

Идентификация бифононов по особенностям угловой и энергетической зависимости сечения неупругого рассеяния разваливающих бифононы нейтронов

© О.А. Дубовский, А.В. Орлов

Физико-энергетический институт,
249020 Обнинск, Калужская обл., Россия

(Поступила в Редакцию 8 октября 1997 г.)

С использованием дисперсионных зависимостей и волновых функций бифононных и диссоциированных двухфононных состояний ангармонических кристаллов определено сечение неупругого рассеяния нейтронов, разваливающих бифононы на несвязанные, взаимно рассеивающиеся вследствие ангармонизма фононы. Найдены особенности угловой и энергетической зависимости сечения, которые могут быть использованы при анализе экспериментальных данных для идентификации бифононов и для последующего, возможно существенного изменения системы существующих, основанных только на соображениях энергетического баланса критериев классификации серий спектральных резонансов, предположительно отвечающих связанным многофононным состояниям различной кратности. При фиксированном большом сбросе энергии нейтрона сечение максимально при "нелобовом" столкновении нейтрона и бифонона с индикатрисой в виде лепестка, при промежуточных сбросах сечение имеет наибольшие из возможных значения при всех углах столкновения, при малых сбросах сечение максимально при "лобовом" столкновении в узком интервале углов. Резонансный пик энергетической зависимости сечения при фиксированном угле, находящийся при больших углах на низкоэнергетическом крае ограниченной полосы энергий, при уменьшении угла, постепенно увеличиваясь, смещается к высокоэнергетическому краю постоянно сужающейся и смещающейся в низкоэнергетическую область полосы. Однако при уменьшении угла ниже критического продолжающий увеличиваться резонансный максимум изменяет направление и смещается обратно к низкоэнергетическому краю. Показано, что, несмотря на сильные осцилляции бифононной волновой функции при отрицательной дисперсии фононов, сечение не зависит от знака дисперсии, т. е. сохраняется, по-видимому, универсальная закономерность независимости от этого знака, установленная ранее только для дисперсионной зависимости и константы затухания бифононов.

В настоящее время ведутся экспериментальные и теоретические исследования спектров нелинейных связанных многоэкситонных возбуждений и многофононных колебаний: биэкситонов, бифононов, трифононов и т. д. [1–5]. Для изучения этих возбуждений и колебаний в различных кристаллических материалах — полупроводниках, гидридах металлов, ионных кристаллах — используются разные методы; рассеяние медленных нейтронов, оптическое возбуждение лазерами в видимой и ИК-области, рассеяние электронов [6–10]. Наблюдаемые при этом в спектрах неупругого рассеяния нейтронов и фотонов узкие интенсивные пики вблизи широких полос диссоциированных двухфононных и трехфононных состояний идентифицируются как связанные с бифононами и трифононами. При этом экспериментально найдено лишь несколько первых компонент из мультиплета 2, 3, 4, 5, ... -кратных многофононных связанных колебаний, включающих еще дополнительно и мультиплеты термов возбужденных связанных состояний внутри области спектра, отвечающей каждой отдельной кратности [4–13]. Идентификация узких резонансных пиков вблизи широких полос диссоциированных колебаний как бифононов и трифононов проводится в настоящее время по общим соображениям энергетического баланса. Если в однофононной области спектра наблюдается полоса, например, оптических колебаний с волновым вектором \mathbf{k} и энергией $E_1 = E(\mathbf{k})$, а в высокочастотной области двойных состояний ниже минимума полосы двухфононных колебаний $E_2 = E(\mathbf{k}_1) + E(\mathbf{k}_2)$ наблюдается узкий

пик с энергией $E_{bp} = E_{2,min} - 2A$, то в том случае, когда в однофононной области спектра при энергии $E_{1,min} - A$ нет какой-либо особенности, этот узкий пик E_{bp} может быть связан с ангармонизмом колебаний, возможностью понижения энергии двух фононов на энергию связи $2A$ при их связывании в бифонон. Прямых же доказательств того, что данный пик отвечает связанному бифонону или трифонону, кроме энергетических соображений до настоящего времени не существует. Как следствие этого обстоятельства для объяснения природы указанных пиков при интерпретации результатов уже многочисленных экспериментов в этом направлении наряду с основным, указанным выше, объяснением выдвигаются и другие версии существования локальных состояний, связанных с дефектами различного типа, или особенностей в плотности состояний, например, для алмаза [1] и т. д. Отметим для дальнейшего рассмотрения, что в гидриде ванадия константа ангармонизма A отрицательна [6], а в алмазе узкая, предположительно бифононная линия находится над полосой двухфононных диссоциированных состояний [1].

В настоящей работе для идентификации пиков, предположительно отвечающих связанным многофононным состояниям, предлагается использовать анализ особенностей угловой и энергетической зависимости сечения неупругого рассеяния нейтронов или фотонов, приводящего к развалу бифонона, трифонона и т. д. Отметим, что угловая зависимость сечения неупругого рассеяния нейтронов с генерацией бифононов и соответствующим

сбросом нейтроном всей энергии E_{br} бифонона слабо зависит от детальной структуры бифонона, поскольку связана, например, в терминах диаграмм Фейнмана с взаимодействием двух испускаемых фононов в конечном состоянии. При таком рассеянии интенсивности генерации бифонона как единого целого связанного комплекса из двух фононов и генерации одного фонона, конечно, различаются, например, из-за большей эффективной массы бифонона, однако и в том и в другом случае происходит генерация одной квазичастицы, пусть и более сложной в случае бифонона. Более существенного различия следует ожидать в том случае, когда при неупругом рассеянии падающий нейтрон производит развал бифонона на свободные колебания с потерей нейтроном только энергии связи бифонона $2A$ или (как обратный процесс) нейтрон подхватывает энергию связи бифонона у двух свободных колебаний, коллапсирующих в бифонон. При этом, например, при подхвате не только конечное бифононное состояние, но и начальное двухфононное диссоциированное состояние существенно зависит от соответствующего вида потенциала ангармонического взаимодействия, константы ангармонизма A , поскольку при таком взаимодействии диссоциированные двухфононные состояния имеют вид взаимодействующих взаимно рассеивающихся волн однофононных колебаний. Таким образом, двукратно проявляется вид потенциала фонон-фононного взаимодействия, что, как показано далее, и приводит к особенностям в спектрах неупругого рассеяния нейтронов с развалом бифонона или подхватом энергии связи бифонона. В данной работе мы рассматриваем первый из этих процессов, и найденные особенности сечения имеют следующий характер.

При фиксированном большом сбросе энергии нейтрона сечение максимально при нелобовом столкновении нейтрона и бифонона с индикатрисой рассеяния в виде лепестка, при промежуточных сбросах сечение имеет наибольшие из возможных значения при всех углах столкновения, при малых сбросах сечение максимально при лобовом столкновении в узком интервале углов. Резонансный пик энергетической зависимости сечения при фиксированном угле, находящийся на низкоэнергетическом крае ограниченной полосы энергий, при уменьшении угла, постепенно увеличиваясь, смещается к высокоэнергетическому краю постоянно сужающейся и смещающейся в низкоэнергетическую область полосы. Однако при уменьшении угла ниже некоторого критического значения продолжающий увеличиваться резонансный максимум начинает смещаться обратно к низкоэнергетическому краю полосы. В настоящей работе показано, что, несмотря на сильные осцилляции бифононной волновой функции при отрицательной дисперсии фононов и монотонное поведение при положительной дисперсии, сечение не зависит от знака дисперсии, т. е. сохраняется, по-видимому, универсальная закономерность независимости от этого знака, установленная ранее только для дисперсионной зависимости и константы затухания бифононов [1,3].

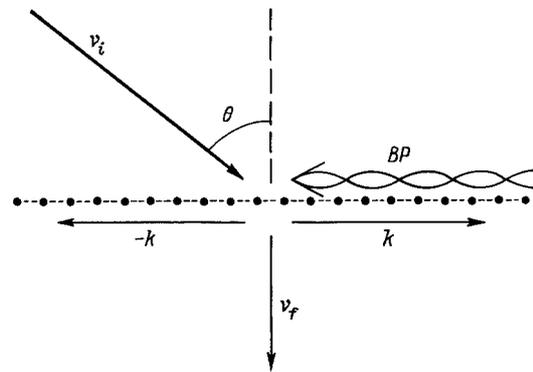


Рис. 1. Геометрия нейтрон-бифононного неупругого рассеяния.

При экспериментальном осуществлении процессов развала бифонона или подхвата его энергии связи, конечно, возникает проблема с предварительным созданием достаточно большой заселенности бифононных (двухфононных) состояний, которые затем будут разваливаться (связываться) при взаимодействии с нейтронами. Однако эта проблема может быть решена, как и ранее в оптических экспериментах, например, предварительным интенсивным лазерным облучением, приводящим к генерации бифононов с соответствующим лазерной частоте волновым вектором вследствие прямых вертикальных переходов с какой-либо низколежащей полосы локальных состояний со слабой дисперсией. Возможно, что создаваемые в настоящее время установки нового поколения с большим потоком нейтронов, сопряженные с высокоразрешающими нейтронными спектрометрами, позволят проводить эксперименты, аналогичные проводимым сейчас в нелинейной оптике экспериментам с предварительной генерацией макроскопической плотности экситонов, на которых затем рассеивается свет. Отметим, что развитая ниже теория может быть использована при исследовании не только относительно высокочастотных многофононных колебаний с энергией $\sim 200-700$ meV [6,7], но и низкочастотных акустических бифононов с энергиями ~ 10 meV [14], для которых и проблема заселенности более легко решается.

Рассмотрим доступную для анализа и пригодную для дальнейшего развития схему процесса неупругого рассеяния двумерных нейтронных волн на плоской одномерной системе кристаллических цепочек в геометрии, приведенной на рис. 1. Отметим, что данная схема вполне может быть использована применительно к реальным кристаллам, поскольку, например, имеются экспериментальные данные о квазиодномерном, в виде цепочек, внедрения атомов водорода и дейтерия в гидридах переходных металлов, например в гидриде лютетия [15]. В верхней полуплоскости на рис. 1 над кристаллической цепочкой схематически представлено начальное состояние: падающий под углом θ к нормали нейтрон ν_i с большой энергией (жирная длинная стрелка) и сталкивающийся с ним (угол столкновения $(\pi/2) - \theta$)

бифонон ВР с волновым вектором K . Рассматривается геометрия неупругого рассеяния, вполне реализуемая на нейтронных спектрометрах, когда в конечном состоянии, представленном в нижней полуплоскости рис. 1, фиксируется нейтрон ν_f с меньшей энергией (короткая тонкая стрелка), вылетающий перпендикулярно оси цепочки. При этом угол θ таков, что проекция волнового вектора падающего нейтрона ν_i на ось цепочки противоположна по знаку волновому вектору бифонона, а модули этих величин равны или отличаются на конечное число векторов обратной решетки. Поскольку в начальном состоянии суммарный волновой вектор вдоль оси цепочки равен нулю, в конечном состоянии, так как нейтрон вылетает перпендикулярно цепочке, эта проекция также равна нулю, и процесс развала бифонона идет с генерацией двух несвязанных фононов с противоположно направленными волновыми векторами $\pm k$. Развита ниже для данной геометрии теория неупругого рассеяния нейтронов с развалом бифононов может быть использована при соответствующем обобщении применительно и к более сложным условиям опыта (например, при наклонном вылете нейтронов, при заполнении всей зоны бифононных состояний, для исследования процессов подхвата энергии связи бифонона с инвертированием начальных и конечных состояний и т.д.).

В соответствии с общей теорией [1,3] гамильтониан H_{ph} подсистемы оптических фононов при учете ангармонизма колебаний, т.е. при учете фонон-фононного взаимодействия, имеет в узельном представлении вторичного квантования следующий вид:

$$H_{ph} = \sum_n E_0 B_n^+ B_n + \sum_{nm} V_{nm} B_n^+ B_m - A \sum_n B_n^+ B_n^+ B_n B_n, \quad (1)$$

где E_0 — энергия оптических фононов без учета зонной составляющей V_{nm} , определяющей перенос фононов, B_n^+ , B_n — соответствующие Бозе-операторы колебательных возбуждений в узле b , A — константа ангармонизма контактного фонон-фононного взаимодействия. При учете взаимодействия ближайших соседей $V_{nm} = V \delta_{n,m \pm 1}$ однофононные состояния с волновым вектором k имеют энергию $E(k) = E_0 + 2V \cos |k|$ (далее, если специально не указано, все волновые векторы в единицах $1/a$, где a — постоянная кристаллической цепочки). Двухфононные состояния такой системы ищутся в виде [1,3].

$$|2\rangle = \sum_{nm} \Psi_{nm} B_n^+ B_m^+ |0\rangle, \quad (2)$$

где Ψ_{nm} — волновая функция, $|0\rangle$ — основное состояние. Волновая функция Ψ_{nm} и энергия E двухфононных состояний определяются как решение уравнения Шредингера

$$H_{ph}|2\rangle = E|2\rangle. \quad (3)$$

Подстановка (2) в (3) приводит к системе уравнений для Ψ_{nm} и E

$$(E - 2E_0)\Psi_m = V(\Psi_{n+1,m} + \Psi_{n-1,m} + \Psi_{n,m+1} + \Psi_{n,m-1}) - 2A\Psi_{nm}\delta_{nm}. \quad (4)$$

Решение системы уравнений (4), отвечающее связанному бифононному состоянию с волновым вектором K и энергией $E = E_{bp}(K)$, имеет следующий вид [1,3]:

$$\Psi_{nm} = \Psi_{nm}^{BP}(K) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\text{th } \chi} \left(-\frac{V}{|V|} \right)^{n-m} \times \exp \left(i \frac{K}{2} (n+m) - \chi |n-m| \right), \quad (5a)$$

$$E = E_{BP}(K) = 2E_0 - \sqrt{(2A)^2 + [4V \cos(K/2)]^2}, \quad (5b)$$

$$\chi = \chi(K) = \text{Arsh} \left(A / [2|V| \cos(K/2)] \right), \quad (5c)$$

где N — число узлов в основном объеме, $\chi = \chi(K)$ определяет пространственное затухание амплитуды бифононного состояния, соответственно $1/\chi$ определяет радиус этого связанного состояния. Отметим, что при данной $A > 0$ бифононная волновая функция в зависимости от $|n-m|$ равномерно затухает при $V < 0$, однако при $V > 0$ это затухание происходит с быстрыми осцилляциями. Вместе с тем зависимости $E = E_{bp}(K)$ и $\chi(K)$ в обоих случаях тождественно совпадают. При $A < 0$ знаки V для двух указанных типов затухания инвертируются. Заметим, что развитая теория при незначительной модификации вполне может быть использована для определения сечения подхвата нейтроном энергии связи бифонона с $A < 0$, разваливающегося при взаимодействии с нейтроном на свободные фононы. Возможно, именно для алмаза предлагаемый эксперимент с развалом бифонона позволит разрешить обсуждаемый длительное время в литературе спорный вопрос: отвечает ли на самом деле упомянутая выше наблюдаемая линия бифонону [1]. Отметим, что для гидридов металлов в связи со сложностью приготовления монокристаллов вопрос о знаке V , т.е. знаке дисперсии фононов, экспериментально недостаточно изучен.

Решение системы уравнений (4), отвечающее диссоциированному состоянию — двум взаимно рассеивающимся фононам с волновыми векторами $\pm k$ и энергией $E = 2E(k)$, — имеет следующий вид:

$$\Psi_{nm}^{dis}(k) = (2/N^2) \left(\cos[k(n-m)] + T \exp(ik|n-m|) \right), \quad (6a)$$

$$E = 2E(k) + 4V \cos |k|, \quad (6b)$$

$$T(k) = \left[-1 + i(2V/A) \sin |k| \right]^{-1}, \quad (6c)$$

где второе слагаемое в правой части (6a) представляет в приведенной к одночастичной проблеме двух тел рассеянную волну, $T(k)$ — соответствующая амплитуда рассеяния.

При вычислении сечения неупругого рассеяния нейтронов для гамильтониана нейтрон-фононного взаимодействия используем приближение прямого контактного взаимодействия частиц

$$H_{int} = \sum_n W \nu_n^+ \nu_n B_n^+ B_n, \quad (7)$$

где W — энергия взаимодействия, ν_n^+ , ν_n — соответствующие нейтронные операторы вторичного квантования.

Операторы ν_n в узельном представлении на цепочке составляют подпространство нейтронных операторов ν_n на соответствующей двумерной кристаллической сетке $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$, включающей цепочку $n_1 = n, n_2 = 0$. Переход от ν_n к нейтронным операторам вторичного квантования ν_q в представлении двумерных волновых векторов $\mathbf{q} = (q_1, q_2)$ дается соотношениями

$$\nu_n = \sum_{\mathbf{q}} \nu_q \varphi_n(\mathbf{q}), \quad \varphi_n(\mathbf{q}) = (1/N)^2 \exp(i\mathbf{q}\mathbf{n}).$$

Отметим, что для рассеяния нейтронов на гидридах металлов гамильтониан взаимодействия H_{int} в (7) непосредственно определяется прямым нейтрон-протонным взаимодействием. Детальный расчет этого взаимодействия с представлением в виде (7), включающий переход от операторов ν_q^+, ν_q, x_n , где x_n — оператор смещения протонов [12], к операторам $\nu_n^+, \nu_n, B_n^+, B_n$ в (7), на данном этапе расчетов представляется излишним. В первом борновском приближении, обычно используемом при исследовании рассеяния нейтронов [16], дважды дифференциальное сечение рассматриваемого неупругого процесса определяется следующим образом:

$$\sigma''(\varepsilon, \theta) = \frac{d^2\sigma}{d\varepsilon d\theta} = \sigma_0 \sum_f |\langle f | H_{\text{int}} | i \rangle|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i), \quad (8)$$

где σ_0 — постоянный множитель, точное значение которого при исследовании общих закономерностей энергетической и угловой зависимости σ'' не является существенным. В (8) $|i\rangle, |f\rangle$ — начальное и конечное состояния (рис. 1) с соответствующими энергиями ε_i и ε_f , определенные следующим образом:

$$|i\rangle = \sum_{nmp} \Psi_{nm}^{\text{bp}}(-K) \varphi_p(\mathbf{q}_i) B_n^+ B_m^+ \nu_{q_i}^+ |0\rangle,$$

$$\varepsilon_i(K) = (\hbar^2 \mathbf{q}_i^2 / 2M) + E^{\text{BP}}(K), \quad (9a)$$

$$|i\rangle = \sum_{nmp} \Psi_{nm}^{\text{dis}}(k) \varphi_p(\mathbf{q}_f) B_n^+ B_m^+ \nu_{q_f}^+ |0\rangle,$$

$$\varepsilon_f(k) = (\hbar^2 \mathbf{q}_f^2 / 2M) + 2E(k), \quad (9b)$$

где M — масса нейтрона. Для упрощения расчетов будем полагать, что осуществляется сильный сброс энергии нейтрона в решетку, так что энергия и волновой вектор вылетающего нейтрона малы по сравнению с входными величинами ($|\mathbf{q}_i| \gg |\mathbf{q}_f|$). В этом случае при фиксированном сбросе энергии в решетку

$$\varepsilon = (\hbar^2 / 2M) (|\mathbf{q}_i|^2 - |\mathbf{q}_f|^2) \quad (10)$$

волновой вектор бифонона и синус угла падения связаны линейной зависимостью $K = \sin \theta (2M\varepsilon / \hbar^2)^{1/2}$, и, следовательно, зависимость сечения σ'' от K легко трансформируется в угловую зависимость $\sigma''(\theta)$. При нормальном падении $K = \theta = 0$, а в другом предельном

случае касательного падения значению волнового вектора на границе зоны Бриллюэна $K = \pi/a$ отвечает предельный угол $\theta \approx \pi/2$ при сбросе $\varepsilon \approx 20 \text{ meV}$ и постоянной цепочки $a \approx 1 \text{ \AA}$, что вполне приемлемо с точки зрения возможностей экспериментальной техники. При этом для перехода от волнового вектора бифонона K к углу рассеяния θ можно использовать соотношение

$$Ka = \sin \theta \sqrt{2M\varepsilon a^2 / \hbar^2}. \quad (11)$$

Подстановка (5), (6), (9) в (8) дает следующее соотношение для дважды дифференциального сечения рассеяния:

$$\sigma'' = \sigma_0 \int dk \left| \sum_{nm} \Psi_{nm}^{*\text{BP}}(K) \Psi_{nm}^{\text{dis}}(k) S(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_f) \right|^2 \times \delta[\varepsilon_f(k) - \varepsilon_i(K)], \quad (12a)$$

$$S(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_f) = \varphi_n^*(\mathbf{q}_i) \varphi_n(\mathbf{q}_f) + \varphi_m^*(\mathbf{q}_i) \varphi_m(\mathbf{q}_f). \quad (12b)$$

Детальные расчеты с подстановкой явного вида $\Psi^{\text{BP}}, \Psi^{\text{dis}}, \varphi$ после частичных суммирований, дающих, естественно, условие сохранения проекции полного волнового вектора на ось цепочки, приводит к соотношению для $\sigma''(\varepsilon, \theta)$

$$\sigma''(\varepsilon, \theta) = \sigma_0 \text{th } \chi \int dk |R(K, k)|^2 \delta[\varepsilon_f(k) - \varepsilon_i(K)], \quad (13)$$

где

$$R(K, k) = \sum_m \left(-\frac{V}{|V|} \right)^m \exp \left(-i \frac{K}{2} m - \chi(K) |m| \right) \times [\cos(km) + T(k) \exp(ik|m|)].$$

Суммы, входящие в (13), равны

$$\sum_m (-V/|V|)^m \cos(km) \exp[-i(K/2)m - \chi|m|] = \alpha(K, k) / \beta(K, k), \quad (14a)$$

$$\sum_m (-V/|V|)^m \exp[ik|m| - i(K/2)m - \chi|m|] = \gamma(K, k) / \beta(K, k), \quad (14b)$$

где

$$\alpha(K, k) = \text{sh } \chi [\text{ch } \chi + \cos k \cos(K/2)], \quad (15a)$$

$$\beta(K, k) = [\text{ch } \chi + \cos k \cos(K/2)]^2 - \sin^2 k \sin^2(K/2), \quad (15b)$$

$$\gamma(K, k) = \gamma'(K, k) + \gamma''(K, k) = \text{sh}(\chi - ik) \times [\text{ch}(\chi + ik) \mp (K/2)]. \quad (15c)$$

В соотношениях (15) в знаке \mp используется минус при $V < 0$ и плюс при $V > 0$. После интегрирования по k в (13) с учетом (14) и (15) имеем окончательно для дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния соотношение

$$\sigma''(\varepsilon, \theta) = \sigma_0 \frac{\text{th } \chi}{\sin k_0} \frac{[\alpha_0 + T_0' \gamma_0' - T_0'' \gamma_0'']^2 + [T_0' \gamma_0'' + T_0'' \gamma_0']^2}{\beta_0^2},$$

$$\alpha_0 \equiv \alpha(K, k_0), \quad \beta_0 \equiv \beta(K, k_0),$$

$$\gamma_0 \equiv \gamma(K, k_0), \quad T_0 \equiv T(K, k_0), \quad (16)$$

где волновой вектор $k_0 = k_0(K)$ определяется из закона сохранения энергии

$$4V \cos k_0 = \varepsilon - \sqrt{(2A)^2 + [4V \cos(K/2)]^2}, \quad (17)$$

T_0' и T_0'' — действительная и мнимая части амплитуды рассеяния T_0 , определенной в (6с).

Отметим примечательный факт. Изменение знаков в (15) при переходе от $V < 0$ к $V > 0$ не изменяет сечение σ'' . Это связано с тем обстоятельством, что в законе сохранения энергии (17) изменение знака V приводит к изменению величины $k_0 \rightarrow \pi - k_0$ с изменением знака $\cos k_0$. В соотношениях (15а) для действительных α_0 и β_0 таким образом компенсируется изменение знака, а в комплексной величине γ_0 в (15б) при компенсации изменения знаков в действительной части происходит изменение знака мнимой части, т.е. осуществляет переход к комплексно-сопряженной величине γ_0^* , что не изменяет в соответствии с (12) величины σ'' . Таким образом, несмотря на то что при $V > 0$ бифононная волновая функция Ψ_{mm}^{BP} (5а) сильно осциллирует при изменении $(n - m)$ и в интегральных соотношениях типа (12) на первый взгляд должна вносить нулевой вклад в σ'' , тем не менее и в этом случае сохраняется та же универсальная закономерность независимости от знака V для σ'' , что и для бифононного дисперсионного соотношения и константы затухания χ в (5б) и (5с), также не зависящих от знака V .

На рис. 2–4 показаны графики зависимости $\sigma''(\varepsilon, \theta)$ при фиксированных сбросах ε , представляющие угловую зависимость сечения, и при фиксированных углах θ , представляющие резонансную энергетическую зависимость сечения. Анализ рис. 2–4 показывает, что сечение неупругого рассеяния имеет специфические особенности угловой и энергетической зависимости, которые и могут служить своеобразными идентификаторами участия в процессе неупругого рассеяния нейтронов именно бифононных состояний при наличии ангармонизма колебаний.

На рис. 2 для демонстрации общего вида угловой и энергетической зависимости сечения в условиях данной геометрии (рис. 1) представлена зависимость сечения от волнового вектора бифонона, связанного с θ соотношением (11), при последовательно изменяющемся значении сброса энергии нейтроном. Значения параметров выбраны близкими к реальным значениям,

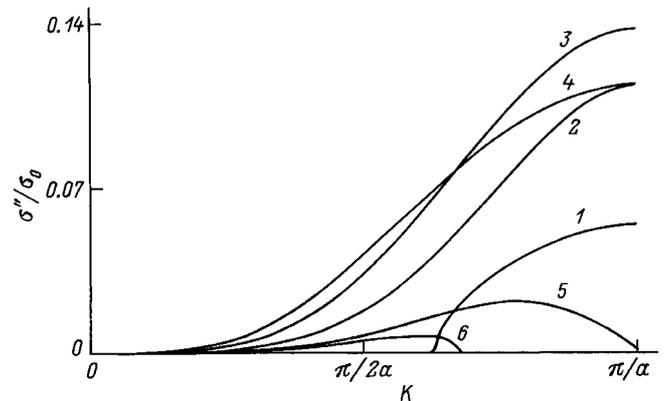


Рис. 2. Зависимость сечения рассеяния нейтрона от волнового вектора бифонона.

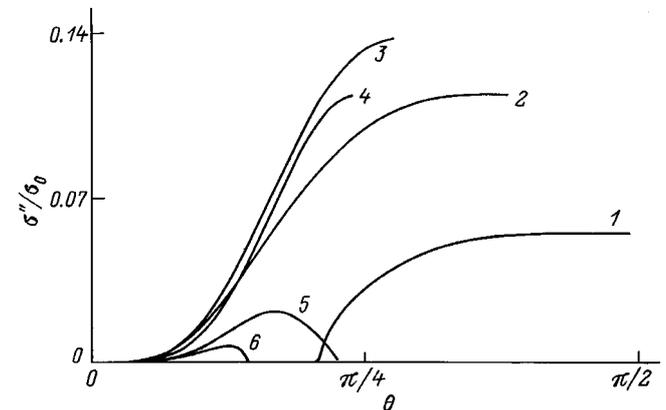


Рис. 3. Угловая зависимость сечения неупругого рассеяния нейтрона при фиксированных сбросах энергии.

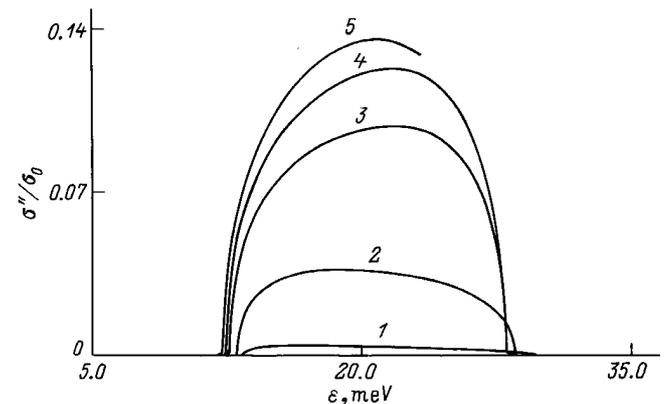


Рис. 4. Зависимость сечения рассеяния от сброса энергии нейтрона при фиксированных углах рассеяния.

наблюдаемым экспериментально для бифононных колебаний атомов водорода в гидридах металлов. В различных гидридах переходных металлов константа ангармонизма изменяется от ~ 5 до ~ 20 meV [6,7,15]. Ширины однофونонной зоны оптических колебаний

водорода составляют величины $\sim 5-15$ meV. Для четкого отделения бифононной зоны несвязанных двухфононных колебаний при расчетах были использованы следующие вполне согласующиеся с экспериментальными данными значения параметров: $A = 10$ meV, $V = -2$ meV. Для наглядности мы используем конкретные величины для A и V , хотя результат расчета можно представить для фиксированного безразмерного параметра A/V , а энергетическую зависимость (рис. 4) от величины ε/V . При этих значениях параметров фиксируются полоса диссоциированных двухфононных состояний, отщепление от этой полосы зоны бифононов и собственно бифононная зона. На рис. 2 представлена зависимость $\sigma''(K)$ для шести последовательно возрастающих значений сброса в интервале $\varepsilon_1 - \varepsilon_9$, $\varepsilon_1 = 2A + 4V = 12$ meV, $\varepsilon_9 = [(2A)^2 + (4V)^2]^{1/2} - 4V = 29.5$ meV, где только и существуют нули δ -функции в (12), (17). При увеличении сброса от граничного значения ε_1 до величины $\varepsilon_3 = [(2A)^2 + (4V)^2]^{1/2} = 13.5$ meV вблизи границы зоны Бриллюэна $K = K_B \equiv \pi/a$ появляется узкая, постепенно расширяющаяся область K , где сечение, имея максимум при $K = K_B$, увеличивается с ростом ε (кривая 1, $\varepsilon = \varepsilon_2 = 12.5$ meV). Затем при $\varepsilon > \varepsilon_3$ существует неупругое рассеяние во всей зоне Бриллюэна $0 < K < K_B$ с максимумом при $K = K_B$ и общим увеличением сечения при росте ε (кривая 2, $\varepsilon = \varepsilon_4 = 15$ meV). Максимальное значение сечения наблюдается при $\varepsilon = \varepsilon_5 = 2A = 20$ meV (кривая 3). При дальнейшем увеличении ε начинается уменьшение сечения с относительным увеличением крыла σ'' при малых K (кривая 4, $\varepsilon = \varepsilon_6 = 25$ meV). При приближении ε к энергии $\varepsilon_7 = 2A - 4V = 28$ meV появляется максимум внутри зоны Бриллюэна, превышающий значение $\sigma''(K = K_B)$ на границе. При энергии $\varepsilon = \varepsilon_7$ (кривая 5), величина $\sigma''(K = K_B) = 0$ и максимум находится при $K \cong (3/4)K_B$. При дальнейшем увеличении ε в интервале $\varepsilon_7 < \varepsilon < \varepsilon_9$ этот максимум уменьшается и смещается в сужающуюся вблизи $K \cong 0$ область волновых векторов, где существуют нули δ -функции в (12), (17) (кривая 6, $\varepsilon = \varepsilon_8 = 28.4$ meV). Все эти особенности зависимости $\sigma''(\varepsilon, \theta(K))$ можно получить аналитически из зависимостей (14)–(16) и одновременно выяснить физический смысл этих особенностей. Так, равенство нулю $\sigma'' = 0$ при $K = 0$ следует из легко проверяемого в этом случае соотношения $\alpha T^{-1} = -\gamma$. При $K \rightarrow K_B$ и $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_7$ из (17) следует, что величины $\sin k_0 \rightarrow 0$, $\chi \rightarrow \infty$, $T \rightarrow -1$, $\alpha\beta \cong \gamma\beta \rightarrow 1$, $(\alpha + T\beta)/\gamma \rightarrow 0$ и необходимо раскрывать соответствующую неопределенность в (16).

Для получения непосредственно угловой зависимости $\sigma''(\theta)$ при фиксированных сбросах будем считать, что постоянная решетки, близкая к реальным значениям, $a = 1.5$ Å и соотношение (11), связывающее K и θ , имеет вид

$$Ka = \pi \sin \theta \sqrt{\varepsilon/\varepsilon_1}, \quad (18)$$

так что значение $\theta = \pi/2$ при $\varepsilon = \varepsilon_1$ отвечает предельному значению K на границе зоны Бриллюэна.

На рис. 3 представлена зависимость сечения от θ для тех же значений сброса, что и на рис. 2, и при той же нумерации кривых. Видно, что с увеличением энергии сброса вначале развал бифонона происходит в узком, расширяющемся интервале θ вблизи $\pi/2$, и увеличивающийся максимум σ'' находится при $\theta = \pi/2$, т.е. при "лобовом" столкновении нейтрона и бифонона (кривая 1, $\varepsilon = \varepsilon_2$). Затем при подходе к сбросу $\varepsilon = \varepsilon_5$ сечение становится максимальным и существует при $\theta \geq 0$, увеличиваясь с возрастанием θ (кривая 2, $\varepsilon = \varepsilon_4$; кривая 3, $\varepsilon = \varepsilon_5$). При дальнейшем увеличении энергии сброса сечение уменьшается, его максимум смещается в сужающуюся область вблизи малых углов $\theta \rightarrow 0$ (кривая 4, $\varepsilon = \varepsilon_6$; кривая 5, $\varepsilon = \varepsilon_7$; кривая 6, $\varepsilon = \varepsilon_8$). Таким образом, индикатриса рассеяния при больших энергиях сброса представляет собой лепесток с нулевыми минимумами при $\theta = 0$ и $\theta = \theta_0(\varepsilon)$, где $\theta_0(\varepsilon \rightarrow \varepsilon_9) \rightarrow 0$, и уменьшающимся максимумом при θ_{\max} , $0 < \theta_{\max} < \theta_0$. Приведенные на рис. 3 кривые 2–4 обрываются при некоторых конечных углах падения. Это связано с тем обстоятельством, что при больших углах и фиксированных для этих кривых сбросах не выполняется условие (18) для волновых векторов бифонона и нейтрона в первой зоне Бриллюэна, и необходимо в правую часть (18) ввести слагаемых $\pm 2mK_B a$, учитывающие процессы переброса. Процедура учета таких процессов, несомненно, представляет интерес, однако в данной работе не проводится. Этот учет дополнит полученные результаты.

На рис. 4 представлена энергетическая зависимость сечения $\sigma''(\varepsilon, \theta)$ при фиксированных значениях угла падения θ . Кривые 1–5 отвечают возрастающим значениям θ . При малых углах (кривая 1, $\theta = \pi/16$) наблюдается широкая полоса с малоинтенсивным резонансом на низкоэнергетическом крае этой полосы. При увеличении угла вся полоса отличных от нуля сечений сужается и смещается в низкоэнергетическую область, однако, что интересно, увеличивающийся максимум резонанса смещается первоначально, наоборот, в высокоэнергетическую область полосы (кривая 2, $\theta = \pi/8$; кривая 3; $\theta = \pi/5$). Однако при углах, больших критического значения $\theta \geq \pi/5$, смещение максимума изменяет направление, и продолжающий увеличиваться максимум смещается к низкоэнергетическому краю полосы (кривая 4, $\theta = \pi/4.5$; кривая 5, $\theta = \pi/4$). Кривая 5 обрывается после прохождения максимума в некоторой точке, где перестают выполняться условия (18), как это уже обсуждалось выше и для рис. 3. При дальнейшем увеличении θ расчет дает восходящие низкоэнергетические части резонанса, смещающиеся в низкоэнергетическую область.

В том случае, если экспериментально наблюдаемые в будущем особенности угловой и энергетической зависимости сечения неупругого рассеяния нейтронов будут в общих чертах совпадать с найденными в данной работе, это в дополнение к общим энергетическим соображениям и вполне может служить критическим доказательством участия в процессах неупругого рассеяния нейтронов именно связанных бифононных состояний. Развитие

исследований в этом направлении, возможно, приведет к значительному изменению системы существующих, основанных только на соображениях энергетического баланса, критериев классификации серий спектральных резонансов, предположительно отвечающих связанным многофононным состояниям различной кратности. Используемые в работе значения параметров геометрии рассеяния и т.д. могут быть ориентирующими при таких исследованиях.

В заключение авторы считают своим долгом выразить искреннюю признательность В.М. Аграновичу за полезные замечания.

Работы выполнены при поддержке Российской государственной научно-технической программы "Актуальные направления в физике конденсированных сред" по направлению "Нейтронные исследования вещества".

Список литературы

- [1] В.М. Агранович, И.Й. Лалов. УФН **146**, 2, 267 (1985).
- [2] V.M. Agranovich, S. Mukamel. Phys. Lett. **147**, 1, 155 (1990).
- [3] V.M. Agranovich, O.A. Dubovsky. Optical Properties of Mixed Crystals. North-Holland, Amsterdam (1988). P. 297.
- [4] О.А. Дубовский, А.В. Орлов. ФТТ **39**, 1, 163 (1997).
- [5] О.А. Дубовский, А.В. Орлов. ФТТ **39**, 3, 542 (1997).
- [6] S. Ikeda, N. Watanabe. KEK Preprint. **66** (1986).
- [7] I.S. Anderson, J.J. Rush, T. Uvodic, J.M. Rowe. Phys. Rev. Lett. **57**, 22, 2822 (1986).
- [8] A.I. Kolesnikov, M. Prager, J. Tomkinson, I.O. Bashkin, V.Yu. Malyshev, E.G. Ponyatovskii. J. Phys.: Condens Matter. **3**, 6, 5297 (1991).
- [9] R. Bini, P.R. Salvi, V. Schettino. J. Chem. Phys. **98**, 1, 164 (1993).
- [10] L.J. Richter, T.A. Germer, J.P. Sethna, W. Ho. Phys. Rev. **B 38**, 15, 10 403 (1988).
- [11] V.M. Agranovich, O.A. Dubovsky, A.V. Orlov. Phys. Lett. **A119**, 2, 83 (1986).
- [12] V.M. Agranovich, O.A. Dubovsky, A.V. Orlov. Solid State Commun. **72**, 5, 491 (1989).
- [13] О.А. Дубовский, А.В. Орлов. ФТТ **32**, 8, 2407 (1990).
- [14] О.А. Дубовский, А.В. Орлов. ФТТ **36**, 10, 3131 (1994).
- [15] T.J. Uvodic, J.J. Rush, I.S. Anderson, J.N. Daou, P. Vajda, O. Blaschko. Phys. Rev. **B50**, 6, 3696 (1994).
- [16] В.Ф. Турчин. Медленные нейтроны. Госатомиздат, М. (1963). 372 с.