками теории возмущений. Последовательный их учет в рамках паркетного приближения приводит к нетривиальной температурной зависимости времени  $\tau_{e,d}$  релаксации электронной подсистемы, обусловленной электрон-дефектонным взаимодействием:  $\tau_{e,d} \propto T^{-g}$ , где  $T$  — температура, а  $g \sim 2N^2(0)V_0^2 N(0)$  — плотность электронных состояний на поверхности Ферми (ПФ), а  $V_0$  — затравочная амплитуда рассеяния

А.И. Морозов, А.С. Сигов. Московский институт радиотехники, электроники и автоматики, 117454, Москва, просп. Вернадского, 78  
Тел. (095) 434-76-65; (095) 434-93-47  
Факс (095) 434-86-65

Статья поступила 10 ноября 1993 г.

электрона на дефектоне). Характерная величина  $g \sim 0,1 - 1$  и меняется от металла к металлу.

Такая температурная зависимость  $\tau_{e,d}$ , связанная с эволюцией электронного облака вокруг дефектона, и порождает нетривиальные температурные зависимости кинетических коэффициентов металла, содержащего квантовые дефекты в том температурном диапазоне, где рассеяние на дефектонах является основным механизмом релаксации электронной подсистемы.

Наиболее перспективными объектами для обнаружения таких зависимостей являются разбавленные гидриды переходных металлов. Но экспериментальному наблюдению названных зависимостей препятствует возникающая при понижении температуры кластеризация дефектонов, вызванная их взаимодействием друг с другом или с тяжелыми неподвижными примесями. Однако в ряде случаев при захвате дефектона такой тяжелой примесью возникает двухуровневая система, и дефектон частично сохраняет свою подвижность и ниже температуры кластеризации. При этом также возможно наблюдение нетривиальных температурных зависимостей.

Обзор делится на три части. В первой из них (раздел 2) рассматриваются ИК перенормировки параметров дефектонной подсистемы и потенциала электрон-дефектонного взаимодействия.

Во второй части (раздел 3) изучено явление кластеризации подвижных дефектов.

Третья часть (раздел 4) посвящена исследованию аномалий кинетических коэффициентов металлов с квантовыми дефектами.

В заключении приведены выводы и предложения авторов.

## 2. Инфракрасные перенормировки

### 2.1. Инфракрасные перенормировки в идеальном кристалле

Основополагающие проблемы квантовой диффузии были рассмотрены в пионерской работе А.Ф. Андреева и И.М. Лифшица [3], опубликованной в 1969 г. Авторы [3] обратили, в частности, внимание на то обстоятельство, что квантовый дефект в идеальном кристалле в области низких температур полностью делокализован и описывается блоховской волновой функцией. Подобное описание справедливо для той области температур, где длина свободного пробега дефектонов  $l_d$  намного превосходит межатомное расстояние  $d$ . В противном случае квазиимпульс становится "плохим" квантовым числом, и более приемлемым является координатное представление.

Рассмотрим квантовый дефект в идеальном периодическом потенциале кристаллической решетки. Междоузлие представляет собой потенциальную яму для дефектона. Как правило, в яме существует несколько локальных колебательных уровней для квантового дефекта. Вследствие туннелирования каждый такой уровень порождает узкую дефектонную зону. Вследствие малой массы квантового дефекта первый возбужденный уровень отделен от основного энергией порядка 0,1 эВ [4], поэтому можно пренебречь влиянием вышележащих уровней при изучении процессов рассеяния при низких температурах. В дальнейшем под словами "дефектонная зона" будем подразумевать зону, возникшую из основного колебательного уровня.

В ОЦК, ГЦК и ГПУ металлах на один атом матрицы приходится несколько тетраэдрических, а в ОЦК металлах — и несколько октаэдрических междоузлий. Поэтому соответствующий локальный уровень энергии порождает несколько дефектонных зон [5]. Однако учет нескольких законов дисперсии дефектонов, отделенных друг от друга энергией порядка (или меньше) ширины дефектонной зоны сильно усложняет вычисления, не изменяя физической картины явления. Поэтому мы в дальнейшем будем рассматривать одну невырожденную дефектонную зону.

Таким образом, гамильтониан свободных дефектонов имеет вид

$$\mathcal{H}_d = \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) c^+(\mathbf{k}) c(\mathbf{k}), \quad (2.1)$$

где  $\omega(\mathbf{k})$  — закон дисперсии, а  $c^+(\mathbf{k})$ ,  $c(\mathbf{k})$  — операторы рождения и уничтожения дефектонов. Суммирование по  $\mathbf{k}$  происходит по первой зоне Бриллюэна.

Дефектоны взаимодействуют с фононами, электронами, друг с другом и другими дефектами кристаллической решетки. Рассмотрим вначале ИК перенормировки в идеальном кристалле с предельно низкой концентрацией квантовых дефектов, когда их взаимодействием друг с другом и другими дефектами можно пренебречь.

Взаимодействие дефектонов с фононами приводит к затуханию дефектонов и к полярному эффекту — сужению дефектонной зоны вследствие деформации кристаллической решетки вокруг дефекта. Новая ширина дефектонной зоны  $\varepsilon_0$  равна [6]

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{00} e^{-S(T)}, \quad (2.2)$$

где  $\varepsilon_{00}$  — ширина зоны дефектона в отсутствие деформаций, а  $S$  по порядку величины равно  $S \sim u_0^2/w_0^2$ , где  $u_0$  — величина смещения ближайших к дефекту атомов матрицы, а  $w_0$  — амплитуда нулевых колебаний решетки кристалла. При температурах  $T$ , много меньших температуры Дебая  $\theta$ , величина  $S(T)$  выходит на постоянное значение. В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением именно этой области температур, так как при  $T \geq \theta$  фоннный вклад в релаксацию электронной подсистемы превосходит соответствующий вклад квантовых дефектов. Поэтому можно считать, что  $\varepsilon_0 = \text{const}$  при  $T \ll \theta$ , а  $\omega(\mathbf{k})$  в (1.1) — закон дисперсии дефектонов с учетом дефектон-фоннного взаимодействия.

В нормальных металлах при  $T \ll \theta$  основной вклад в затухание дефектонов вносит их рассеяние на электронах проводимости [7], а фоннный вклад в релаксацию дефектонной подсистемы, рассмотренный в работе [3], может стать существенным только в сверхпроводнике при  $T \ll T_c$  ( $T_c$  — температура сверхпроводящего перехода), когда число электронных возбуждений экспоненциально мало.

Перейдем к рассмотрению электрон-дефектонного взаимодействия. Исследуем область низких температур, когда квантовые дефекты в металле делокализованы и описываются блоховскими волновыми функциями.

Гамильтонианы электронов проводимости  $\mathcal{H}_e$  и электрон-дефектонного взаимодействия  $\mathcal{H}_{e-d}$  имеют вид

$$\mathcal{H}_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a^+(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}), \quad (2.3)$$

$$\mathcal{H}_{e-d} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_0(\mathbf{q}) a^+(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) c^+(\mathbf{k} + \mathbf{q}) c(\mathbf{k}) a(\mathbf{k}'), \quad (2.4)$$

$\varepsilon(\mathbf{k})$  — закон дисперсии,  $a^+(\mathbf{k})$ ,  $a(\mathbf{k})$  — операторы вторичного квантования электронов проводимости,  $V_0(\mathbf{q})$  — затравочная амплитуда рассеяния электрона на дефектоне.

Полный гамильтониан рассматриваемой системы является суммой  $\mathcal{H}_d$ ,  $\mathcal{H}_e$  и  $\mathcal{H}_{e-d}$ .

Исследование электрон-дефектонного взаимодействия будет проводиться на основе температурной диаграммной техники [1]. При этом мы предполагаем, что дефектоны подчиняются статистике Ферми. Это предположение несущественно, поскольку в дальнейшем, как правило, мы будем изучать невырожденный газ дефектонов, а бoльцмановский предел для обеих статистик одинаков.

Нулевые функции Грина электронов и дефектонов, изображаемые в дальнейшем тонкими сплошной и штриховой линиями, равны, соответственно:

$$G_0(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = (i\varepsilon_k - \varepsilon(\mathbf{k}) + \mu)^{-1}, \quad (2.5)$$

$$\Psi_0(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = (i\varepsilon_k - \omega(\mathbf{k}) + \zeta)^{-1}, \quad (2.6)$$

где  $\varepsilon_k = \pi T(2k + 1)$  — мацубаровская частота, а  $\mu$  и  $\zeta$  — химические потенциалы электронов и дефектонов. Взаимодействие  $V_0(\mathbf{q})$  будем изображать волнистой линией.

Рассмотрим сначала дефектонную собственно-энергетическую часть  $\chi(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$ , считая, что обратным воздействием дефектонной подсистемы на электронную можно пренебречь вследствие малой концентрации дефектонов.

График, изображенный на рис. 1, *a*, дает лишь перенормировку  $\zeta$ , в то время как график на рис. 1, *b*, наряду с перенормировкой  $\zeta$ , дает вклад и в затухание дефектонов [7]. Вклад этого графика в  $\chi(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  равен

$$\chi_1(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = -2T^2 \sum_{\varepsilon_m, \omega_n} \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{k}'}{(2\pi)^6} |V_0(\mathbf{q})|^2 G_0(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \varepsilon_m - \omega_n) \times \\ \times G_0(\mathbf{k}', \varepsilon_m) \Psi_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \varepsilon_k - \omega_n). \quad (2.7)$$

После суммирования по частотам находим

$$\chi_1(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = 2 \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{k}'}{(2\pi)^6} |V_0(\mathbf{q})|^2 \times \\ \times \frac{n(\mathbf{k}' - \mathbf{q})(1 - n(\mathbf{k}'))}{i\varepsilon_k - \varepsilon(\mathbf{k}') + \varepsilon(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) - \omega(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + \zeta}, \quad (2.8)$$

где

$$n(\mathbf{k}) = [1 + \exp((\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)T^{-1})]^{-1} \quad (2.9)$$

— фермиевская функция распределения электронов.

Мнимая часть  $\chi_1$  может быть найдена путем аналитического продолжения  $\chi_1(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  из точек  $\varepsilon = i\varepsilon_k$  на действительную ось и интегрирования вблизи полюса. При  $T \gg \varepsilon_0$ , когда значением  $\omega(\mathbf{k})$  можно пренебречь по сравнению с характерными значениями  $|\varepsilon(\mathbf{k}') - \varepsilon(\mathbf{k}' - \mathbf{q})| \sim T$ ,

$$\text{Im } \chi_1 = -\pi g T, \quad (2.10)$$

где

$$g = 2 \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}'}{(2\pi)^6} |V_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2, \quad (2.11)$$

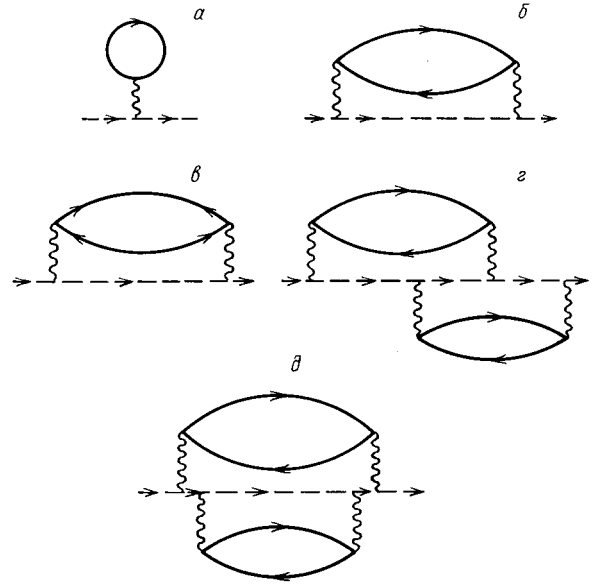


Рис. 1. Графики для собственно энергетической части дефектонной функции Грина  $\chi(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$

интегрирование по  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  происходит по поверхности Ферми (ПФ).

В случае  $T \ll \varepsilon_0$  по порядку величины  $\text{Im } \chi_1 = -\pi g T^2 / \varepsilon_0$ , так как электрон может изменить свой квазиимпульс только на величину  $\tilde{k} \sim k_B(T/\varepsilon_0)^{1/2}$  квазиимпульса дефектона с тепловой энергией  $T$  ( $k_B$  — бриллюэновский квазиимпульс). Это ведет к уменьшению фазового объема конечных состояний для электрона и более быстрому падению  $\text{Im } \chi_1$  с температурой.

В сверхпроводнике число электронных возбуждений быстро убывает с понижением температуры. При  $T \ll T_c$ , где  $T_c$  — температура сверхпроводящего перехода, оно экспоненциально мало. Для вычисления  $\chi_1(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  в сверхпроводнике необходимо наряду с петлями, содержащие нормальными функциями Грина электронов  $G_0(\mathbf{k}, \varepsilon_m)$  (рис. 1, *b*), учесть петли, содержащие аномальные функции Грина электронов  $F(\mathbf{k}, \varepsilon_m)$  и  $F^+(\mathbf{k}, \varepsilon_m)$ . В отсутствие электромагнитного поля функции Грина электронов в сверхпроводнике имеют вид

$$F(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = F^+(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = \frac{\Delta}{\varepsilon_k^2 + (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2}, \quad (2.12)$$

$$G_0(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = -\frac{i\varepsilon_k + \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{\varepsilon_k^2 + (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2}, \quad (2.13)$$

где  $\Delta$  — щель в спектре электронных возбуждений [1]. Вклад аномальных функций Грина в  $\chi_1(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  изображен на рис. 1, *c*, а сплошные тонкие линии с двумя входящими и двумя выходящими стрелками соответствуют аномальным функциям Грина  $F(\mathbf{k}, \varepsilon_m)$  и  $F^+(\mathbf{k}, \varepsilon_m)$ .

Величина  $\chi_1(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  для сверхпроводника равна [8, 9]

$$\chi_1^s(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = 2 \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^6} |V_0(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)|^2 \int_{\Delta}^{E_0} d\varepsilon_1 \times \\ \times \int_{\Delta}^{E_0} d\varepsilon_2 v(\varepsilon_1) v(\varepsilon_2) \left[ \frac{n(\varepsilon_1)(1 - n(\varepsilon_2))(\varepsilon_1 \varepsilon_2 - \Delta^2)}{i\varepsilon_k - \omega(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + \varepsilon_1 - \varepsilon_2} + \right.$$

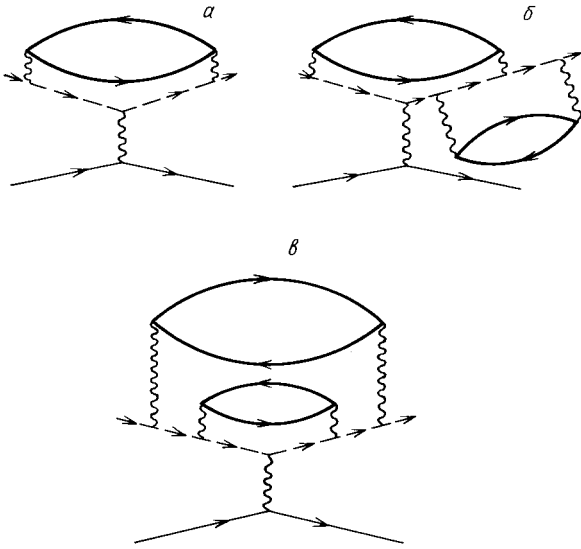


Рис. 2. Графики для вершины электрон-дефектного взаимодействия  $V(\mathbf{q})$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{n(\varepsilon_2)(1-n(\varepsilon_1))(\varepsilon_1\varepsilon_2 - \Delta^2)}{i\varepsilon_k - \omega(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - \varepsilon_1 + \varepsilon_2} + \\
 & + \frac{n(\varepsilon_1)n(\varepsilon_2)(\varepsilon_1\varepsilon_2 + \Delta^2)}{i\varepsilon_k - \omega(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + \varepsilon_1 + \varepsilon_2} + \\
 & + \left. \frac{(1-n(\varepsilon_1))(1-n(\varepsilon_2))(\varepsilon_1\varepsilon_2 + \Delta^2)}{i\varepsilon_k - \omega(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - \varepsilon_1 - \varepsilon_2} \right], \quad (2.14)
 \end{aligned}$$

где  $v(\varepsilon) = (\varepsilon^2 - \Delta^2)^{-1/2}$ , а  $E_0$  — полуширина электронной зоны.

Находя из (2.14) мнимую часть  $\chi_1^s(\mathbf{k}, \varepsilon)$ , получаем

$$\text{Im} \chi_1^s(T) = -2\pi g T [1 + \exp(\Delta(T)T^{-1})]^{-1}. \quad (2.15)$$

При этом мы продолжаем считать, что  $\max(T, \Delta) \gg \varepsilon_0$ . Рассмотрим действительную часть  $\chi(\mathbf{k}, \varepsilon)$ . Интегрирование в (2.8) и (2.14) по области значений  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2$ , далеких от ПФ, наряду с перенормировкой  $\zeta$  дает, как было показано в работе Кондо [2], еще и зависящую от  $\mathbf{k}$  и  $\varepsilon$  действительную часть  $\chi_1(\mathbf{k}, \varepsilon)$ , вид которой во многом определяется законом дисперсии дефектонов. Здесь  $\chi_1(\mathbf{k}, \varepsilon)$  — результат аналитического продолжения функции  $\chi_1(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  из точек  $\varepsilon = i\varepsilon_k$  на действительную ось.

В случае  $T \gg \varepsilon_0$  ответ легко получить, разлагая знаменатель (2.8) по степеням  $\varepsilon$  и  $(\omega(\mathbf{k}) - \zeta)$ . С логарифмической точностью, т.е. учитывая только старшие по  $\ln(E_0/T)$  члены, имеем

$$\text{Re} \chi_1(\mathbf{k}, \varepsilon) = \delta\zeta - [g(\varepsilon + \zeta) - I_1] \ln(E_0 T^{-1}), \quad (2.16)$$

где  $\delta\zeta$  — перенормировка химпотенциала, а

$$I_1 = 2 \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 |V_0(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)|^2}{(2\pi)^6 |\nabla\varepsilon(\mathbf{k}_1)| \cdot |\nabla\varepsilon(\mathbf{k}_2)|} \omega(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \quad (2.17)$$

интегрирование по  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2$  происходит по поверхности Ферми.

В случае квадратичного закона дисперсии  $\omega(\mathbf{k})$  интеграл  $I_1 = g\omega(\mathbf{k})$ , а для случая сильной связи [2]  $I_1 = m\omega(\mathbf{k})$ , где величина  $m$  равна [2, 10]

$$m = 2 \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}' |V_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \cos[(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{a}]}{(2\pi)^6 |\nabla\varepsilon(\mathbf{k})| \cdot |\nabla\varepsilon(\mathbf{k}')|}, \quad (2.18)$$

$\mathbf{a}$  — радиус-вектор, соединяющий два ближайших междоузлия данного типа. Более тщательный расчет в случае произвольного соотношения между  $\varepsilon_0$  и  $T$  дает вместо  $\ln(E_0/T)$  в (2.16)  $\ln[E_0/\max(T, \varepsilon_0)]$  в случае нормального металла и  $\ln[E_0/\max(T, \varepsilon_0, \Delta)]$  в случае сверхпроводника. В сверхпроводнике логарифмическая расходимость связана с последним членом в фигурных скобках в (2.14). Аналогичные логарифмические члены возникают и при вычислении поправок к  $V_0(\mathbf{q})$ .

Вообще говоря, под логарифмом стоит не  $\varepsilon_0$ , а  $\varepsilon_0(k_F/k_B)^2$ , где  $k_F$  — фермиевский импульс, но в металлах  $k_F \sim k_B$ , и мы будем опускать фактор  $(k_F/k_B)^2$ .

Если рассеяние электрона на дефектоне сопровождается переходом последнего на следующий колебательный уровень, то логарифмическая расходимость в (2.16) обрезается не на  $\max(T, \varepsilon_0)$ , а на разности энергий колебательных уровней  $\hbar\omega_0$ . Поскольку в области температур  $\ln(E_0/\hbar\omega_0) \ll \ln[E_0/\max(T, \varepsilon_0)]$   $T \ll \theta$ , мы не будем учитывать вклад в  $\text{Re} \chi(\mathbf{k}, \varepsilon)$ , связанный с переходами между колебательными уровнями энергии дефектона.

ИК расходимость в  $\chi(\mathbf{k}, \varepsilon)$  связана с наличием резкого края ферми-заполнения для электронов, т.е. с существованием электронно-дырочных пар с малой энергией, и обрезается на величине размытия этого края  $T$  или на величине  $\varepsilon_0$ . В сверхпроводнике энергия электронно-дырочных пар, а следовательно, и логарифмическая расходимость ограничена снизу значением  $2\Delta$ .

Сильная перенормировка функции Грина дефектонов есть следствие электронного поляронного эффекта: наличие электронного облака вокруг дефектона существенно изменяет его характеристики.

Представляется целесообразным суммирование всех наиболее расходящихся членов ряда теории возмущений для выхода за рамки ограничения  $g \ln[E_0/\max(T, \varepsilon_0)] \ll 1$ . Попытка такого суммирования была предпринята в работах [11, 2]. Однако проведенное в этих работах рассмотрение содержит ряд серьезных недостатков. Хорошо известно, что наибольшую степень расходимости логарифма содержат паркетные графики. Первые паркетные графики, дающие главный вклад в  $\chi(\mathbf{k}, \varepsilon)$  и перенормировку  $V_0(\mathbf{q})$  в нормальном металле, приведены на рис. 1, б, з, д и рис. 2, соответственно.

При вычислении полной амплитуды рассеяния электрона на дефектоне  $V(\mathbf{q})$  в работе [11], на основе которой строится изложение и в последующих работах, предполагалось, что основной вклад в перенормировку  $V_0(\mathbf{q})$  дают графики, в которых все электронные петли расположены так, что они охватывают затравочную вершину. При этом учитывались непаркетные графики типа, изображенного на рис. 3, но не учитывались паркетные графики типа, изображенного на рис. 2, б [9].

Последовательный учет паркетных графиков в аналогичной по технике задаче расчета аномалий поглощения и испускания рентгеновских лучей в металлах был проведен в работах [12—14]. Как было показано в этих работах, логарифмически расходящиеся поправки порядка  $g^{1/2} \ln[E_0/\max(T, \varepsilon_0)]$  к  $V_0(\mathbf{q})$ , возникающие из-за графиков, изображенных на рис. 4, компенсируют друг друга. Причем эта компенсация происходит во всех

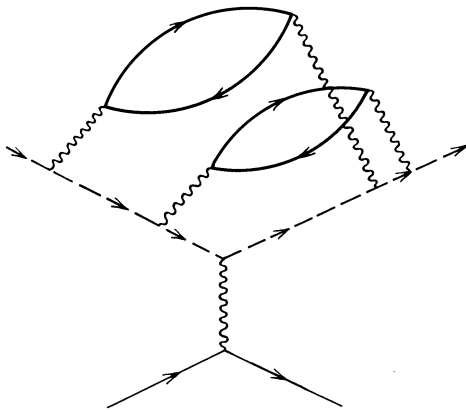


Рис. 3. Непаркетный график для вершины электрон-дефектного взаимодействия  $V(\mathbf{q})$

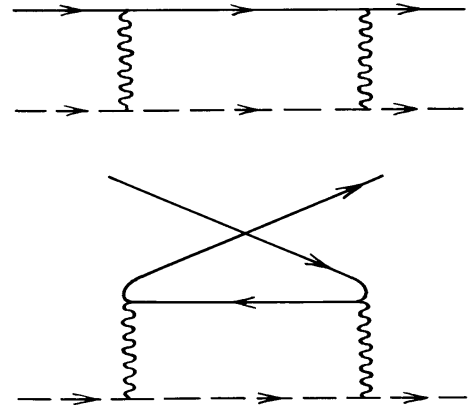


Рис. 4. Графики, приводящие к логарифмически расходящимся поправкам порядка  $g^{1/2} \ln[E_0/\max(\varepsilon_0, T)]$  к вершине  $V_0(\mathbf{q})$

порядках теории возмущений. Поэтому первые неисчезающие члены, содержащие большой логарифм, имеют порядок  $g \ln [E_0/\max(T, \varepsilon_0)]$ .

В результате суммирования паркетных диаграмм, проведенного аналогично [12—14], получаются следующие выражения для перенормированной функции Грина дефектонов  $\Psi(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  и полной вершины электрон-дефектонного взаимодействия  $V(\mathbf{q})$ :

$$\Psi(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = (i \varepsilon_k - \tilde{\omega}(\mathbf{k}) + \zeta)^{-1} \left[ \frac{\max(T, \varepsilon_0)}{E_0} \right]^g, \quad (2.19)$$

где  $\tilde{\omega}(\mathbf{k})$  — перенормированный закон дисперсии дефектонов,

$$V(\mathbf{q}) = V_0(\mathbf{q}) \left[ \frac{E_0}{\max(T, \varepsilon_0)} \right]^g. \quad (2.20)$$

Графики для собственно-энергетической части дефектонной функции Грина  $\chi(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  и  $V(\mathbf{q})$  приведены на рис. 5, 6, соответственно. Двойная штриховая линия соответствует  $\Psi(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$ , а волнистая линия с заштрихованным треугольником на конце —  $V(\mathbf{q})$ .

При проведении вычислений следует учитывать, что расходимость обрезается на  $\max(T, \varepsilon_0, \eta)$ , где  $\eta$  — наибольшая из частот, входящих в вершину функций Грина, отсчитанная от уровня соответствующего химпотенциала. В дальнейшем нас будут интересовать значения функций Грина вблизи массовых поверхностей, когда  $\eta \sim T$ .

Несмотря на то, что в работах [2, 11], как уже отмечалось, суммировались не все паркетные графики, в них был приведен правильный окончательный результат.

В работах [12—14] рассмотрение проводилось для бездисперсной дырки (электрона) на глубоком уровне, поэтому перенормировка закона дисперсии не изучалась. Поскольку ширина дефектонной зоны является важнейшим параметром при исследовании поведения квантовой частицы, мы остановимся на вычислении перенормировки закона дисперсии подробнее.

Используя тождество Уорда, можно получить связь между величиной

$$\frac{\partial \chi(\mathbf{k}, \varepsilon_m)}{\partial \mathbf{k}} = \mathbf{v} \frac{\partial \chi(\mathbf{k}, \varepsilon_m)}{\partial \omega(\mathbf{k})}$$

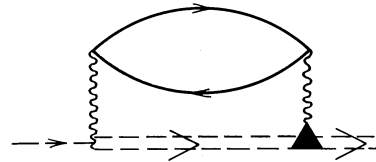


Рис. 5. График для собственно-энергетической части дефектонной функции Грина  $\chi(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$

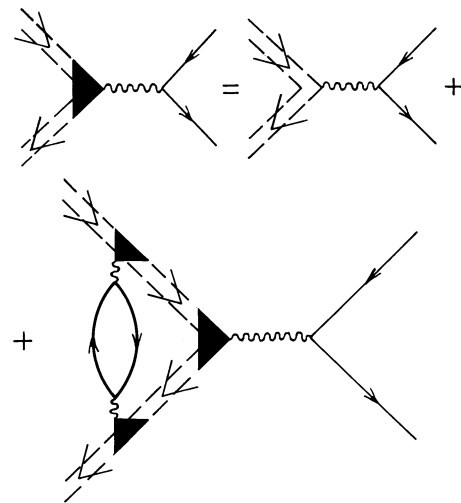


Рис. 6. График для полной вершины электрон-дефектонного взаимодействия

и векторной вершиной  $\Lambda(\mathbf{k}, \varepsilon_m)$ , которая отличается от  $V(\mathbf{q})$  тем, что вместо затравочной вершины в ней стоит скорость дефектона  $\mathbf{v} = \partial \omega(\mathbf{k})/\partial \mathbf{k}$  (см., например, [15])

$$\Lambda(\mathbf{k}, \varepsilon_m) = \mathbf{v} \left( 1 + \frac{\partial \chi(\mathbf{k}, \varepsilon_m)}{\partial \omega(\mathbf{k})} \right). \quad (2.21)$$

Уравнение Бете – Солпитера для величины  $\Lambda(\mathbf{k}, \varepsilon_m)$ , изображенное графически на рис. 7, имеет вид

$$\Lambda(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = \mathbf{v} - 2T^2 \sum_{\varepsilon_m, \varepsilon_n} \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^6} |V_0(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \times \\ \times G_0(\mathbf{p}, \varepsilon_m) G_0(\mathbf{p}', \varepsilon_n) \Psi_0^2(\mathbf{k} - \mathbf{p} + \mathbf{p}', \varepsilon_k - \varepsilon_m + \varepsilon_n) \times \\ \times \Lambda(\mathbf{k} - \mathbf{p} + \mathbf{p}', \varepsilon_k - \varepsilon_m + \varepsilon_n). \quad (2.22)$$

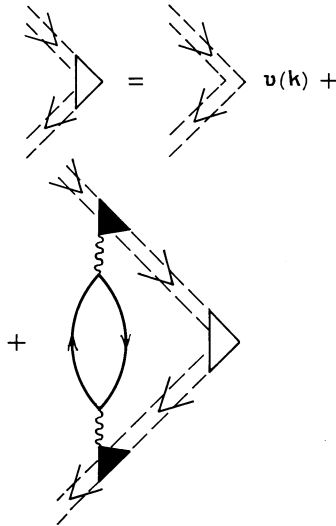


Рис. 7. График для векторной вершины

Здесь мы учли, что перенормировка функций Грина дефектонов компенсирует перенормировку  $V_0(\mathbf{q})$ , а изменением закона дисперсии дефектонов в знаменателе  $\Psi_0(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  в рамках паркетного приближения, как будет показано ниже, можно пренебречь.

Сравним лестничные диаграммы для вершины  $\Lambda(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  с таковыми для  $V(\mathbf{k})$  (они получаются после компенсации перенормировок  $\Psi_0(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  и  $V_0(\mathbf{k})$ ; см. рис. 6).

В случае квадратичного закона дисперсии дефектонов члены ряда для  $\Lambda(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  пропорциональны членам соответствующего ряда для  $V(\mathbf{k})$

$$\frac{\Lambda(\mathbf{k}, \varepsilon_k)}{V(\mathbf{k})} = \frac{\mathbf{v}}{V_0(\mathbf{k})}. \quad (2.23)$$

В итоге получаем, что

$$1 + \frac{\partial \chi(\mathbf{k}, \varepsilon_m)}{\partial \omega(\mathbf{k})} = \left[ \frac{E_0}{\max(T, \varepsilon_0)} \right]^g. \quad (2.24)$$

Таким образом, в случае квадратичного закона дисперсии дефектонов его перенормировка отсутствует и электрон-дефектонное взаимодействие изменяет только учет функции Грина дефектонов [2].

Для случая приближения сильной связи, которое отвечает реальной ситуации, каждое интегрирование по  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$  дает множитель  $m$  в ряде для  $\Lambda(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  и множитель  $g$  — в ряде для  $V(\mathbf{k})$ . Поэтому величина  $\Lambda(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  может быть получена из  $V(\mathbf{k})$  заменой  $V_0(\mathbf{k})$  на  $\mathbf{v}$  и  $g$  на  $m$ :

$$1 + \frac{\partial \chi(\mathbf{k}, \varepsilon_k)}{\partial \omega(\mathbf{k})} = \left[ \frac{E_0}{\max(T, \varepsilon_0)} \right]^m. \quad (2.25)$$

Окончательно, с учетом (2.19) получаем

$$\tilde{\omega}(\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k}) \left[ \frac{\max(T, \varepsilon_0)}{E_0} \right]^\beta, \quad (2.26)$$

где

$$\beta = g - m. \quad (2.27)$$

В работе [2] приведены правильные окончательные выражения для  $\omega(\mathbf{k})$ , но корректный вывод результатов отсутствует.

Таким образом, как и следовало ожидать, поляронный эффект приводит к сужению дефектонной зоны:

$$\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0 \left[ \frac{\max(T, \varepsilon_0)}{E_0} \right]^\beta. \quad (2.28)$$

При  $T = 0$  и в предположении, что все электроны успевают адиабатически подстраиваться под движение квантового дефекта,  $\tilde{\varepsilon}_0$  обращается в нуль. Это и есть так называемая "ортогонализационная катастрофа" Андерсона [16]. Однако электроны с энергией, меньшей  $\tilde{\varepsilon}_0$ , не успевают адиабатически следовать за перемещением дефектона, и поэтому ширина дефектонной зоны остается конечной.

На основании экспериментальных измерений, которые мы обсудим ниже, можно сделать вывод, что значение  $\tilde{\varepsilon}_0$  для водорода в ряде переходных металлов составляет величину порядка 1—10 К. Значение  $\tilde{\varepsilon}_0$  для дейтерия примерно на порядок ниже.

В ряде работ [10, 17, 18] с целью получения самосогласованного решения величина  $\varepsilon_0$  в выражении  $\max(T, \varepsilon_0)$  была заменена на  $\tilde{\varepsilon}_0$ , что отвечает учету перенормировки закона дисперсии в функциях Грина дефектонов при интегрировании в (2.22) и эквивалентно при  $T < \tilde{\varepsilon}_0$  замене  $\beta$  на  $\beta/(1 - \beta)$  в (2.28). Однако эта замена является превышением точности паркетного приближения, применимого в области, где

$$g^{3/2} \ln \{ E_0 [\max(T, \varepsilon_0)]^{-1} \} \ll 1. \quad (2.29)$$

Ю.М. Каган и Н.В. Прокофьев в своей работе [51] получили в рамках адиабатического приближения следующую оценку для перенормированной ширины зоны дефектонов:

$$\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_{\text{ad}} [\max(\tilde{\varepsilon}_0, T) (\hbar \omega_0)^{-1}]^\beta, \quad (2.30)$$

где  $\omega_0$  — локальная частота колебаний дефекта в междоузлии. Кажущееся расхождение между формулами (2.28) и (2.30) связано с различным выбором исходного приближения для ширины зоны дефектонов. Если величина  $\varepsilon_0$  соответствует дефектонам, не взаимодействующим с электронами, то адиабатическое приближение уже учитывает взаимодействие с электронами, энергия которых превосходит  $\hbar \omega_0$ . Поэтому (см., например, [19])

$$\varepsilon_{\text{ad}} = \varepsilon_0 (\hbar \omega_0 E_0^{-1})^\beta, \quad (2.31)$$

и формулы (2.28) и (2.30) эквивалентны в рамках паркетного приближения.

В серии работ Ямады с различными соавторами [18, 20, 21] была исследована вероятность перехода квантового дефекта, локализованного (в отсутствие беспорядка) в момент времени  $t = 0$  в данном междоузлии, в состояние, локализованное в соседнем междоузлии. По аналогии с работой [14] для случая, когда имеет место только s-рассеяние электронов на дефектоне, была найдена зависимость вероятности перескока от сдвига фазы рассеянной волны для электрона на ПФ при произвольной величине взаимодействия. В области слабого взаимодействия ( $N(0)V_0 \ll 1$ ) полученное выраже-

ние аналогично формуле (2.28). В целом же эта динамическая задача не эквивалентна рассматриваемой в обзоре.

Предшествующее рассмотрение проведено в предположении о зонном характере движения дефектонов. Условие  $l_d \gg d$  эквивалентно условию  $\tau_d \tilde{\epsilon}_0 \gg 1$  (мы полагаем  $\hbar \equiv 1$ ), где  $\tau_d$  — время свободного пробега дефектона, равное

$$\tau_d^{-1} = -2 \operatorname{Im} \chi(\mathbf{k}, \epsilon). \quad (2.32)$$

Легко видеть, что в нормальном металле оно выполнено для температур

$$T \ll \frac{\tilde{\epsilon}_0}{2\pi g}, \quad (2.33)$$

что для реальных значений  $g$  соответствует  $T \ll \tilde{\epsilon}_0$ .

В сверхпроводящей фазе  $\tau_d \tilde{\epsilon}_0 \gg 1$  при  $T \ll T_c$ . В этой области температур основным может оказаться фононный вклад в  $\tau_d^{-1}$ . По порядку величины он равен

$$\tau_{d, \text{ph}}^{-1} = T(\theta T^{-1})^6. \quad (2.34)$$

Температурная зависимость соответствующего транспортного времени была получена в работе [3].

С повышением температуры длина свободного пробега дефектона становится меньше межатомного расстояния и его движение принимает прыжковый характер.

Однако адекватное микроскопическое описание дефектонов с контролируемыми параметрами сделанных приближений в этой области температур отсутствует.

Перейдем к рассмотрению ИК перенормировок в более простом случае, когда дефектонные состояния локализованы вследствие статистического беспорядка, связанного с неидеальностью кристалла.

## 2.2. Инфракрасные перенормировки в случае локализованных дефектонных состояний

Наличие в кристалле дефектов приводит к статистическому сбою уровней энергии в междоузлиях. Мы рассмотрим ситуацию, когда величина этого сбоя  $\xi$  намного превосходит  $\epsilon_0$ ; в этом случае дефектон с хорошей точностью локализован в определенном междоузлии. В то же время мы будем предполагать, что  $\xi \ll E_0$  и электроны в металле делокализованы и описываются блоховскими функциями [22, 23].

Гамильтонианы  $\mathcal{H}_d$  и  $\mathcal{H}_{e-d}$  в узельном представлении для дефектонов имеют вид

$$\mathcal{H}_d = \sum_{\mathbf{n}} W(\mathbf{n}) c^+(\mathbf{n}) c(\mathbf{n}) + \tilde{t}_0 \sum_{\mathbf{n}, \delta} c^+(\mathbf{n} + \delta) c(\mathbf{n}), \quad (2.35)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{e-d} = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{n}, \delta} V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}+\delta}^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a^+(\mathbf{k}) c^+(\mathbf{n} + \delta) c(\mathbf{n}) a(\mathbf{k}') + \\ & + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{n}} V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a^+(\mathbf{k}) c^+(\mathbf{n}) c(\mathbf{n}) a(\mathbf{k}'), \quad (2.36) \end{aligned}$$

$$V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \langle \mathbf{n} | V_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{R}] | \mathbf{n}' \rangle, \quad (2.37)$$

$\mathbf{n}$  — трехмерный целочисленный вектор, задающий положение междоузлия,  $W(\mathbf{n})$  — энергия дефектона в междоузлии,  $c^+(\mathbf{n})$  и  $c(\mathbf{n})$  — операторы вторичного

квантования дефектонов в узельном представлении,  $\tilde{t}_0$  — матричный элемент туннелирования,  $\delta$  пробегает ближайших соседей,  $|\mathbf{n}\rangle$  —  $\psi$ -функция дефектона в междоузлии  $\mathbf{n}$ , заданная в координатном пространстве  $\mathbf{R}$ .

Гамильтониан  $\mathcal{H}_d$  учитывает наличие диагонального беспорядка. В его отсутствие, когда  $W(\mathbf{n}) = \text{const}$  и все междоузлия эквивалентны,  $\mathcal{H}_d$  диагонализуется в представлении блоховских функций. Этот случай рассмотрен в предыдущем разделе.

Характерное значение  $\xi$  равно

$$\xi = \langle |W(\mathbf{n}) - W(\mathbf{n} + \delta)| \rangle, \quad (2.38)$$

где угловые скобки означают усреднение по  $\mathbf{n}$  и  $\delta$ . В силу неравенства  $\xi \gg \tilde{t}_0$  интеграл перекрытия между  $\psi$ -функциями состояний, центрированных на соседних междоузлиях, будет содержать малый параметр  $\tilde{t}_0/\xi$ , а  $V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}+\delta}^{(0)}(\mathbf{k})$  по порядку величины равно  $\tilde{t}_0 V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}^{(0)}(\mathbf{k})/\xi$ .

Поэтому основной вклад в ИК перенормировку  $V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}^{(0)}(\mathbf{k})$  и функции Грина дефектонов

$$\Psi_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}^{(0)}(\epsilon_k) = (i\epsilon_k - W(\mathbf{n}) + \xi)^{-1} \quad (2.39)$$

вносит диагональное по  $\mathbf{n}$  слагаемое в (2.36). Как и в случае отсутствия беспорядка первым членам ряда теории возмущений для  $\Psi_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}(\epsilon_k)$  и  $V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}(\mathbf{k})$  отвечают графики, изображенные на рис. 1 и 2, где всем волнистым линиям (кроме затравочной вершины на рис. 2) соответствует величина  $V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}^{(0)}(\mathbf{k})$ .

В результате рассмотрения, аналогичного проведенному в предшествующем разделе, в паркетном приближении с точностью до  $(\tilde{t}_0/\xi)^2$  получаем

$$V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}(\mathbf{k}) = V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}^{(0)}(\mathbf{k}) (E_0 T^{-1})^g, \quad (2.40)$$

$$V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}+\delta}(\mathbf{k}) = V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}+\delta}^{(0)}(\mathbf{k}) \left[ \frac{E_0}{\max(T, \xi)} \right]^m, \quad (2.41)$$

$$\Psi_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}(\epsilon_k) = \Psi_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}^{(0)}(\epsilon_k) (TE_0^{-1})^g, \quad (2.42)$$

$$\tilde{t} = \tilde{t}_0 \left[ \frac{\max(T, \xi)}{E_0} \right]^\beta. \quad (2.43)$$

Вычисление ИК перенормировок в промежуточном случае  $\tilde{t} \sim \xi$ , когда система находится вблизи порога андерсоновской локализации, представляется весьма сложной математической задачей, однако можно предполагать, что в этой области значений перенормировки носят тот же характер, что и в обоих предельных случаях.

Кроме того, разумно предположить, что ИК перенормировки для системы дефектонов, локализованных не вследствие статического беспорядка, а из-за сильной диссипации, аналогичны рассмотренным выше.

Перейдем теперь к изучению частного случая локализованных дефектонных состояний — двухуровневой системы, исследованию которой было посвящено большое число работ.

## 2.3. Инфракрасные перенормировки в случае двухуровневой системы

Следует отметить, что исследования Кондо начались с рассмотрения двухуровневой системы (ДУС), в которой квантовый дефект туннелировал между двумя эквивалентными положениями равновесия [24]. Для величины туннельного матричного элемента было получено выражение, аналогичное формуле (2.28). Динамика такой

ДУС, взаимодействующей с диссипативным окружением, широко исследовалась методами функционального интегрирования (см. обзор [19]). При этом предполагалось, что диссипативное окружение представляет собой набор независимых гармонических осцилляторов, линейно взаимодействующих с ДУС. Гамильтониан такой "спин-бозонной" системы имеет вид

$$\mathcal{H}_{\text{sb}} = -\frac{1}{2}J_0 \hat{\sigma}_x + \frac{1}{2} \xi \hat{\sigma}_z + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 x_{\alpha}^2 + p_{\alpha}^2 m_{\alpha}^{-1}) + \frac{1}{2} a \hat{\sigma}_z \sum_{\alpha} C_{\alpha} x_{\alpha}, \quad (2.44)$$

где  $J_0$  — затравочное расщепление уровней ДУС, вызванное туннелированием,  $\xi$  — асимметрия ДУС,  $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z$  — матрицы Паули, собственное значение  $\sigma_z = \pm 1$  отвечает дефекту, локализованному в правом (левом) минимуме ДУС;  $m_{\alpha}, x_{\alpha}, p_{\alpha}, \omega_{\alpha}$  — масса, координата, импульс и частота соответствующего гармонического осциллятора, суммирование производится по всем осцилляторам,  $a$  — расстояние между минимумами потенциальной энергии ДУС. Величина  $C_{\alpha}$  характеризует связь ДУС с осциллятором. Обычно предполагают, что окружение описывается спектральной функцией  $f(\omega)$  вида

$$f(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha} \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}} \delta(\omega - \omega_{\alpha}) = A \omega^s e^{-\omega/\omega_c}, \quad (2.45)$$

где  $A = \text{const}$ ,  $\omega_c$  — граничная частота осцилляторов, а показатель  $s$  выбирается из физических соображений. Для случая взаимодействия с фононами в трехмерном кристалле  $\omega_c = \theta$ , а  $s = 5(3)$ , если туннелирование происходит между кристаллографически эквивалентными (неэквивалентными) междоузлиями.

В рамках теории возмущений взаимодействие квантового дефекта с электронами эквивалентно взаимодействию с бозонами, для которых  $\omega_c = E_0$ , а  $s = 1$  (бозоны Томонаги) [17]. Случай  $s = 1$  называют случаем "омической" диссипации.

Проводя функциональное интегрирование по переменным диссипативного окружения, получают эффективное действие для квантового дефекта, которое определяет его поведение.

Расчеты показывают, что при  $T = 0$  дефект остается локализованным в одном минимуме при  $s < 1$ , а также и при  $s = 1$ , если параметр  $\beta' = Aa^2/h$  превосходит единицу. Для  $\beta' < 1$  перенормированный туннельный матричный элемент  $J/2$  определяется соотношением

$$J = J_0 (J_0 E_0^{-1})^{\beta'/(1-\beta')}. \quad (2.46)$$

Однако, как показано в работах [25, 26], вышеприведенная схема не учитывала обратного влияния ДУС на термостат, что допустимо только в случае  $\beta' \ll 1$ . Сама возможность локализации частицы в одном из двух эквивалентных минимумов конечной глубины даже в случае сильной диссипации представляется маловероятной.

Исследуем взаимодействие электронов с двухуровневыми системами.

Гамильтониан отдельной ДУС имеет вид

$$\mathcal{H}_{\text{ДУС}} = -\frac{\xi}{2} c_1^{\dagger} c_1 + \frac{\xi}{2} c_2^{\dagger} c_2 + \frac{J_0}{2} (c_1^{\dagger} c_2 + c_2^{\dagger} c_1), \quad (2.47)$$

где  $J_0$  и  $\xi$  определены выше, а  $c_j^{\dagger}, c_j$  — операторы вторичного квантования для дефектона в  $j$ -й потенциальной яме.

Взаимодействие ДУС с электронами описывается гамильтонианом

$$\mathcal{H}_{\text{e-ДУС}} = \sum_{j, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a^{\dagger}(\mathbf{k}') a(\mathbf{k}) \times \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{R}_j] c_j^{\dagger} c_j, \quad (2.48)$$

где  $\mathbf{R}_j$  — координаты минимумов ДУС.

После диагонализации гамильтониана  $\mathcal{H}_{\text{ДУС}}$  получаем

$$\mathcal{H}_{\text{ДУС}} = \sum_{j=1,2} (-1)^j \frac{E}{2} \tilde{c}_j^{\dagger} \tilde{c}_j, \quad (2.49)$$

где

$$E = (\xi^2 + J_0^2)^{1/2}, \\ \tilde{c}_1 = \tilde{a} c_1 - \tilde{b} c_2, \quad \tilde{c}_2 = \tilde{a} c_2 + \tilde{b} c_1, \quad \tilde{a} = [0, 5(1 + \xi E^{-1})]^{1/2}, \\ \tilde{b} = [0, 5(1 - \xi E^{-1})]^{1/2}. \quad (2.50)$$

В новом базисе гамильтониан  $\mathcal{H}_{\text{e-ДУС}}$  принимает вид

$$\mathcal{H}_{\text{e-ДУС}} = \sum_{j, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a^{\dagger}(\mathbf{k}') a(\mathbf{k}) \{ \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{R}_1] \times \\ \times [\tilde{a}^2 \tilde{c}_1^{\dagger} \tilde{c}_1 + \tilde{b}^2 \tilde{c}_2^{\dagger} \tilde{c}_2 + \tilde{a} \tilde{b} (\tilde{c}_2^{\dagger} \tilde{c}_1 + \tilde{c}_1^{\dagger} \tilde{c}_2)] + \\ + \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{R}_2] [\tilde{a}^2 \tilde{c}_2^{\dagger} \tilde{c}_2 + \tilde{b}^2 \tilde{c}_1^{\dagger} \tilde{c}_1 - \\ - \tilde{a} \tilde{b} (\tilde{c}_2^{\dagger} \tilde{c}_1 + \tilde{c}_1^{\dagger} \tilde{c}_2)] \}. \quad (2.51)$$

Расчет ИК перенормировок затравочной функции Грина дефектонов и  $V_0(\mathbf{k})$  при произвольном соотношении между  $J_0$  и  $\xi$  упрощается лишь в случае  $k_F a \ll 1$ , где  $\mathbf{a} = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1$ , когда можно считать, что  $\exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') (\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1)] = 1$ . Перенормировка функций Грина дефектона, отвечающих двум уровням энергии, и диагонального матричного элемента  $V_{jj}(\mathbf{q})$  описывается формулами (2.42) и (2.40), а различием величин  $m$  и  $g$ , т.е. величиной  $\beta$  можно пренебречь.

Если под  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$  понимать  $\psi$ -функции дефекта, локализованного в левом и правом минимуме ДУС, соответственно, то по порядку величины матричный элемент

$$V_{1,2}^{(0)}(\mathbf{k}) \sim \tilde{t}_0 E_0^{-1} V_{1,1}^{(0)}(\mathbf{k}), \quad (2.52)$$

поэтому мы не учитывали его при вычислении ИК перенормировок.

В работах Влады и Завадовского [27, 28] было показано, что учет  $V_{1,2}^{(0)}(\mathbf{k})$  в "некоммутирующем" случае, когда

$$\sum_{\mathbf{k}} \{ [V_{1,1}^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) - V_{2,2}^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)] V_{1,2}^{(0)}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) - \\ - V_{1,2}^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) [V_{1,1}^{(0)}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}) - V_{2,2}^{(0)}(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k})] \} \times \\ \times \frac{1 - n(\varepsilon(\mathbf{k}))}{\omega - \varepsilon(\mathbf{k})} \neq 0, \quad (2.53)$$

приводит к возникновению дополнительных ИК расходимостей, так как теперь, в отсутствие трансляционной инвариантности, диаграммы, изображенные на рис. 4, не



компенсируют друг друга полностью. Этот случай аналогичен сильно анизотропной модели Кондо. Дополнительные перенормировки могут стать существенными при температуре Кондо

$$T_K = V_0 \left( \frac{\varepsilon_0}{E_0} \right)^{0,5 + \{1/[2(2g)^{1/2}]\}}, \quad (2.54)$$

если она превосходит значение  $E$ .

Поскольку величина ИК перенормировок изменяется с температурой вплоть до  $T \sim E$ , в случае  $T_K \ll E$  эти дополнительные перенормировки не успевают достичь заметной величины.

Полученная в работах [27, 28] оценка для  $T_K$  отвечает самому оптимистическому выбору параметров и дает  $T_K \sim 1$  К, т.е. порядка  $E$ . Однако более реалистические оценки приводят к соотношению  $T_K \leq 0,1 E$ .

Таким образом, во всем исследуемом диапазоне указанными дополнительными перенормировками можно пренебречь.

### 3. Кластеризация подвижных дефектов в металлах

#### 3.1. Дальнедействующая часть дефектон-дефектонного взаимодействия и наличие связанных состояний

Вопросу взаимодействия атомов водорода в матрице металла посвящено большое количество работ (см., например, монографию [29]). Во всех этих работах учитывался только один вид дальнедействующего взаимодействия между дефектами — упругое взаимодействие, т.е. косвенное взаимодействие через акустические фононы. Энергия этого взаимодействия описывается выражением [29]

$$W_{\text{elas}}(\mathbf{R}) = W(\mathbf{b})\Omega R^{-3}, \quad (3.1)$$

где  $\mathbf{R}$  — расстояние между дефектами,  $\Omega$  — объем элементарной ячейки, а  $\mathbf{b} = \mathbf{R}/R$ . В зависимости от ориентации вектора  $\mathbf{b}$  по отношению к осям кристаллической решетки  $W(\mathbf{b})$  принимает как положительные, так и отрицательные значения.

В работе [7] указывалось на существенную роль другого дальнедействующего взаимодействия — косвенного взаимодействия через фриделевские осцилляции электронной плотности. В случае сферической ПФ потенциальная энергия этого взаимодействия имеет вид [30]

$$\tilde{W}_{\text{el}}(\mathbf{R}) = \frac{\Omega N(0) |V_0(2k_F)|^2 \cos(2k_F R)}{2\pi \varepsilon^2(2k_F, 0) R^3}, \quad (3.2)$$

где  $\tilde{\varepsilon}(2k_F, 0)$  — диэлектрическая проницаемость.

При взаимодействии между разнородными дефектами  $|V_0(2k_F)|^2$  следует заменить на  $(V_{0,1}(2k_F)V_{0,2}^*(2k_F) + \text{к.с.})/2$ , где индексы 1 и 2 относятся к примесям разного типа. Вследствие температурного размытия коновской особенности  $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, 0)$  взаимодействие  $\tilde{W}_{\text{el}}(\mathbf{R})$  экспоненциально убывает на расстояниях  $R_0 = d\varepsilon_F/T$ , где  $d$  — постоянная кристаллической решетки, а  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми [31]. В рассматриваемой области низких температур данный эффект не существен. Статический беспорядок

не приводит к экспоненциальному затуханию  $\tilde{W}_{\text{el}}(\mathbf{R})$  [32, 33].

Результирующее дальнедействующее взаимодействие между примесями дается суммой

$$W(\mathbf{R}) = W_{\text{elas}}(\mathbf{R}) + \tilde{W}_{\text{el}}(\mathbf{R}). \quad (3.3)$$

Значение  $W(\mathbf{b})$  изменяется от 1 эВ для тяжелых примесей внедрения до  $10^{-2}$  эВ в случае водорода в металле [34]. Величина  $N(0)|V_0(2k_F)|^2/2\pi \varepsilon^2(2k_F, 0)$  при характерных для металла значениях входящих в нее параметров составляет  $10^{-2} - 1$  эВ, т.е.  $\tilde{W}_{\text{el}}(\mathbf{R})$  имеет тот же порядок, что и  $W_{\text{elas}}(\mathbf{R})$ . В случае примесей замещения косвенное взаимодействие через электроны проводимости может оказаться преобладающим.

Наряду с взаимодействием дефектов между собой существует их взаимодействие с матрицей кристалла, имеющее минимумы в междоузлиях (для примесей внедрения). Будем считать эти минимумы достаточно резкими, а сам потенциал матрицы существенно более сильным, чем  $W(\mathbf{R})$ . Это позволит пренебречь смещением положений равновесия в междоузлиях, вызванных действием  $W(\mathbf{R})$ , по сравнению с  $\mathbf{a}$  и рассмотреть задачу о распределении по междоузлиям малого количества дефектов с учетом их парного взаимодействия [35, 36]. Конечно, в случае  $R \sim d$  необходимо учитывать короткодействующую часть дефектон-дефектонного взаимодействия.

#### 3.2. Кластеризация дефектов

В силу знакопеременности  $W(\mathbf{b})$  и  $\tilde{W}_{\text{el}}(\mathbf{R})$  имеется набор междоузлий с  $W(\mathbf{R}) < 0$ , причем состоянию с наименьшей энергией  $-W_0$  при  $k_F d \sim 1$  соответствует  $R_0 \sim d$ . Короткодействующая часть взаимодействия между дефектами даже в самом неблагоприятном случае может изменить знак взаимодействия только для нескольких наиболее близких друг к другу положений дефектов. Поэтому все подвижные точечные дефекты в металле и нейтральные подвижные примеси в диэлектрике с понижением температуры должны образовывать кластеры [35, 36].

В результате кластеризации может возникнуть расщепление на фазы с высокой и низкой концентрацией дефектонов, а могут возникнуть кластеры из конечного числа частиц.

Характерная температура кластеризации, как показывает простой статистический расчет, в области малой концентрации дефектонов  $x \ll 1$  равна

$$T_{\text{cl}} = W_0 |\ln x|^{-1}, \quad (3.4)$$

где  $W_0$  — удельная энергия связи дефектонов в высококонцентрированной фазе или кластере.

Доля свободных (некластеризовавшихся) дефектонов  $\kappa$  равна

$$\kappa = \left( 1 + \gamma x \exp \frac{W_0}{T} \right)^{-1}, \quad (3.5)$$

где  $\gamma \sim 1$ , если считать, что существует только одно связанное состояние с удельной энергией связи  $W_0$ , или

$$\kappa = \left[ 1 + \gamma x \left( \frac{T}{W_0} \right)^2 \exp \frac{W_0}{T} \right]^{-1}, \quad (3.6)$$

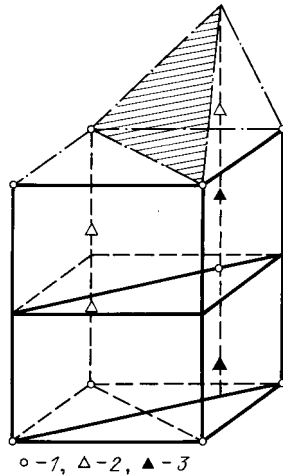


Рис. 8. Тетраэдрические междоузлия в ГПУ матрице металла. 1 — атом матрицы, 2 — тетраэдрическое междоузлие, 3 — междоузлия, занимаемые при образовании квазимолекул

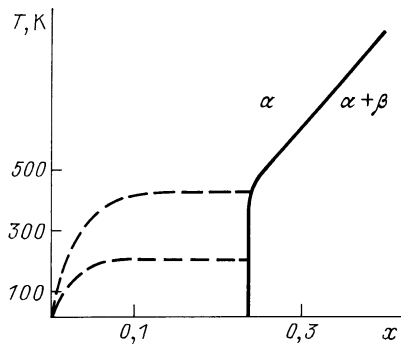


Рис. 9. Фазовая диаграмма гидридов иттрия, скандия и ряда редкоземельных элементов

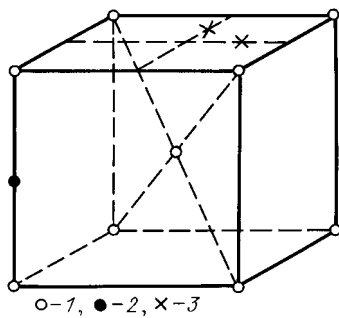


Рис. 10. Двухуровневая система в монокристалле ниобия. 1 — атомы ниобия, 2 — атом тяжелой примеси, 3 — равновесные положения для атома водорода

если учесть наличие большого числа связанных состояний дефектов [36].

В любом случае  $\kappa$  экспоненциально убывает при  $T < T_{cl}$ .

В большинстве случаев фаза с кластерами из конечного числа частиц является метастабильной по отношению к крупномасштабному расслоению на фазы с высокой и низкой концентрацией дефектов. Однако эти метастабильные состояния возникают достаточно часто, так как связывание подвижных дефектов в кластеры резко снижает их подвижность и увеличивает время прихода к равновесию.

Присутствие в металле осциллирующего с расстоянием взаимодействия  $\vec{W}_{cl}(\mathbf{R})$  может сделать энергетиче-

ски выгодным следующий сценарий кластеризации: при некоторой характерной температуре  $T_{cl1}$  образуются кластеры из нескольких частиц — квазимолекулы, а при более низкой температуре  $T_{cl2}$  происходит кластеризация квазимолекул. Характерное расстояние между квазимолекулами в возникающем кластере второго поколения намного превосходит расстояние между дефектами в квазимолекуле, что и обуславливает малость удельной энергии связи в нем по сравнению с удельной энергией связи дефектов в квазимолекуле (а следовательно, и малость  $T_{cl2}$  по сравнению с  $T_{cl1}$ ). Если число квазимолекул в кластере второго поколения также ограничено, то при более низкой температуре  $T_{cl3}$  начнется следующий этап процесса кластеризации и т.д.

Образование квазимолекул не есть фазовый переход в истинном значении этого слова, так как этот процесс происходит в интервале температур, определяемом формулой

$$\Delta T = T_{cl} |\ln x|^{-1}, \quad (3.7)$$

и все термодинамические характеристики системы изменяются непрерывно.

Квазимолекулы из двух атомов водорода (дейтерия) наблюдались методом диффузного упругого рассеяния нейтронов в гидридах металлов третьей группы:  $\text{LuD}_x$  [37, 38],  $\text{YH}(\text{D})_x$  [39, 40],  $\text{ScD}_x$  [41]. Изотопы водорода располагаются в тетраэдрических порах ГПУ матрицы металла. При образовании квазимолекулы второй атом водорода занимает следующую за ближайшей тетраэдрическую пору вдоль гексагональной оси, расположенную симметрично относительно ближайшего атома матрицы (рис. 8).

Фазовая диаграмма гидридов скандия, иттрия и ряда редкоземельных элементов имеет вид, изображенный на рис. 9 [36]. Доля квазимолекул при 400 К достаточно велика, чтобы препятствовать расслоению на высоко- и низкоконцентрированную фазы в области  $x < x_{cr}$  [39]. Величина  $x_{cr}$  изменяется от 0,03 в  $\text{ErH}_x$  [42] до 0,35 в  $\text{ScH}_x$  [43]. В районе 150—200 К наблюдались аномалии электросопротивления и теплоемкости гидридов, свидетельствующие о кластеризации квазимолекул [42—45].

Данные нейтронных измерений говорят об отсутствии дальнего порядка в фазе с высокой концентрацией водородных пар; таким образом, в районе 150—200 К происходит переход "решеточный газ — решеточная жидкость" в системе квазимолекул.

В веществах, для которых концентрация неподвижных дефектов намного превосходит концентрацию подвижных, будут образовываться кластеры из одной неподвижной и одной подвижной (или нескольких подвижных) примесей. В этом случае  $x$  в формулах (3.4) — (3.7) заменяется на концентрацию неподвижных дефектов, а  $W_0$  есть энергия связи между подвижным и неподвижным дефектами. Примером такой кластеризации служит захват водорода атомами O, N и C в ниобии. Последние занимают октаэдрические междоузлия в объемноцентрированной решетке ниобия, а атомы водорода — тетраэдрические междоузлия. В результате взаимодействия с тяжелой примесью C, N или O при  $T < 150$  К атом водорода занимает одно из двух эквивалентных положений равновесия, соответствующих двум ближайшим друг к другу тетраэдрическим междоузлиям (рис. 10) [4]. Вследствие туннелирования между этими

положениями равновесия возникает двухуровневая система.

Впервые аномалии теплоемкости, связанные с такими ДУС, были обнаружены в работе [46], а затем они были изучены с помощью измерений теплоемкости [47, 48], теплопроводности [49], внутреннего трения [50—52], ультразвуковых (УЗ) исследований [53—56]. Наиболее полная информация получена методом неупругого рассеяния нейтронов [57—62]. В области низких температур наблюдался четкий боковой пик в интенсивности неупругого рассеяния (рис. 11). Данные этих измерений дают величину  $J = 226 \pm 4$  мкэВ для  $\text{Nb}(\text{OH})_x$ ,  $J = 165 \pm 4$  мкэВ для  $\text{Nb}(\text{NH})_x$  и  $J = 162 \pm 4$  мкэВ для  $\text{Nb}(\text{CN})_x$  [61] при  $T \rightarrow 0$  в сверхпроводящей фазе. Зависимость величины  $J$  от сорта тяжелой примеси свидетельствует о различной величине деформаций решетки ниобия вокруг примесей разного типа [62].

Если бы такая деформация отсутствовала, то ширина зоны свободного дефектона в ниобии равнялась бы  $zJ$ , где  $z$  — число ближайших эквивалентных междоузлий. При наличии деформации решетки это соотношение можно использовать как оценку по порядку величины.

При температурах  $T > 10$  К, когда  $\tau_d J \ll 1$ , вместо бокового пика в спектре рассеяния возникает квазиупругий центральный максимум с шириной, пропорциональной частоте скачков водорода между минимумами ДУС.

Величина  $J$  для дейтерия, захваченного примесью азота, была найдена в результате УЗ исследований [56] и оказалась равной  $J = 0,18 \pm 0,01$  К. Аналогичные ДУС возникают также и в тантале, однако их характеристики исследованы значительно меньше [46, 63, 64].

Асимметрия возникших ДУС связана с влиянием остальных ДУС и других дефектов кристаллической решетки. Оценим ее, исходя из того, что она вызвана действием "замороженных", хаотически распределенных дефектов концентрации  $c$ , а вклад подвижных дефектов в асимметрию мал по сравнению с вкладом тяжелых примесей. В противном случае существенными становятся коллективные эффекты в системе подвижных дефектов.

Поскольку оба вклада в дальнедействующее взаимодействие между дефектами спадают с расстоянием  $r$  между ними как  $r^{-3}$ , то в области  $c \ll 1$  распределение величины  $\xi$  является лоренцевским с характерной шириной  $\delta$  порядка

$$\delta = cW(d). \quad (3.8)$$

В то же время разбросом значений величины  $J$  в кристалле с малой концентрацией дефектов ( $c \leq 10^{-2}$ ) можно пренебречь [65].

В результате обработки данных по квазиупругому рассеянию нейтронов в работах [60, 62] рассчитывалась частота прыжков из междоузлия в междоузлие  $\nu(0)$  в отсутствие асимметрии. Температурная зависимость этой величины в  $\text{Nb}(\text{OH})_x$  и  $\text{Nb}(\text{NH})_x$  изображена на рис. 12.

Ниже 60 К зависимость  $\nu(0)$  от  $T$  хорошо аппроксимируется законом  $\nu(0) \propto T^{-1}$ , а сравнение с формулой для частоты прыжков

$$\nu(0) = \frac{J^2}{4\pi\beta\hbar}$$

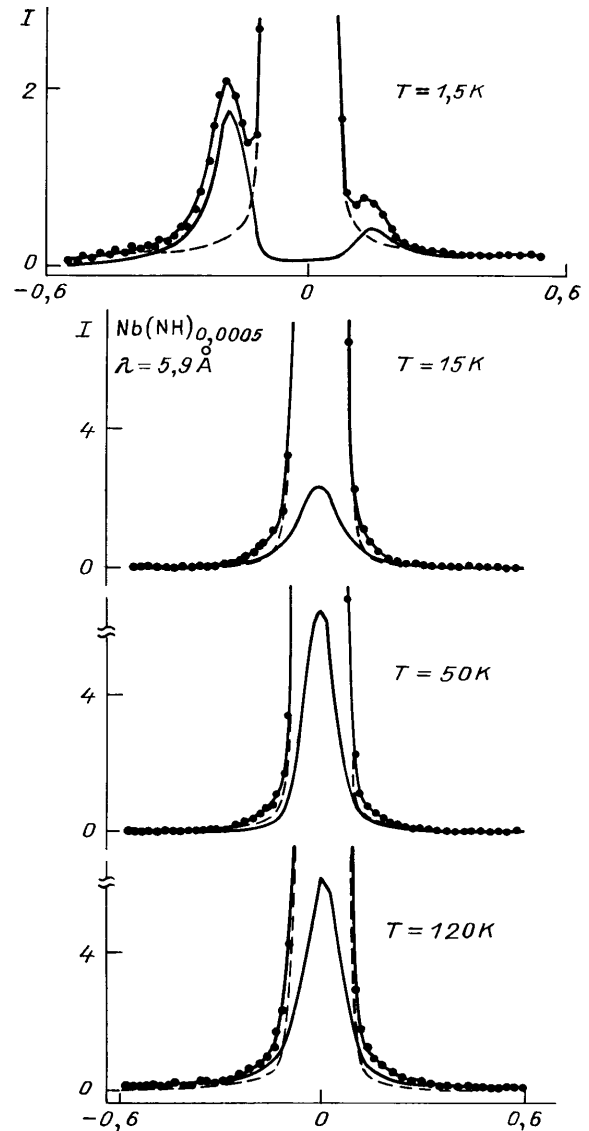


Рис. 11. Зависимость интенсивности неупругого рассеяния нейтронов в  $\text{Nb}(\text{NH})_{0,0005}$  от изменения их энергии при различных температурах (в мэВ)

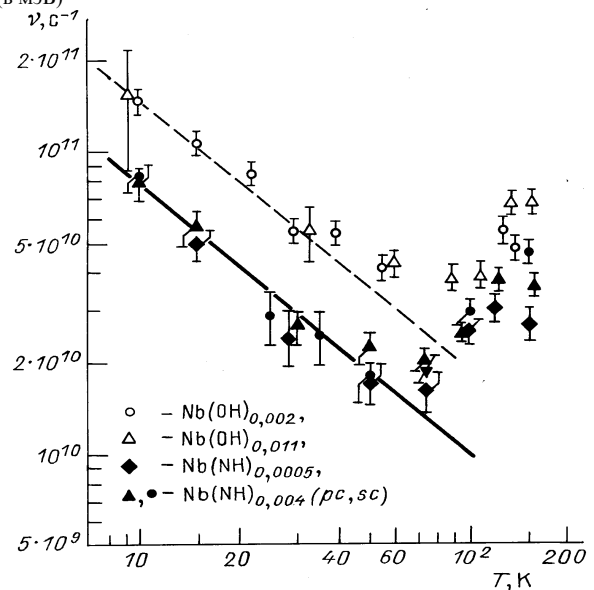


Рис. 12. Зависимость частоты прыжков водорода между минимумами ДУС в  $\text{Nb}(\text{OH})_x$  и  $\text{Nb}(\text{NH})_x$  от температуры; *pc* — поликристалл, *sc* — монокристалл

(см. [17, 10]) позволило определить величину  $\beta = 0,055$  для водорода в ниобии [60]. Кроме того, отношение частот прыжков для  $\text{Nb}(\text{OH})_x$  и  $\text{Nb}(\text{NH})_x$  оказалось в хорошем согласии с отношением величин  $J^2$ , измеренных с помощью неупругого рассеяния нейтронов.

Таким образом, можно сделать вывод, что ниже 60 К квантовая диффузия водорода в ниобии определяется процессами рассеяния дефектонов на электронах, а выше 60 К существенную роль начинает играть взаимодействие с фононами.

Эффективно ДУС возникают также в рассмотренных выше гидридах металлов третьей группы. Неспарившиеся атомы водорода с большей вероятностью туннелируют в ближайшее междоузлие, расположенное на гексагональной оси (см. рис. 8), чем в другие эквивалентные междоузлия. Возникает некое подобие ДУС, образованное этими двумя междоузлиями. В работах [66, 67] были проведены исследования гидридов скандия методом квазиупругого рассеяния нейтронов и получена кривая, аналогичная изображенной на рис. 12. Значение  $\tau_d J$  сравнивалось с единицей при 15,7 К, а величины  $J$  и  $\beta$  оказались равными 0,32 мэВ и 0,039, соответственно. Большая величина  $J$  связана с более близким, чем в ниобии, расстоянием между минимумами ДУС. Минимум частоты прыжков  $\nu(0)$  наблюдался при  $T = 100$  К.

## 4. Кинетические коэффициенты металлов с квантовыми дефектами

### 4.1. Металл со свободными дефектонами

#### 4.1.1. Электропроводность

Рассмотрим теперь влияние квантовых дефектов на электронную подсистему металла. Сначала исследуем случай свободных дефектонов, описываемых блоховскими волновыми функциями. При этом будем исходить из гамильтониана (2.1), (2.3), (2.4), на основе которого в разделе 2.1 были изучены ИК перенормировки в идеальном кристалле. Но если при исследовании ИК перенормировок нас интересовала, в первую очередь, дефектонная функция Грина, то теперь мы сосредоточим внимание на вкладе дефектонов в собственно-энергетическую часть электронной функции Грина  $\Sigma_1(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$ .

Графики типа, изображенного на рис. 13, а, приводят лишь к перенормировке химического потенциала электронов, а вклад дефектонов в мнимую часть  $\Sigma_1(\mathbf{k}, \varepsilon_k)$  в рамках паркетного приближения дается графиком, изображенным на рис. 13, б [9, 68] (обозначения такие же, как и во втором разделе). Ему соответствует выражение

$$\Sigma_{1d}(\mathbf{k}, \varepsilon_k) = 2 \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^6} |V_0(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \left[ \frac{\max(T, \varepsilon_0)}{E_0} \right]^g \times \frac{N(\mathbf{p}')(1 - N(\mathbf{p}))(1 - n(\mathbf{k} + \mathbf{p}' - \mathbf{p})) + N(\mathbf{p})(1 - N(\mathbf{p}'))n(\mathbf{k} + \mathbf{p}' - \mathbf{p})}{i\varepsilon_k - \omega(\mathbf{p}) + \omega(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{p}' - \mathbf{p}) + \mu}, \quad (4.1)$$

где

$$N(\mathbf{p}) = \{\exp[(\omega(\mathbf{p}) - \zeta)T^{-1}] + 1\}^{-1} \quad (4.2)$$

— фермиевская функция распределения дефектонов.

После аналитического продолжения из точек  $\varepsilon = i\varepsilon_k$  на действительную ось интегрирование по областям, далеким от полюса (4.1), дает постоянную перенорми-

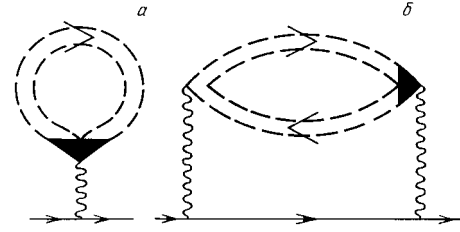


Рис. 13. Графики для собственно-энергетической части электронной функции Грина

ровку  $\mu$  и пренебрежимо малую (порядка  $xg$ ) перенормировку массы дефектонов, а интегрирование вблизи полюса дает  $\text{Im} \Sigma_{1d}(\mathbf{k}, \varepsilon)$ . На массовой поверхности

$$\text{Im} \Sigma_{1d}(\mathbf{k}, \varepsilon) = -\text{sign} \varepsilon \cdot \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^5} |V_0(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \times \left[ \frac{\max(T, \varepsilon_0)}{E_0} \right]^g [N(\mathbf{p}')(1 - N(\mathbf{p}))(1 - n(\mathbf{k} + \mathbf{p}' - \mathbf{p})) + N(\mathbf{p})(1 - N(\mathbf{p}'))n(\mathbf{k} + \mathbf{p}' - \mathbf{p})] \times \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \omega(\mathbf{p}) + \omega(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{p}' - \mathbf{p})). \quad (4.3)$$

В области температур  $T \gg \varepsilon_0$ , когда можно пренебречь  $\omega(\mathbf{p})$  и  $\omega(\mathbf{p}')$  в аргументе  $\delta$ -функции в выражении (4.3) и считать, что  $N(\mathbf{p}) = \text{const} \ll 1$ , получаем

$$\text{Im} \Sigma_{1d}(\mathbf{k}, \varepsilon) = -\frac{\text{sign} \varepsilon}{2\tau_{e, d \text{ st}}} \left( \frac{T}{E_0} \right)^g, \quad (4.4)$$

где величина  $\tau_{e, d \text{ st}}$  равна [1]

$$\tau_{e, d \text{ st}}^{-1}(\mathbf{k}) = \frac{x}{\Omega} \int \frac{|V_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 d\mathbf{k}'}{(2\pi)^2 |\nabla \varepsilon(\mathbf{k}')|}, \quad (4.5)$$

интегрирование происходит по ПФ.

Значение скорости релаксации электронов, обусловленной их рассеянием на дефектонах,  $\tau_{e, d}^{-1}$  отличается от соответствующего значения в случае рассеяния электронов на хаотически "замороженных" дефектах той же химической природы  $\tau_{e, d \text{ st}}^{-1}$  сомножителем  $(T/E_0)^g$ .

Совершенно аналогично можно показать, что при  $T \gg \varepsilon_0$  такое же соотношение имеет место и для транспортного времени пробега электронов, обусловленного рассеянием на дефектонах, т.е. при  $T \gg \varepsilon_0$  вклад рассеяния на дефектонах в электросопротивление имеет вид

$$\rho = \rho_0 (TE_0^{-1})^g, \quad (4.6)$$

где  $\rho_0$  — значение остаточного сопротивления в случае "замороженных" хаотически расположенных примесей той же химической природы [9, 68].

В работе Кондо [69] была предпринята попытка вычисления вклада квантовых дефектов в сопротивление металла. При этом перенормировка функций Грина дефектонов не принималась во внимание, а замена затравочной вершины электрон-дефектонного взаимодействия на полную была проведена для обеих вершин на рис. 13, б. В результате сопротивление росло с понижением температуры по закону  $\rho = \rho_0 (E_0/T)^{2g}$ .

Падение сопротивления с понижением температуры является естественным, так как все большая часть электронов подстраивается адиабатически под движе-

ние дефектонов. Действительно, при  $T = 0$  неадиабатически ведут себя электроны в узком пояске шириной порядка  $\tilde{\epsilon}_0$  вблизи ПФ. Они недостаточно быстры, чтобы подстраиваться под движение дефектонов. С ростом температуры вследствие появления электронных возбуждений ширина пояски становится порядка  $T$ .

Прежде чем перейти к случаю низких температур, сделаем два важных методических замечания. На первый взгляд представляется необходимым пересмотреть результаты расчетов ИК перенормировок с учетом  $\text{Im} \Sigma_{1d}(\mathbf{k}, \epsilon)$ . Однако оказывается, что этого делать не следует, так как поправки лестничного типа к электрон-дефектонной вершине  $V_0(\mathbf{q})$ , содержащие новые дефектонные петли (рис. 14), компенсируют появление собственной-энергетической части  $\Sigma_{1d}$  в электронной функции Грина, и выражение для электронной петли не изменится.

Второе замечание касается перехода к предельному случаю  $\epsilon_0 \rightarrow 0$ . Видно, что в формулу (4.6) не входит туннельный матричный элемент (ширина зоны дефектона), характеризующий квантовые свойства дефекта. Поэтому такая же температурная зависимость сопротивления должна наблюдаться и в металле с тяжелыми термализованными дефектами. Иначе говоря, результаты нашего рассмотрения не совпадают при  $\epsilon_0 \rightarrow 0$  с результатами, полученными с помощью "крестовой" техники [1]. Это связано с тем, что последняя рассматривает "замороженные" примеси как внешнее поле, действующее на электроны, а мы считаем их внутренними степенями свободы кристалла и рассматриваем рассеяние электронов на равновесной системе дефектов. Но время релаксации дефектонной подсистемы  $t_0$  определяется величиной  $\epsilon_0$  и экспоненциально возрастает с увеличением массы дефекта. Измерения же необходимо проводить спустя значительное время  $t \gg T_0$  после изменения температуры, что реально требует очень длительного ожидания. Поэтому при обычных скоростях измерений система тяжелых дефектов не успевает прийти в равновесие и ее можно считать "замороженной". Наличие таких "замороженных" дефектов в реальном образце приводит к появлению остаточного сопротивления, на фоне которого в случае, когда концентрация замороженных дефектов  $c \ll x$ , легко выделить температурно-зависимый вклад дефектонов.

Вернемся теперь к рассмотрению вклада дефектонов в электросопротивление при  $T \ll \tilde{\epsilon}_0$ . В случае открытой ПФ из формулы (4.3) легко получить, что время релаксации электронов, обусловленное их рассеянием на дефектонах, обратно пропорционально температуре  $\tau_{e,d} \propto T^{-1}$ , так как электрон при рассеянии теперь изменяет свой импульс на величину порядка теплового импульса дефектона  $\tilde{k}$ , что уменьшает фазовый объем его конечных состояний в  $(\tilde{k}/k_F)^2$  раз. Вклад дефектонов в сопротивление по порядку величины составляет [9]

$$\rho = \rho_0 \left( \frac{\epsilon_0}{E_0} \right)^g \left( \frac{T}{\tilde{\epsilon}_0} \right)^2, \quad (4.7)$$

поскольку в  $\rho$  входит транспортное время рассеяния и фактор  $(1 - \cos \varphi)$ , где  $\varphi$  — угол рассеяния электрона на дефектоне, вносит дополнительную малость  $(\tilde{k}/k_F)^2 \sim T/\tilde{\epsilon}_0$ . Здесь мы, как и ранее, полагаем, что  $k_F \sim k_B$ . В случае закрытой ПФ сопротивление  $\rho$ , как и при рассеянии на фононах, экспоненциально падает с

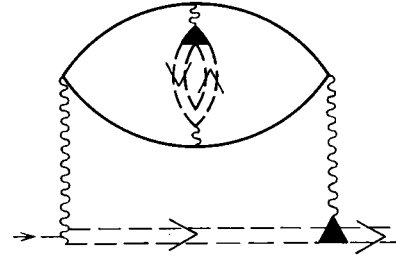


Рис. 14. Поправки к вершине, компенсирующие затухание электронной функции Грина

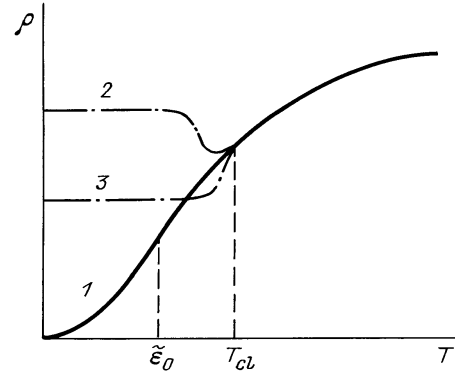


Рис. 15. Зависимость дефектонного вклада в сопротивление от температуры. 1 — в отсутствие кластеризации, 2, 3 — с учетом кластеризации

температурой, но не при  $T < \theta$ , а при  $T < \tilde{\epsilon}_0$ . По нашему предположению газ дефектонов при этом еще остается невырожденным.

Характерная температурная зависимость  $\rho(T)$  изображена на рис. 15.

До сих пор мы не учитывали процесса кластеризации дефектонов. Если концентрация тяжелых неподвижных примесей  $c \ll x$ , происходит либо расслоение на фазы с высокой и низкой концентрацией дефектонов, либо образуются кластеры из конечной числа частиц. В случае образования многофазной системы, величина кинетических коэффициентов металла зависит от размеров однофазных областей и их конфигурации. Термодинамическому равновесию кристалла при  $T \rightarrow 0$  отвечает сосуществование сверхчистой фазы и фазы с высокой концентрацией примесей (расположенных упорядоченно) в виде двух доменов, но для его установления потребуются времена геологического масштаба.

В случае образования кластеров из конечного числа дефектонов их подвижностью можно пренебречь, т.е. считать замороженной ту часть дефектов, которая кластеризовалась. В этом случае для времени релаксации электронов  $\tau_{e, \text{imp}}$  имеет место соотношение

$$\tau_{\text{imp}}^{-1}(T) = \kappa(T)\tau_{e,d}^{-1}(T) + (1 - \kappa(T))\tau_{e,cl}^{-1}, \quad (4.8)$$

где зависимость  $\kappa(T)$  дается формулой (3.6), время  $\tau_{e,d}$  соответствует рассеянию на некластеризующихся дефектонах (при  $\kappa = 1$ ), а время  $\tau_{e,cl}$  — рассеянию на "замороженных" кластерах при  $\kappa = 0$ .

Из формулы (4.8) следует, что при  $T < T_{cl}$  величины  $\tau_{e, \text{imp}}^{-1}(T)$ , а следовательно, и  $\rho(T)$  выходят на постоянное значение, определяемое видом образующихся кластеров. При этом в районе  $T_{cl}$  может происходить как нарастание, так и падение  $\rho(T)$  (см. рис. 15).

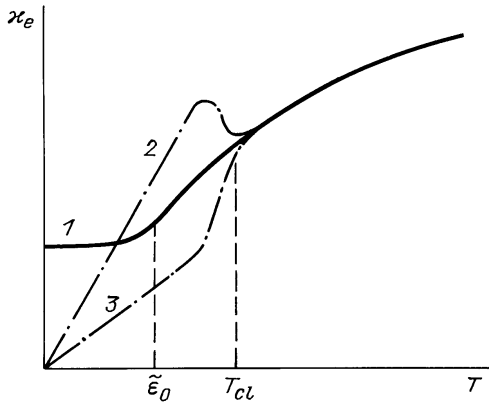


Рис. 16. Температурная зависимость коэффициента теплопроводности металла с термализованными дефектами. 1 — в отсутствие кластеризации, 2, 3 — с учетом кластеризации

Совершенно аналогично (4.8) описывается случай захвата дефектонов неподвижными примесями при  $c \gg x$ .

В заключение рассмотрим температурный интервал, в котором возможно наблюдение найденных температурных зависимостей сопротивления. Во-первых, это область  $T \ll \theta$ , где примесное рассеяние играет существенную роль. Но со стороны низких температур этот интервал ограничен значением  $T_{cl}$ , которое при  $x \sim 10^{-2} - 10^{-3}$  составляет десятки-сотни градусов. В случае малой удельной энергии связи дефектов друг с другом существует интервал  $10 < T < 100$  К, в котором должна наблюдаться нетривиальная зависимость  $\rho(T)$ , поскольку дефектонный вклад в сопротивление сравним с фоновым. Действительно, по порядку величины  $\tau_{e,d tr}^{-1} = xE_0^{1-g}T^g$ , а характерную скорость релаксации электронов, обусловленную их взаимодействием с фононами,  $\tau_{e,ph tr}^{-1}$  можно в этом диапазоне, где происходит переход от зависимости  $\tau_{e,ph tr}^{-1} \propto T$  к зависимости  $\tau_{e,ph tr}^{-1} \propto T^5$  [70], оценить как  $\tau_{e,ph tr}^{-1} \sim 0,1 T$ . Легко видеть, что при  $x \cong 10^{-3}$ ,  $g \cong 0,3$ ,  $E_0 \cong 3 \cdot 10^4$  К,  $T \cong 30$  К, величина  $\tau_{e,d tr}^{-1}$  порядка  $\tau_{e,ph tr}^{-1}$ .

#### 4.1.2. Теплопроводность

Естественно ожидать, что существенный вклад рассеяния на дефектонах в релаксацию электронов приводит к нетривиальным температурным зависимостям и других кинетических коэффициентов металла в этом же диапазоне температур. В теплопроводность кристалла вносят вклад электронная, фоновая и дефектонная подсистемы, взаимодействующие между собой.

Как показано в работе [71], в области  $T \ll \theta$  перенос тепла осуществляется, в основном, электронами, как и в случае металлов с "замороженными" примесями. Поскольку изменение энергии электрона при рассеянии на дефектоне не превосходит  $\tilde{\epsilon}_0$ , то при  $T \gg \tilde{\epsilon}_0$  рассеяние является практически упругим. В этой области температур выполняется закон Видемана–Франца [70] и электронный вклад в коэффициент теплопроводности равен

$$\kappa_e = \frac{\pi^2 T}{3e^2} \rho^{-1} = \frac{\pi^2 T}{3e^2 \rho_0} \left( \frac{E_0}{T} \right)^g. \quad (4.9)$$

По порядку величины

$$\kappa_e = T(xgd)^{-1} (E_0 T^{-1})^g \propto T^{1-g}. \quad (4.10)$$

При  $T \leq \tilde{\epsilon}_0$  закон Видемана–Франца нарушается, так как рассеяние электронов на дефектонах становится неупругим. Время энергетической релаксации  $\tau_{e,d}$  равно

$$\tau_{e,d} = \tilde{\epsilon}_0 (T x g E_0)^{-1} (E_0 \tilde{\epsilon}_0^{-1})^g. \quad (4.11)$$

Поэтому при  $T \ll \tilde{\epsilon}_0$

$$\kappa_e = \tilde{\epsilon}_0 (xgd)^{-1} (E_0 \tilde{\epsilon}_0^{-1})^g = \text{const}. \quad (4.12)$$

Поскольку величина  $\tau_{e,d}$  растет с понижением температуры, то при некотором  $T < \tilde{\epsilon}_0$  она сравнивается с временем релаксации электронов, обусловленной их рассеянием на статических тяжелых дефектах, которые всегда присутствуют в реальном кристалле. Ниже этой температуры основную роль начинает играть именно это рассеяние, а  $\kappa_e(T) \propto T$ .

На самом деле, при  $T_{cl} > \tilde{\epsilon}_0$  начинается кластеризация дефектонов, приводящая к их эффективному "замораживанию", а скорость релаксации электронов выходит при  $T < T_{cl}$  на постоянное значение  $\tau_{e,cl}^{-1}$  (см. формулу (4.8)). В этом случае по порядку величины

$$\kappa = TE_0 \tau_{e,cl} d^{-1} \propto T.$$

В зависимости от вида кластеров при  $T_{cl}$  может происходить как нарастание, так и падение  $\kappa_e$  (рис. 16).

#### 4.1.3. Поглощение звука электронами

Хорошо известно, что в области низких звуковых частот, когда длина звуковой волны  $\lambda_s$  намного превосходит длину свободного пробега электронов  $l_e$ , коэффициент поглощения звука электронами  $\alpha_e$  прямо пропорционален их времени релаксации [72–74]. Более тщательное рассмотрение показало, что величина  $\alpha_e$  пропорциональна времени  $\tau_{2e}$ , которое отличается от обычного времени релаксации множителем  $[1 - P_2(\cos \varphi)]$  при интегрировании по углу рассеяния  $\varphi$ ,  $P_2(y)$  — полином Лежандра [75]

$$\alpha_e = \frac{n \epsilon_F \omega^2 \tau_{2e}}{s^3 \rho^*}, \quad (4.13)$$

где  $n$  — концентрация электронов,  $\epsilon_F$  — их энергия Ферми,  $\omega$  и  $s$  — частота и скорость звуковой волны, а  $\rho$  — плотность металла.

В области температур  $T \ll \theta$  дефектонный вклад в  $\tau_{2e}$  превалирует для  $x \cong 10^{-3} - 10^{-2}$ . При рассеянии на статических дефектах  $\tau_{2e} = \text{const}$  и температурная зависимость поглощения связана только с малым вкладом в релаксацию процессов электрон-фононного и электрон-электронного взаимодействий.

Если же рассеяние происходит на подвижных дефектах, то температурная зависимость  $\alpha_e$  обусловлена температурной зависимостью  $\tau_{2e,d}$  [76]. В области  $T \gg \tilde{\epsilon}_0$  основной вклад в  $\tau_{2e,d}^{-1}$  вносят столкновения с рассеянием на большие углы, и время  $\tau_{2e,d}$  отличается от  $\tau_{e,d}$  только численным множителем порядка единицы. Поэтому для коэффициента поглощения звука получаем следующую температурную зависимость

$$\alpha_e = \alpha_0 (E_0 T^{-1})^g, \quad (4.14)$$

где  $\alpha_0$  — коэффициент поглощения звука в случае "замороженных" дефектов.

В области  $T \ll \tilde{\epsilon}_0$  основную роль играет малоугловое рассеяние и  $\tau_{2e, d}^{-1} = 3 \tau_{e, d \text{ tr}}^{-1}$ , где транспортное время рассеяния электронов  $\tau_{e, d \text{ tr}}$  в случае открытой ПФ равно по порядку величины

$$\tau_{e, d \text{ tr}} = \tau_{e, d \text{ st}} \left( \frac{E_0}{\epsilon_0} \right)^g \left( \frac{\tilde{\epsilon}_0}{T} \right)^2. \quad (4.15)$$

Следовательно,

$$\alpha_e = \alpha_0 \left( \frac{E_0}{\epsilon_0} \right)^g \left( \frac{\tilde{\epsilon}_0}{T} \right)^2. \quad (4.16)$$

Такая зависимость даже в отсутствие кластеризации и тяжелых неподвижных примесей будет наблюдаться не до нуля температуры, а вплоть до некоторой отличной от нуля температуры, при которой произойдет нарушение неравенства  $\lambda_s \gg l_e$ . В случае  $\lambda_s \ll l_e$   $\alpha_e$  вообще не зависит от  $\tau_{2e}$  [72—74]. Поэтому ниже этой температуры коэффициент  $\alpha_e$  должен выйти на постоянное значение. Но, как уже отмечалось, это произойдет раньше из-за кластеризации дефектов при температуре  $T_{cl}$ . Ниже  $T_{cl}$   $\alpha_e$  выйдет на постоянное значение, величина которого будет зависеть от вида образовавшихся кластеров. Зависимость  $\alpha_e(T)$  приведена на рис. 17.

Наряду с изученным выше механизмом поглощения, в кристаллах с квантовыми дефектами имеет место релаксационный механизм поглощения звука, однако его исследование выходит за рамки нашего рассмотрения.

#### 4.2. Металл с локализованными дефектными состояниями

Изучим теперь характер изменения полученных результатов при переходе от дефектных состояний, описываемых блоховскими волновыми функциями, к локализованным состояниям. Для этого рассмотрим случай, когда статический разброс энергий дефектона в соседних междоузлиях  $\xi$ , вызванный неоднородностью кристалла, намного превосходит  $\tilde{\epsilon}_0$ , т.е. когда состояния дефектона с хорошей точностью локализованы в данном междоузлии. При этом по отношению к электронной подсистеме указанный беспорядок является слабым ( $\xi \ll E_0$ ), и электроны проводимости описываются блоховскими волновыми функциями [22, 23]. ИК перенормировки в этом случае рассмотрены в разделе 2.2 на основе гамильтониана (2.35)—(2.37).

В ранее рассмотренном случае, когда дефектон описывался блоховской волновой функцией, графики типа, изображенного на рис. 13, а, не давали вклада в затухание электрона. Теперь же, т.е. в случае локализованных дефектных состояний, процесс рассеяния, изображенный на этом рисунке, приводит к изменению импульса электрона. Его вклад равен

$$G_0(\mathbf{k}, \epsilon_k) G(\mathbf{k}', \epsilon_k) \sum_{\mathbf{n}} N(\mathbf{n}) V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{R}_{\mathbf{n}}], \quad (4.17)$$

где  $N(\mathbf{n})$  — фермиевская функция распределения дефектонов по локализованным состояниям. Перенормировка вершины электрон-дефектонного взаимодействия (2.40) компенсирует перенормировку функции Грина дефектонов (2.42).

Легко видеть, что, за исключением фактора  $N(\mathbf{n})$ , выражение (4.17) совпадает с таковым, получаемым при

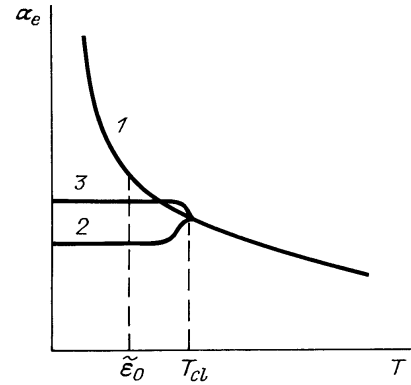


Рис. 17. Температурная зависимость поглощения звука в металлах с квантовыми дефектами. 1 — в отсутствие кластеризации, 2, 3 — с учетом кластеризации

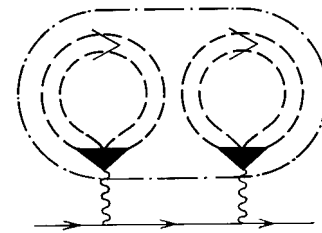


Рис. 18. Дополнительный вклад в затухание электронов, возникающий в случае локализованных дефектных состояний

рассеянии электронов на "замороженных" примесях в "крестовой" технике [1]. В последнем случае суммирование происходит по примесям.

Если считать, что отклонения  $W(\mathbf{n})$  от среднего значения в различных междоузлиях не коррелируют между собой, то усреднение по реализациям статического разупорядочения проводится аналогично усреднению в "крестовой" технике. В результате в рамках нашего приближения вклад графиков данного типа в затухание электронов дается графиком, изображенным на рис. 18. Штрихпунктирный овал показывает, что все охваченные им дефектонные петли принадлежат одному и тому же  $|\mathbf{n}\rangle$ .

Второй вклад в затухание электронов обусловлен процессами, описываемыми графиком, изображенным на рис. 13, б. Наряду с упругими процессами, когда обе дефектонные функции Грина в петле отвечают одному и тому же  $\mathbf{n}$ , свой вклад в затухание электронов вносят и неупругие процессы, для которых функции Грина дефектонов соответствуют разным  $\mathbf{n}$ . Вклад неупругих процессов мал по параметру  $(\tilde{\epsilon}_0/\xi)^2$ . Пренебрегая им, получаем для  $\tau_{e, d}^{-1}$  выражение

$$\tau_{e, d}^{-1}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{n}} \int \frac{|V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}^{(0)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 d\mathbf{k}'}{\Omega (2\pi)^2 |\nabla \epsilon(\mathbf{k}')|} [N^2(\mathbf{n}) + N(\mathbf{n})(1 - N(\mathbf{n}))(TE_0^{-1})^g], \quad (4.18)$$

интегрирование происходит по ПФ.

Если  $V_{\mathbf{n}, \mathbf{n}}^{(0)}(\mathbf{k})$  в разных междоузлиях слабо отличаются друг от друга, так что этим различием можно пренебречь, то выражение для  $\tau_{e, d}$  принимает наиболее простой вид

$$\tau_{e, d}^{-1} = \tau_{e, d \text{ st}}^{-1} x^{-1} \sum_{\mathbf{n}} [N^2(\mathbf{n}) + N(\mathbf{n})(1 - N(\mathbf{n}))(TE_0^{-1})^g]. \quad (4.19)$$

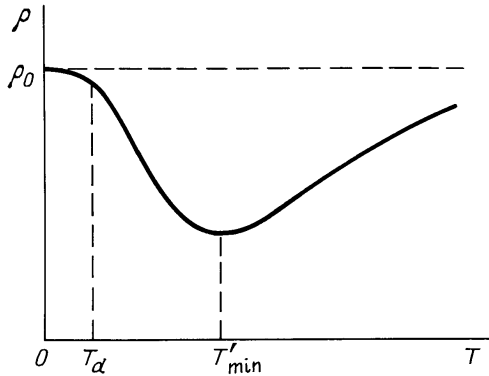


Рис. 19. Зависимость дефектного вклада в сопротивление от температуры при наличии беспорядка

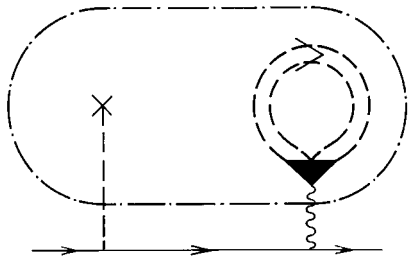


Рис. 20. Интерференционный вклад ДУС в собственно-энергетическую часть электронной функции Грина

Совершенно аналогично получаем для транспортного времени пробега электронов и сопротивления [22, 23]

$$\rho = \rho_0 x^{-1} \sum_{\mathbf{n}} [N^2(\mathbf{n}) + N(\mathbf{n})(1 - N(\mathbf{n}))(TE_0^{-1})^g]. \quad (4.20)$$

Если температура достаточно высока и числа заполнения  $N(\mathbf{n})$  так малы, что

$$\sum_{\mathbf{n}} N^2(\mathbf{n}) \ll x(TE_0^{-1})^g, \quad (4.21)$$

то для кинетических коэффициентов справедливы соотношения (4.6), (4.9), (4.14), полученные в предыдущем разделе в случае отсутствия диагонального беспорядка. Это свидетельствует об универсальности данной температурной зависимости и является главным результатом данного раздела.

Дальнейшее поведение кинетических коэффициентов с понижением температуры рассмотрим на примере вклада квантовых дефектов в сопротивление. При  $T = T'_{\min}$  происходит смена знака неравенства (4.21). Последующее понижение температуры сопровождается ростом сопротивления, который продолжается вплоть до температуры  $T_d$  вырождения газа дефектонов. При  $T \ll T_d$  сопротивление  $\rho = \rho_0$ . Характерный вид зависимости  $\rho(T)$  изображен на рис. 19. Значения  $T'_{\min}$  и  $T_d$  определяются видом функции плотности состояний  $\nu(W(\mathbf{n}))$ .

Поскольку в реальном кристалле беспорядок создан дефектами кристаллической решетки, то тот факт, что с понижением температуры вероятность заполнения наиболее глубоких дефектных уровней стремится к единице, представляет собой захват (кластеризацию) дефектонов этими дефектами кристаллической решетки. Равенство  $\rho(0) = \rho_0$  является следствием модельного предположения о характере беспорядка.

Кроме того, время релаксации дефектной подсистемы при  $T < T'_{\min}$  резко возрастает, поскольку вероятность возбуждения дефекта с глубокого уровня экспоненциально падает с температурой. В реальном эксперименте система дефектонов при низкой температуре окажется "замороженной".

Таким образом, поведение кинетических коэффициентов металла с локализованными дефектными состояниями не отличается от случая свободных дефектных состояний.

#### 4.3. Металл, содержащий двухуровневые системы

Из предшествующего рассмотрения ясно, что кластеризация дефектонов, ведущая к их "замораживанию", препятствует наблюдению нетривиальных температурных зависимостей кинетических коэффициентов металла, содержащего квантовые дефекты. В третьем разделе была рассмотрена ситуация, когда в результате захвата дефектона неподвижной тяжелой примесью возникает ДУС. При этом квантовый дефект частично сохраняет свою подвижность и ниже температуры кластеризации. Поэтому естественно ожидать, что в этом случае возможно наблюдение нетривиальных температурных зависимостей и при  $T < T_{cl}$ .

Рассмотрим вклад ДУС в кинетические коэффициенты металла на основе развитого в разделе 2.3 формализма [77]. Этот вклад по-прежнему определяется графиками, изображенными на рис. 13, б и 18. Если две функции Грина в дефектной петле, изображенной на рис. 13, б, отвечают состояниям с разной энергией, то соответствующий неупругий вклад в сопротивление содержит по сравнению с упругим вкладом (когда обе функции Грина отвечают одному состоянию) дополнительную малость  $(k_F a)^2$  и им можно пренебречь.

По аналогии с формулами (4.18)–(4.20) получаем с точностью до членов порядка  $(k_F a)^2$

$$\tau_{e,d}^{-1}(\mathbf{k}) = \sum_m \int \frac{d\mathbf{k}' |V_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2}{\Omega(2\pi)^2 |\nabla \epsilon(\mathbf{k}')|} \times [1 + 2N_m(1 - N_m)(TE_0^{-1})^g], \quad (4.22)$$

$$\rho = \rho_0 \left[ 1 + \frac{2\Omega}{x_{\text{ДУС}} v} \sum_m N_m(1 - N_m)(TE_0^{-1})^g \right], \quad (4.23)$$

$v$  — объем системы, а  $N_m$  — заселенность нижнего уровня  $m$ -й ДУС

$$N_m = \frac{\exp(E_m T^{-1})}{\exp(E_m/T) + 1}. \quad (4.24)$$

Мы не учитывали здесь вклад в рассеяние электронов, вносимый неподвижными тяжелыми примесями. Кроме их аддитивного вклада в  $\tau_{e,d}$  и  $\rho$  существует интерференционный вклад в рассеяние, изображенный на рис. 20. Крест соответствует рассеянию на неподвижном дефекте, а штрихпунктирный овал указывает, что квантовый и неподвижный дефекты принадлежат одной и той же ДУС. Этот вклад не зависит от температуры и приводит к изменению постоянной составляющей  $\rho$ .

Найдем коэффициент при  $(T/E_0)^g$ , исходя из лоренцевского распределения величины  $\xi$ . Если  $\delta \gg J_0$ , то



$$\begin{aligned}
\frac{\Omega}{x_{\text{ДУС}} v} \sum_m N_m (1 - N_m) &= \langle N(1 - N) \rangle = \\
&= \frac{\delta}{4\pi} \int \frac{d\xi}{\xi^2 + \delta^2} \{ \cosh[(\xi^2 + J_0^2)^{1/2} (2T)^{-1}] \}^{-2} = \\
&= 0,25, \quad T \gg \delta, \\
&= T(\pi\delta)^{-1}, \quad \delta \gg T \gg J_0, \\
&= (2J_0 T \pi^{-1})^{1/2} \delta^{-1} \exp(-J_0 T^{-1}), \quad J_0 \gg T; \quad (4.25)
\end{aligned}$$

скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают усреднение по ДУС.

В случае  $J_0 \gg \delta$

$$\begin{aligned}
\langle N(1 - N) \rangle &= 0,25 \{ \cosh[J_0(2T)^{-1}] \}^{-2}, \quad T \gg \delta^2(2J_0)^{-1}, \\
&= (2J_0 T \pi^{-1})^{1/2} \delta^{-1} \exp(-J_0 T^{-1}), \quad \delta^2(2J_0)^{-1} \gg T. \quad (4.26)
\end{aligned}$$

Таким образом, в области  $T_{\text{cl}} \gg T \gg \max(\delta, J_0)$  для  $\tau_{\text{e,d}}$  будет наблюдаться зависимость  $\tau_{\text{e,d}}^{-1} = A + B(T/E_0)^g$ , где  $A$  и  $B$  — постоянные одного порядка величины. Поскольку для температур, намного меньших дебаевской, вклад ДУС в скорость релаксации электронов является определяющим, такая зависимость  $\tau_{\text{e,d}}$  приводит к аномальным зависимостям от температуры кинетических коэффициентов металла, содержащего ДУС.

В частности, для вклада ДУС в сопротивление имеем

$$\rho = \rho_{\text{st}} + \rho_0 [1 + 0,5 (TE_0^{-1})^g], \quad (4.27)$$

где  $\rho_{\text{st}}$  — вклад неподвижных дефектов и интерференционный вклад в сопротивление. Температурная зависимость  $\rho$  изображена на рис. 21. Для  $g \sim 0,3$ ,  $E_0 \sim 3 \cdot 10^4$  К и  $T \sim 30$  К температурозависящее слагаемое в  $\rho$  составляет несколько процентов.

Представляет несомненный интерес экспериментальное исследование температурной зависимости сопротивления в соединениях  $\text{Nb}(\text{OH})_x$ ,  $\text{Nb}(\text{NH})_x$  и  $\text{Nb}(\text{CH})_x$ .

## 5. Заключение

Сформулируем наши выводы и предложения.

### 5.1. Выводы

1. Взаимодействие дефектонов с электронами приводит к сильному ИК перенормировкам функции Грина дефектонов и вершины электрон-дефектонного взаимодействия. В результате перенормированные величины приобретают дополнительную температурную зависимость типа  $T^g$ , где величина  $g$  зависит от свойств данного металла, т.е. является неуниверсальной.

2. Взаимодействие с электронами вызывает образование вокруг дефекта электронного облака (электронный поляронный эффект). В результате происходит дополнительное сужение зоны дефектонов, зависящее от температуры как  $T^\beta$ . В случае локализованных дефектонных состояний электронный поляронный эффект уменьшает вероятность перехода в соседнее междоузлие.

3. Дальнействующая часть взаимодействия между дефектами в матрице металла обусловлена упругим взаимодействием и косвенным взаимодействием через фриделевские осцилляции электронной плотности, причем в случае легких примесей внедрения последнее имеет тот же порядок величины, что и упругое взаимодействие между дефектами.

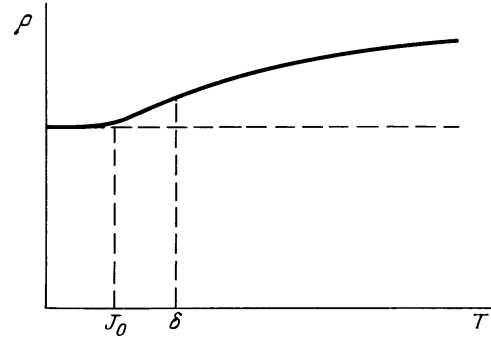


Рис. 21. Температурная зависимость вклада ДУС в сопротивление

4. Поскольку оба этих взаимодействия имеют знакопеременный характер, независимо от вида короткодействующего взаимодействия между дефектами возникает большое число связанных состояний дефектов. Это делает неизбежной при понижении температуры кластеризацию всех подвижных дефектов в металле и нейтральных подвижных примесей в диэлектрике, ведущую либо к расслоению на фазы с высокой и низкой концентрацией дефектов, либо к возникновению кластеров из конечного числа частиц.

5. Образование кластеров резко понижает подвижность дефектов, что, в свою очередь, препятствует достижению термодинамически равновесного состояния. В результате вместо примесных скоплений с большим числом частиц образуются лишь малые кластеры, состоящие из двух-трех частиц.

6. В области температур  $T_{\text{cl}} < T < \theta$  основным механизмом релаксации электронов в металлах с квантовыми дефектами является рассеяние электронов на дефектах.

7. ИК перенормировки, обусловленные электрон-дефектонным взаимодействием, приводят к нетривиальной температурной зависимости скорости релаксации электронной подсистемы, а вместе с ней и кинетических коэффициентов металла, в том числе и электронного вклада в коэффициент поглощения звука.

8. Кластеризация дефектов препятствует проявлению этих зависимостей, сужая диапазон их наблюдения.

9. Нетривиальные температурные зависимости кинетических коэффициентов металла могут наблюдаться и при  $T < T_{\text{cl}}$ , если в результате захвата дефектонов тяжелыми неподвижными дефектами образуются двухуровневые системы.

10. Распределение асимметрии таких ДУС является лоренцевским с характерной шириной, пропорциональной концентрации дефектов. Разбросом значений величины туннельного матричного элемента ДУС в кристалле с малой концентрацией дефектов ( $c \sim 10^{-2}$ ) можно пренебречь.

### 5.2. Предложения

К сожалению, в изученной нами литературе отсутствуют данные об экспериментальных исследованиях температурных зависимостей кинетических коэффициентов разбавленных гидридов металлов ( $x \sim 0,1 - 1\%$ ) в области низких температур.

С точки зрения изложенной выше теории большой интерес вызывают исследования указанных зависимостей в однофазных по составу разбавленных металлгидридах с низкой температурой расслоения на фазы с высокой и низкой концентрацией водорода.

Кроме того, очень важным представляется проведение исследований кинетических коэффициентов в кристаллах ниобия и тантала, содержащих двухуровневые системы, а также поиск и изучение аналогичных ДУС в других металлах.

Авторы благодарны А.П. Жернову за ценные обсуждения.

## Список литературы

1. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: Физматгиз, 1962).
2. Kondo J. *Physica B* **123**, 175 (1984).
3. Андреев А.Ф., Лифшиц И.М. *ЖЭТФ* **56**, 2057 (1969).
4. Magerl A., Rush J.J., Rowe J.M. et al. *Phys. Rev. B* **27**, 927 (1983).
5. Зайцев Р.О., Малкин И.А. *ФНТ* **2**, 69 (1976).
6. Зырянов П.С., Клиггер М.И. *Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках* (М.: Наука, 1976).
7. Морозов А.И. *ЖЭТФ* **77**, 1471 (1979).
8. Yu C.C., Granato A.V. *Phys. Rev. B* **32**, 4793 (1985).
9. Морозов А.И., Сигов А.С. *ФНТ* **13**, 606 (1987).
10. Каган Ю., Прокофьев Н.В. *ЖЭТФ* **90**, 2176 (1986).
11. Kondo J., Soda T. *J. Low Temp. Phys.* **50**, 21 (1983).
12. Roulet B., Gavoret J., Nozieres P. *Phys. Rev.* **178**, 1072 (1969).
13. Nozieres P., Gavoret J., Roulet B. *Phys. Rev.* **178**, 1084 (1969).
14. Nozieres P., De Dominicis C.T. *Phys. Rev.* **178**, 1097 (1969).
15. Yamada K. *Prog. Theor. Phys.* **75**, 1044 (1986).
16. Anderson P.W. *Phys. Rev. Lett* **18**, 1049 (1967).
17. Kondo J. *Physica B* **126**, 377 (1984).
18. Yamada K., Sakurai A., Miyazima S., Hwang H.S. *Prog. Theor. Phys.* **75**, 1030 (1986).
19. Leggett A.J., Chakravarty S., Dorsey A.T. et al. *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
20. Yamada K., Sakurai A., Takeshige M. *Prog. Theor. Phys.* **70**, 73 (1983).
21. Yamada K., Sakurai A., Miyazima S. *Prog. Theor. Phys.* **73**, 1342 (1985).
22. Морозов А.И., Сигов А.С. *Изв. АН СССР. Сер. физ.* **54**, 1432 (1990).
23. Morosov A.I., Sigov A.S. *J. Phys.: Cond. Matter* **3**, 2867 (1991).
24. Kondo J. *Physica B* **84**, 40 (1976).
25. Tsuzuki T. *Sol. State Commun.* **69**, 7 (1989).
26. Tsuzuki T. *Prog. Theor. Phys.* **81**, 770 (1989).
27. Vladar K., Zawadowski A. *Phys. Rev. B* **28**, 1564, 1582, 1596 (1983).
28. Vladar K., Zawadowski A., Zimanyi G.T. *Phys. Rev. B* **37**, 2001, 2015 (1988).
29. *Водород в металлах* (Под ред. Алефельда Г., Фелькля И.) (М.: Мир, 1981).
30. Харрисон У. *Теория твердого тела* (М.: Мир, 1972).
31. Beal-Monod M.T. *J. Phys. and Chem. Solids* **28**, 1261 (1967).
32. Зюзин А.Ю., Спивак Б.З. *Письма ЖЭТФ* **43**, 185 (1986).
33. Булаевский Л.Н., Паников С.В. *Письма ЖЭТФ* **43**, 190 (1986).
34. Соменков В.А., Шильштейн С.Ш. *Фазовые превращения водорода в металлах* (М.: ИАЭ, 1978).
35. Morosov A.I., Sigov A.S. *Sol. State Commun.* **67**, 841 (1988).
36. Морозов А.И., Сигов А.С. *ЖЭТФ* **95**, 170 (1989).
37. Blaschko O., Krexner G., Daou J.N., Vajda P. *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2876 (1985).
38. Blaschko O., Krexner G., Pleschiutchnig J. et al. *Phys. Rev. B* **39**, 5605 (1989).
39. Bonnet J.E., Ross D.K., Faux D.A., Anderson I.S. *J. Less-Common Metals* **129**, 287 (1987).
40. Mc. Kergow M.W., Ross D.K., Bonnet J.E. et al. *J. Phys. C* **20**, 1909 (1987).
41. Blaschko O., Pleschiutchnig J., Vajda P. et al. *Phys. Rev. B* **40**, 5344 (1989).
42. Daou J.N., Vajda P. *J. Phys. F* **12**, L13 (1982).
43. Jensen C.L., Zalesky M.P. *J. Less-Common Metals* **75**, 197 (1980).
44. Bonnet J.E., Juckum C., Lucasson A. *J. Phys. F* **12**, 699 (1982).
45. Vajda P., Daou J.N., Burger J.P. et al. *Phys. Rev. B* **34**, 5154 (1986).
46. Sellers G.J., Anderson A.C., Birnbaum H.K. *Phys. Rev. B* **10**, 2771 (1974).
47. Mokrel C., Wipf H., Neumaier K. *Phys. Rev. Lett.* **40**, 947 (1978).
48. Wipf H., Neumaier K. *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1308 (1984).
49. O'Hara S.G., Sellers G.J., Anderson A.C. *Phys. Rev. B* **10**, 2777 (1974).
50. Poker D.B., Setser G.G., Granato A.V. Birnbaum H.K. *Phys. Chemie* **116**, 39 (1979).
51. Cannelli G., Cantelli R., Vertech G. *J. Less-Common Metals* **88**, 335 (1982).
52. Cannelli G., Cantelli R., Cordero F. *Phys. Rev. B* **34**, 7721 (1986).
53. Bellessa G. *J. de Phys. Lett.* **44**, L-387 (1983).
54. Poker D.B., Setser G.G., Granato A.V., Birnbaum H.K. *Phys. Rev. B* **29**, 622 (1984).
55. Huang K.F., Granato A.V., Birnbaum H.K. *Phys. Rev. B* **32**, 2178 (1985).
56. Morr H., Muller A., Weiss G. et al. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2084 (1989).
57. Richter D., Topler J., Springer T. *J. Phys. F* **6**, L-93 (1976).
58. Wipf H., Magerl A., Shapiro S.M. et al. *Phys. Rev. Lett.* **46**, 947 (1981).
59. Wipf H., Steinbinder D., Neumaier K. et al. *Europhys. Lett.* **4**, 1379 (1987).
60. Steinbinder D., Wipf H., Magerl A. et al. *Europhys. Lett.* **6**, 535 (1988).
61. Neumaier K., Steinbinder D., Wipf H. et al. *Zs Phys. B* **76**, 359 (1989).
62. Wipf H. *Ber. Bunsenges. phys. Chemie* **95**, 438 (1991).
63. Maschhoff K.R., Granato A.V. *J. de Phys. Colloq.* **46**, 87 (1985).
64. Cannelli G., Cantelli R., Cordero F. *Phys. Rev. B* **35**, 7264 (1987).
65. Морозов А.И., Сигов А.С. *ФТТ* **33**, 1772 (1991).
66. Anderson I.S., Berk N.F., Rush J.J. et al. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1439 (1990).
67. Berk N.F., Rush J.J., Udovic T.J., Anderson I.S. *J. Less-Common Metals* **173**, 496 (1991).
68. Morosov A.I., Sigov A.S. *Physica B* **169**, 481 (1991).
69. Kondo J. *Physica B* **132**, 303 (1985).
70. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Физическая кинетика* (М.: Наука, 1979).
71. Морозов А.И., Сигов А.С. *ФТТ* **32**, 3234 (1990).
72. Pippard A.V. *Phil. Mag.* **7** **46**, 1104 (1955).
73. Киттель Ч. *Квантовая теория твердых тел* (М.: Наука, 1967).
74. Абрикосов А.А. *Основы теории металлов* (М.: Наука, 1987).
75. Bhatia A.B., Moore R.A. *Phys. Rev. B* **121**, 1075 (1961).
76. Морозов А.И., Сигов А.С. *ЖЭТФ* **98**, 1454 (1990).
77. Морозов А.И., Сигов А.С. *ЖЭТФ* **104**, 2872 (1993).

**KINETIC PHENOMENA IN METALS WITH QUANTUM DEFECTS****A.I. Morosov, A.S. Sigov***Moscow Institute of Radioengineering, Electronics and Automation**78, Prospekt Vernadskogo, 117454, Moscow, Russian Federation**Tels. (095) 434-7665; (095) 434-9347. Fax (095) 434-8665*

The interaction of quantum defects (defectons) with conduction band electrons is considered, and there are taken properly into account the infrared divergencies caused by this interaction and substantially affecting the width of the energy band of defectons and their contribution to physical properties of metals. The interaction between the defects and with other lattice imperfections is considered as well, along with processes of clustering of quantum defects due to such interaction. There are calculated the temperature dependencies of kinetic coefficients for metals containing free defectons and two-level systems that can arise when quantum defects are trapped by heavy immobile impurities.

Bibliography — 77 references

*Received 10 November 1993*