

УДК 537.635. 539.2

© 1991

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ ЯВЛЕНИЯ ЭХА В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СТЕКЛАХ

Д. А. Паршин, В. Н. Соловьев

Проведено численное исследование различных разновидностей диэлектрического эха в стеклах с учетом спектральной диффузии. Показано, что спектральная диффузия играет важную роль в затухании сигналов ротационного и двухимпульсного эха. В случаях двухимпульсного ротационного и стимулированного эха ее влияние значительно слабее. Затухание сигнала имеет экспоненциальный характер и, скорее всего, связано с тем, что не учтено влияние туннельной прозрачности резонансных двухуровневых систем на величину их взаимодействия с тепловыми двухуровневыми системами.

Известно, что многие низкотемпературные тепловые и акустические свойства стекол проявляют аномалии [1]. Наблюдаемые аномалии хорошо описываются в рамках туннельной модели Андерсона, Халперина, Вармы [2] и Филлипса [3], расширенной и модифицированной Карповым и др. [4]. Туннельная модель предполагает наличие в стеклах атомов или групп атомов, которые могут находиться в двух устойчивых положениях равновесия, разделенных барьером. При низких температурах этот барьер преодолевается путем квантовомеханического туннелирования.

Времена жизни туннельных состояний могут быть достаточно большими. При этом возможно проявление когерентных явлений: акустического и диэлектрического эха [5], аналогов спинового и фононного эха. Исследование явлений эха (спонтанного, стимулированного, ротационного) позволяет получить информацию о временах релаксации туннельных состояний, изучить их взаимодействие с фононами [5].

Теоретическое описание резонансной динамики отождествляемых с туннельными состояниями двухуровневых систем (ДУС) сильно осложнено явлением спектральной диффузии. Суть последнего сводится к следующему [6]. Каждая ДУС создает вокруг себя поле деформаций, величина которых зависит от того, в каком энергетическом состоянии (верхнем или нижнем) находится данная ДУС. Наиболее важны так называемые тепловые ДУС с расстоянием между уровнями $E \approx T$. Под влиянием тепловых фононов они постоянно совершают переходы из одного состояния в другое. В результате этого поле деформаций, создаваемое ими вокруг, флуктуирует во времени. В свою очередь энергия любой ДУС меняется при деформации. Поэтому переходы в окружающих ее тепловых ДУС приводят к тому, что эта энергия флуктуирует во времени.

В настоящей работе проведено численное исследование различных разновидностей эха в диэлектрических стеклах с учетом спектральной диффузии путем моделирования на ЭВМ. Показано, что в ряде случаев спектральная диффузия является основным механизмом, определяющим спад амплитуды эха.

1. Качественные представления

Опишем коротко концепцию ДУС, в рамках которой будет проводиться дальнейшее рассмотрение [2, 3]. Спектр ДУС состоит из двух близко расположенных уровней, расстояние между которыми (энергия ДУС)

$E = \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta^2}$, где Δ — асимметрия потенциала; $\Delta_0 = \hbar \omega_0 e^{-\lambda}$ — туннельная прозрачность барьера; λ — безразмерный параметр, характеризующий перекрытие волновых функций левой и правой ям двухъямного потенциала; ω_0 — частота колебаний в одной яме.

В силу имеющегося в стеклах структурного беспорядка параметры ДУС являются случайными и равномерно распределенными [2, 3]

$$N(\Delta, \lambda) = N_0 = \text{const.} \quad (1)$$

Случайной величиной в силу (1) является и энергия E . Плотность состояний равна

$$W(E, p) = N_0/2p\sqrt{1-p}, \quad p = (\Delta_0/E)^2. \quad (2)$$

Гамильтониан ДУС во внешнем электрическом поле можно записать в виде [5]

$$H = H_0 + H_e = \frac{1}{2}E\hat{\sigma}_z + (\mu'\hat{\sigma}_z + \frac{1}{2}\mu\sigma_z)F(t).$$

Здесь первый член представляет собой статический гамильтониан с собственными значениями $\pm E/2$, а второй описывает взаимодействие системы с зависящим от времени электрическим полем $F(t)$; σ_i — матрицы Паули; член $\mu = 2(\Delta/E)\mathbf{m}$ описывает изменение расстояния между уровнями ДУС в электрическом поле F ; $\mathbf{m} = 1/2(\partial\Delta/\partial\mathbf{F})$ — дипольный момент ДУС; $\mu' = (\Delta_0/E)\mathbf{m}$ — дипольный момент перехода, описывающий переходы между уровнями ДУС.

При рассмотрении динамики ДУС используют формальную аналогию между двухуровневой системой и частицей со спином $1/2$. Решение уравнений Блоха для компонент матрицы плотности ДУС позволяет определить значения феноменологически введенных времен продольной T_1 и поперечной T_2 релаксации [5]. Первое из них связано с переворотом спина, т. е. переходом ДУС из одного состояния в другое. Время поперечной релаксации определяет время сбоя фазы системы, который может происходить за счет как обычной релаксации, так и бездиссипативного спин-спинового взаимодействия разных ДУС.

В приведенной схеме явление спектральной диффузии учитывается соответствующим выбором величины T_2 , что, вообще говоря, является непоследовательным и может привести в некоторых случаях к заведомо неверным результатам [7].

Чтобы лучше представить физическую картину явления, рассмотрим, какие параметры характеризуют спектральную диффузию [6]. Взаимодействие переменного поля частоты ω и резонансной ДУС с расстоянием между уровнями $e = \hbar\omega$ характеризуется матричным элементом $\hbar F = \mu'F_0$, где F_0 — амплитуда поля. Заметим, что величина F есть не что иное, как частота Раби для ДУС, и характеризует частоту когерентных осцилляций заселенности ДУС под действием резонансного возмущения. Величина γ определяет ширину уровней резонансной ДУС и обусловлена испусканием и поглощением фононов с энергией e . Тепловые ДУС совершают переходы (скачки) с частотой $\Gamma \simeq D^2T^3/g\hbar^4v^5$, где D — деформационный потенциал ДУС, g — плотность стекла, v — средняя скорость звука, T — абсолютная температура. Характерная величина изменения энергии резонансной ДУС из-за спектральной диффузии порядка $E_d \equiv \hbar\tau_d = D^2N_0T/gv^2$ (N_0 — не зависящая от энергии плотность ДУС).

2. Описание модели и результаты расчета

Моделируемая система состоит из помещенной в центр некоторого объема V резонансной ДУС и N равномерно распределенных в объеме V тепловых ДУС, радиус-векторы \mathbf{r}_i которых определяются тройкой чисел (x_i, y_i, z_i) , задаваемых генератором псевдослучайных чисел. При этом среднее расстояние между тепловыми ДУС $r_0 = (3V/4\pi N)^{1/3}$. Изменение

собственной частоты резонансной ДУС, обусловленное взаимодействием с тепловыми соседями, равно

$$\hbar\Delta\omega(t) = e(t) - e(0) = \sum_i E_d(r_0/r_i)^3 \xi_i(t).$$

Здесь $\xi_i(t)$ — случайная функция времени, описываемая телеграфным процессом. Она попеременно принимает значения $+1$ и -1 в случайные моменты времени с частотой Γ . Различные функции ξ_i мы считаем некоррелированными.

В течение временного интервала Δt выбранная случайным образом тепловая ДУС совершает скачок. На следующем шаге переворачивается какая-нибудь другая (или та же самая) ДУС и т. д. На каждом шаге для заданной величины отстройки $z = \omega - e/\hbar$ решается система уравнений

$$\begin{aligned} \dot{n} &= -\gamma(n - n_0) - F \operatorname{Re} f, \quad \operatorname{Re} \dot{f} = F(n - 1/2) + s \operatorname{Im} f - \gamma/2 \operatorname{Re} f, \\ \operatorname{Im} \dot{f} &= -s \operatorname{Re} f - \gamma/2 \operatorname{Im} f \end{aligned} \quad (3)$$

для диагональной n и недиагональной f компонент матрицы плотности резонансной ДУС

$$\begin{pmatrix} n & -if e^{i\omega t} \\ if^* e^{-i\omega t} & 1 - n \end{pmatrix}.$$

В (3) $n_0 = [\exp(e/T) - 1]^{-1}$ — равновесная заселенность верхнего уровня резонансной ДУС. При решении системы (3) мы исходили из того, что в промежутках между переворотами тепловых ДУС $s = \text{const}$ и система (3) имеет аналитическое решение. Входящие в уравнения (3) параметры F , γ , Γ являются величинами случайными, и по ним проводилось усреднение. Так, величина F пропорциональна амплитудному значению поля и величине дипольного момента ДУС

$$F = F_0 m \cos(\widehat{Fm}) \sqrt{p}. \quad (4)$$

Мы выбирали случайным образом угол $\varphi = \widehat{Fm}$, находили p (см. ниже) и, согласно (4), значение F , а результаты окончательно усредняли для различных F .

Распределение по Γ (т. е. фактически по туннельной прозрачности тепловых ДУС) имеет вид

$$c(\Gamma) = 1/\Gamma \sqrt{1 - \Gamma/\Gamma_{\max}}, \quad (5)$$

где Γ_{\max} — максимальная частота скачков тепловой ДУС. Замена выражения под корнем единицей, как можно показать, не отразится существенным образом на результатах. То же относится и к распределению по γ . Чтобы разыграть случайные величины Γ и γ , воспользуемся приемом, часто применяемым в методе Монте-Карло [8]. А именно случайную величину ψ с известным распределением можно найти из уравнения

$\int_0^\psi c(x) dx = \eta$, выбрав очередное значение равномерно распределенной в интервале $(0-1)$ случайной величины η . Воспользовавшись распределением (5), получим

$$\Gamma = \Gamma_{\min} \exp[-\eta \ln(\Gamma_{\min}/\Gamma_{\max})],$$

где Γ_{\min} , Γ_{\max} — минимальная и максимальная из частот скачков тепловой ДУС. Аналогично выглядит и выражение для получения величины γ . Параметр p при этом определяется по формуле $p = \gamma/\gamma_{\max}$. Наконец, результаты расчетов усреднялись по конфигурациям тепловых ДУС.

Нами проведены расчеты для следующих вариантов диэлектрического эха: двухимпульсного, трехимпульсного, ротационного и двухимпульсного ротационного. В случае двухимпульсного (спонтанного) эха (рис. 1) импульс включался в течение времени τ_p , затем на протяжении времен-

ного интервала $\tau_{12} > \tau_p$ отключался и снова включался на время τ_p . Сигнал эха наблюдался в момент времени $2(\tau_p + \tau_{12})$. Сигнал стимулиро-

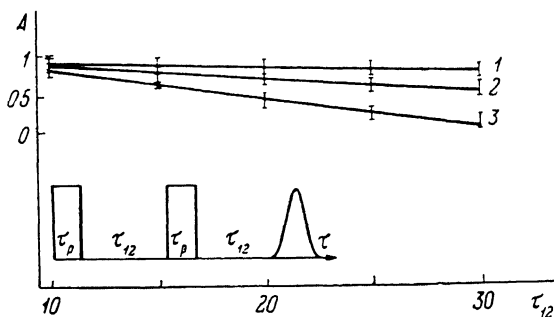


Рис. 1. Зависимость амплитуды A двухимпульсного эха от времени задержки τ_{12} между импульсами при $E_d=0$ (1), 0.5 (2), 2.0 (3).

ванного (трехимпульсного) эха наблюдался в момент времени $3\tau_p + 2\tau_{12} + \tau_{13}$, если в описанной выше схеме эксперимента через время τ_{13} после второго импульса подается третий импульс (рис. 4).

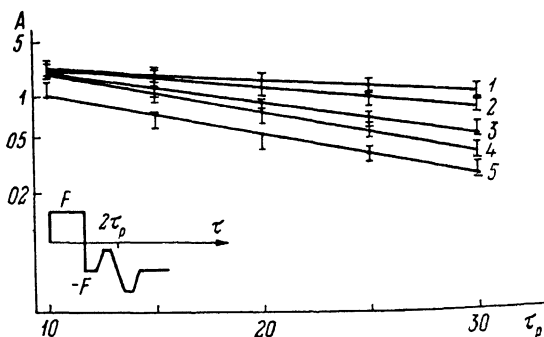


Рис. 2. Влияние спектральной диффузии на величину амплитуды ротационного эха. $E_d=0$ (1), 0.5 (2), 5 (3), 8 (4), 10 (5).

Двухимпульсное ротационное эхо отличается от спонтанного тем, что второй импульс включается с фазой $-F$ и сигнал эха наблюдается на фоне включенного импульса. Он имеет характерный вид, проходя через

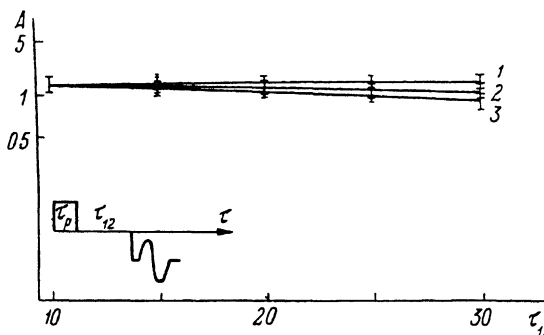


Рис. 3. Зависимость амплитуды двухимпульсного ротационного эха от времени задержки τ_{12} . $E_d=0$ (1), 5 (2), 10 (3).

нуль при $t=2\tau_p + \tau_{12}$ (рис. 3). Ротационное эхо моделируется аналогично двухимпульсному ротационному с той лишь разницей, что фаза поля инвертируется без выключения импульса (рис. 2). Два последних типа эха недавно наблюдались в стеклах в эксперименте Баера и Шикфуса [5].

Расчеты проводились при следующих значениях параметров модели: число тепловых ДУС $N=50$; объем, в котором они сгенерированы, $V=8$; число конфигураций, по которым проводилось усреднение, $K=20$; шаг интегрирования по отстройке $\Delta z=0.5$. Значения параметров Γ_{\min} , Γ_{\max} , γ_{\min} , γ_{\max} равнялись в безразмерных единицах соответственно 0.1, 10, 0.01, 1. Величина E_d выбиралась в пределах 0.1—10, $F_0=20$. Временные интервалы измерялись в единицах $(\Gamma_{\max}N)^{-1}$.

Результаты расчетов приведены на рис. 1—4. На вставках изображены схемы формирования эха и качественный вид сигнала. Видно, что наиболее сильно спектральная диффузия влияет на амплитуду двухимпульсного эха. Менее чувствительно к спектральной диффузии ротационное эхо. Наименее подвержены влиянию спектральной диффузии двухимпульсное ротационное и трехимпульсное эхо.

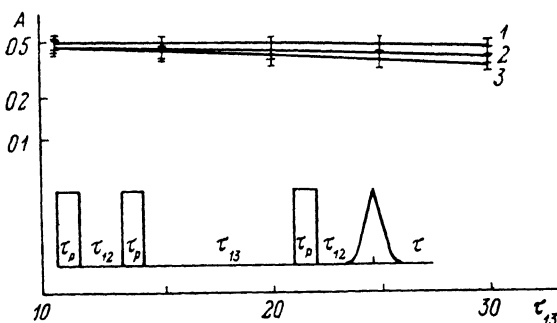


Рис. 4. Спад амплитуды стимулированного эха от расстояния между первым и третьим импульсами τ_{13} . $E_d=0$ (1), 0.5 (2), 1.0 (3).

Из результатов расчета следует, что спектральная диффузия играет важную роль в затухании сигналов ротационного и двухимпульсного эха (рис. 1, 2) и ее влияние гораздо менее выражено в случаях двухимпульсного ротационного и трехимпульсного эха (рис. 3, 4). Последнее отмечалось также в работе [5].

Во всех исследованных случаях в пределах погрешности расчета затухание носит экспоненциальный характер. Следует, однако, отметить, что при расчете не учитывалось влияние туннельной прозрачности резонансных ДУС на величину их взаимодействия с тепловыми ДУС. Учет этого взаимодействия может (как это показано в [9]) привести к неэкспоненциальному спаду амплитуды эха.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Amorphous Solids. Low Temperature Properties // Ed. W. A. Phillips. Berlin—Heidelberg—New York: Springer—Verlag, 1981. 165 p.
- [2] Anderson P. W., Halperin B. I., Varma C. M. // Phil. Mag. 1972. V. 25. N 1. P. 1—9.
- [3] Phillips W. A. // J. Low Temp. Phys. 1972. V. 7. N 2. P. 351—357.
- [4] Карпов В. Г., Клянгер М. И., Игнатьев Ф. Н. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. № 2. С. 761—775.
- [5] Baier G., Schickfus M. V. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 14. P. 9952—9957.
- [6] Galperin Yu. M., Gurevich V. L., Parshin D. A. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 17. P. 10339—10349.
- [7] Laikhtman B. D. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. N 6. P. 3555—3559.
- [8] Бусленко Н. П., Голенко Д. И., Соболев И. М. и др. Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло). М.: ГИФМЛ, 1962. 332 с.
- [9] Гуревич В. Л., Мурадов М. И., Паршин Д. А. // ЖЭТФ. 1990. Т. 97. № 5. С. 2114—2126.