

玻璃中结构弛豫的红外发散响应

范 希 庆 王 国 樑

(郑州大学物理系)

刘 福 绥

(北京大学物理系)

1985 年 9 月 17 日收到

提 要

本文将红外发散响应理论应用到玻璃中结构缺陷的二能级模型,解释了超声吸收的双峰结构,特别是提出了小峰的存在对频率的依赖关系,并且在引入热激活有效势的基础上,对 SiO_2 在整个温区的吸收曲线进行了成功的拟合。

一、引 言

自从 Zeller 和 Pohl^[1] 的实验清楚地表明,在低温下玻璃的超声吸收与晶体的大不相同以来,又有不少实验在不同温区、不同频率段进行测量,发现玻璃的超声吸收有一个共同的特点:在 50K 左右有一个高而宽的大峰;在 5K 左右有一个小峰,而且小峰对频率的依赖关系比大峰敏感,随着频率 $\omega (> 1\text{MHz})$ 的增加,小峰逐渐变成肩膀;在 2K 以下,按 T^3 规律下降。

目前,理论上广泛地应用唯象的二能级模型来解释玻璃的介质和声学性质。这个模型的基本思想是,在非晶体中存在两个结构缺陷态,一些粒子(原子或原子团)可在这两个缺陷态之间来回运动。若用势能曲线来描述这两个缺陷态,就是图 1 中所示的非对称

双势阱;由于粒子的微观性质不清楚,势能是作为组态坐标的函数。

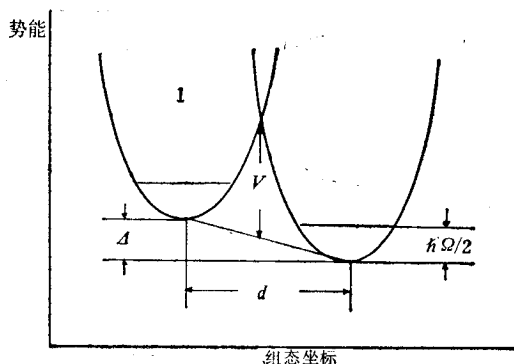


图 1 势垒高度为 V , 非对称为 Δ , 两个势能最小值的距离为 d 的双势阱 $\hbar\Omega/2$ 为单个谐振子的基态能量

Jäckle 等人^[2]指出,玻璃超声吸收曲线中的大峰和小峰都是两个结构缺陷态的弛豫所引起的,可用图 1 所示的双势阱来描述。被双势阱控制着的一些粒子,从热库获得足够的能量可以实现从一个势阱到另一个势阱的热激活跃迁,称为热激活弛豫;而在粒子未能获得越过势垒的能量的情况下,则可以隧道穿透的方式来实现从一个势阱到另一个势阱的跃迁;这种过程本来不是弛豫过程,

但它同样引起占据数的调整,所以也起着弛豫过程的作用,并简称为隧道弛豫。很显然,在玻璃超声吸收的大峰主要是由热激活弛豫引起的,小峰主要是由隧道弛豫引起的,而整个温区的超声吸收应是两种弛豫效应的相加。

关于高温区的热激活弛豫,我们曾用红外发散理论修正过的速率理论讨论过^[3],并给出比较满意的结果。在这里,我们试图将此理论推广到低温区,以求得对整个温区的超声吸收特性的描述。关于这个问题,据我们所知,除 Fleurov^[4]用抖动的二能级模型给以定性的讨论外,一般都是讨论大小峰附近的性质,还未见到对具体材料在整个温区超声吸收曲线的理论研究的报道,为此,我们还将所得到的理论结果应用到具有代表性的 SiO₂ 玻璃。

二、红外发散响应模型

有关玻璃超声吸收的红外发散响应模型的基本思想在文献[3]中已有详述,为了下面的应用,现将其必要的观点和有关公式作一简述。

处于图 1 所示的双势阱中的粒子,其位置的变化不论是热激活过程或是隧道过程引起的,都可用速率理论来描述,令其弛豫率分别为 τ_{i0}^{-1} 和 τ_{i0}^{-1} ,简记作 $\tau_{i0}^{-1}(i=1,2)$ 。根据 Ngai^[5] 的红外发散响应理论 (IDR),在任一弛豫过程中都伴随着关联态的激发和退激发,从而产生具有红外发散性质的低能元激发,由此弛豫率 τ_{i0}^{-1} 被修改为与时间 t 有关的函数

$$W(t) = \frac{1}{\tau_i} = \tau_{i0}^{-1} e^{-n_i \nu} (E_c t)^{-n_i}, \quad (1)$$

其中 $\nu = 0.577$ 为 Euler 常数, E_c 和 $n_i (0 \leq n_i < 1)$ 为 IDR 的参数。

假定 t 时刻弛豫态仍保持初始时间 ($t=0$) 的状态的几率为 $Q(t)$,则粒子在两个缺陷态的跃迁弛豫率应满足

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\frac{Q(t)}{\tau_{i0}}. \quad (2)$$

相应地, IDR 将 (2) 式修改为

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\frac{Q(t)}{\tau_i} = -\tau_{i0}^{-1} e^{-n_i \nu} (E_c t)^{-n_i} Q(t). \quad (3)$$

利用初条件 $t=0, Q(0) = Q_0 = 1$, 可得

$$Q(t) = Q_0 e^{-\left(\frac{t}{\tau_{i0}}\right)^{1-n_i}}, \quad (4)$$

其中

$$\tau_{i0}^{-1} = [e^{-n_i \nu} / (1 - n_i) \tau_{i0} E_c^{n_i}]^{\frac{1}{1-n_i}}. \quad (5)$$

由 (4) 式求得跃迁几率分布函数

$$\phi(t) \equiv -\frac{dQ}{dt} = \tau_{i0}^{-1} e^{-n_i \nu} (E_c t)^{-n_i} e^{-\left(\frac{t}{\tau_{i0}}\right)^{1-n_i}} \quad (6)$$

和广义感应率

$$\chi_i(t) = \beta D_0^2 \phi(t), \quad (7)$$

其中 $\beta = 1/k_B T$, k_B 为玻耳兹曼常数, T 为绝对温度; D_0 为弹性偶极矩。对 $\chi_i(t)$ 作

傅里叶变换;并令

$$x = \left(\frac{t}{\tau_{ip}}\right)^{1-n_i}, \quad (8)$$

则有

$$\chi_i(\omega) = \beta D_0^2 \int_0^\infty e^{-x} e^{i(\omega\tau_{ip}x^{\frac{1}{1-n_i}})} dx. \quad (9)$$

损耗正比于广义感应率 $\chi_i(\omega)$ 的虚部

$$\chi_i''(\omega) = \beta D_0^2 \int_0^\infty e^{-x} \sin(\omega\tau_{ip}x^{\frac{1}{1-n_i}}) dx. \quad (10)$$

当 $\omega\tau_{ip} \gg 1$ (对应于低温),

$$\chi_i''(\omega) \simeq \beta D_0^2 (1 - n_i) \sin\left[(1 - n_i)\frac{\pi}{2}\right] \Gamma(1 - n_i) (\omega\tau_{ip})^{n_i-1}. \quad (11)$$

当 $\omega\tau_{ip} \ll 1$ (对应于高温),

$$\chi_i''(\omega) \simeq \beta D_0^2 \Gamma\left(\frac{1}{1 - n_i} + 1\right) (\omega\tau_{ip}). \quad (12)$$

上两式中的 $\Gamma(1 - n_i)$ 和 $\Gamma\left(\frac{1}{1 - n_i} + 1\right)$ 是宗量不同的 Γ 函数.

另外,吸收系数 α_i 与 $\chi_i''(\omega)$ 有如下关系:

$$\alpha_i \propto \omega \chi_i''(\omega). \quad (13)$$

三、弛豫时间的计算

对于热激活过程,我们把粒子看作在图 1 所示的双势中作经典运动;由 1 到 2 的热跃迁要克服高度为 $V - \frac{\Delta}{2}$ 的势垒,由 2 到 1 的热跃迁要克服高度为 $V + \frac{\Delta}{2}$ 的势垒.假定对应的热跃迁几率分别为 W_{12} 和 W_{21} ,那末,位置 1 和位置 2 上的粒子数的变化率满足下式:

$$\frac{dN_1}{dt} = -W_{12}N_1 + W_{21}N_2, \quad \frac{dN_2}{dt} = -W_{21}N_2 + W_{12}N_1, \quad (14)$$

其中 N_1 和 N_2 分别为位置 1 和 2 上的粒子数.在平衡时, $\frac{dN_1}{dt} = \frac{dN_2}{dt} = 0$,因此有

$$N_1/N_2 = W_{21}/W_{12}, \quad (15)$$

并且 N_1 和 N_2 应按玻耳兹曼分布,由 (15) 式可得

$$\begin{aligned} W_{12} &= W_0 e^{-(V-\frac{\Delta}{2})/k_B T}, \\ W_{21} &= W_0 e^{-(V+\frac{\Delta}{2})/k_B T}. \end{aligned} \quad (16)$$

由此定义热激活弛豫时间的逆 τ_{10}^{-1} 为

$$\begin{aligned} \tau_{10}^{-1} &= (W_{12} + W_{21}) \\ &= \tau_{10}^{-1} \cos \frac{\Delta}{2k_B T} e^{-V/k_B T}, \end{aligned} \quad (17)$$

其中 $\tau_{10}^{-1} = 2W_0$. 由于一般情况下, $\Delta \ll V$, 所以取

$$\tau_{10}^{-1} \simeq \tau_{10}^{-1} e^{-V/k_B T} \quad (18)$$

就足够精确了. 可以看出, (17), (18) 两式都是 Debye 型的热弛豫率, 其中 V 是与温度 T 无关的常数.

由于隧道弛豫是量子效应, 我们分别用态矢 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 表示粒子处于势阱 1 和 2 的基态. 具体计算可知, 粒子往返于 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 的频率近似等于 Δ_0/\hbar , Δ_0 为重叠能量

$$\Delta_0 = \hbar Q e^{-\lambda}, \quad \lambda = d(2mV/\hbar^2)^{1/2}, \quad (19)$$

其中 Q 为粒子在单个谐振子势阱中的零点振动频率; λ 为隧道参数, 它描述 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 两态之间的重叠程度; d 为势阱间距, m 为粒子的质量, \hbar 为普朗克常数.

在基态 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 上的未微扰的哈密顿量为

$$H_0 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \Delta & \Delta_0 \\ \Delta_0 & -\Delta \end{vmatrix}, \quad (20)$$

其中 Δ 为图 1 中的非对称能量. (20) 式表明, $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 不是二能级体系的本征态. 为使 H_0 对角化, 作么正变换

$$S = \begin{vmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{vmatrix}, \quad (21)$$

则 H_0 变为

$$H_0 = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{vmatrix}, \quad E = (\Delta^2 + \Delta_0^2)^{1/2}. \quad (22)$$

相应的态矢变为

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= |1\rangle \cos \theta + |2\rangle \sin \theta, \\ |\beta\rangle &= -|1\rangle \sin \theta + |2\rangle \cos \theta, \end{aligned} \quad (23)$$

其中

$$\tan 2\theta = \Delta_0/\Delta. \quad (24)$$

需要说明的是, (23) 和 (24) 式所定义的 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 的正交性仅到 $\langle 1|2\rangle = 0$ 的程度, 所以 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 的正交性是近似的.

由于 (22) 式中的哈密顿量是二能级体系哈密顿量, 所以可将它改写为处于“静磁场” \mathbf{B}_0 中的自旋 1/2 体系的哈密顿量

$$H_s = -\nu \mathbf{B}_0 \cdot \mathbf{S}, \quad (25)$$

其中 $-\nu \mathbf{B}_0 = (0, 0, E)$, $\mathbf{S} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\sigma}$ 为泡利矩阵,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (26)$$

既然 H_0 和 H_s 是等同的, 因此就可以像处理自旋 1/2、磁迥比为 ν 的自旋体系那样研究粒子的隧道运动. 在这种对应关系中, 能量高的态 $|\alpha\rangle$ 对应于自旋向上, 能量低的态 $|\beta\rangle$ 对应于自旋向下. 这样就引入了“赝自旋”的概念.

赝自旋的势能由它代表的粒子所处的环境决定. 于是每个赝自旋都同随机的局域应变场张量相耦合, 从而引起自旋-晶格弛豫. 下面我们仿照 Ngai^[2] 用 IDR 讨论核自旋

弛豫的方法来计算“赝自旋”-晶格弛豫时间 τ_{20} 。

将随机应变场当作微扰 H_1 , 那末 H_1 将引起粒子在 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 之间的跃迁, 同时也将改变 Δ 和 Δ_0 的大小, 但相比之下, Δ 的变化是重要的。基于这种考虑, 隧道能级与局域应变场相耦合的主要项为

$$H_1 = -\frac{1}{2} \nu \varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (27)$$

其中 $\nu = \frac{\partial \Delta}{\partial \varepsilon}$ 为形变势张量, ε 为局域应变场张量, 量 $(\nu \varepsilon)$ 表示对方向和极化(横、纵振动)取了平均的结果。

在 (21) 式的变换下, H_1 变为

$$H_1 = -\frac{1}{2} M \varepsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} D \varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (28)$$

其中 M 、 D 与 ν 有如下关系:

$$M = \frac{-\Delta_0}{E} \nu, \quad D = \frac{\Delta}{E} \nu. \quad (29)$$

将 (28) 式改写为

$$H_1 = -\nu_s \mathbf{B}' \cdot \mathbf{S}, \quad (30)$$

式中 \mathbf{B}' 为与随机应变场等效的随机磁场, 而且

$$\nu_s \mathbf{B}' = (M, 0, D) \varepsilon. \quad (31)$$

在随机磁场 \mathbf{B}' 的作用下, 赝自旋体系的跃迁几率的统计平均值^[6]

$$W_{\alpha\beta} = \int_0^t \langle \beta | H_1(t) | \alpha \rangle \langle \alpha | H_1(t') | \beta \rangle e^{i\omega_{\alpha\beta}(t'-t)} dt' + \text{c.c.} \quad (32)$$

c.c. 项表示第一项的复共轭。随机量 $\langle \alpha | H_1(t) | \beta \rangle$ 为稳定的条件下, 积分号下的量仅依赖于时间差 $\tau = t - t'$, 这时, (32) 式变为

$$W_{\alpha\beta} = \int_{-t}^t G_{\alpha\beta}(\tau) e^{-i\omega_{\alpha\beta}\tau} d\tau, \quad (33)$$

$G_{\alpha\beta}(\tau) = \langle \beta | H_1(t-\tau) | \alpha \rangle \langle \alpha | H_1(t) | \beta \rangle$ 为无规量 $\langle \alpha | H_1(t) | \beta \rangle$ 的自关联函数。考虑到 $W_{\alpha\beta} \gg 1/\omega_{\alpha\beta}$, 上式积分限用 $\pm \infty$ 代替, 最后求得

$$W_{\alpha\beta} = |\langle \alpha | \mathbf{S} | \beta \rangle|^2 J(\omega_{\alpha\beta}), \quad (34)$$

式中 $J(\omega_{\alpha\beta})$ 为约化后的自关联函数

$$G'_{\alpha\beta}(\tau) = \nu_s^2 M^2 \langle \varepsilon(\tau) \varepsilon(t+\tau) \rangle \quad (35)$$

的傅里叶变换。正如通常那样, 假定相关函数 $G'_{\alpha\beta}(\tau)$ 有如下形式:

$$G'_{\alpha\beta}(\tau) = \nu_s^2 M^2 \overline{\varepsilon(\tau)^2} e^{-|\tau|/\tau_0}, \quad (36)$$

其中 τ_0 为相关时间, 取 $\tau_0 = \tau_{0\infty} e^{E/k_B T}$ 。最后, 由 (34) 式求得在拉莫频率上的隧道弛豫时间 τ_{20} 的逆

$$\tau_{20}^{-1} = W_{\alpha\beta} = A \left(\frac{\Delta_0}{E} \right)^2 \frac{2\tau_0}{1 + \omega_{\alpha\beta}^2 \tau_0^2}, \quad (37)$$

式中 $A = (1/4) \langle \nu \varepsilon^*(\tau) \nu \varepsilon(\tau) \rangle$, $\omega_{\alpha\beta} = E/\hbar$ 。在低温情况下, 一般 $\omega_{\alpha\beta} \tau_0 \gg 1$, 于是有 τ_{20}^{-1} 的近似式

$$\tau_{20}^{-1} \simeq \tau_{2\infty}^{-1} e^{-E/k_B T}, \quad (38)$$

式中

$$\tau_{2\infty}^{-1} = 2A \left(\frac{\Delta_0}{E} \right)^2 / \omega_{a\beta}^2. \quad (39)$$

四、同实验曲线的拟合

玻璃的声学性质具有代表性的材料是 SiO_2 玻璃, 现将前面的结果应用到 SiO_2 玻璃.

1. 超声吸收曲线

根据前面的讨论, 整个温区的超声吸收曲线是两种机制损耗的相加. 对应的损耗函数为

$$\chi''(T) = \chi_1''(T) + \chi_2''(T), \quad (40)$$

式中的 $\chi_i''(T)$ ($i = 1, 2$) 都是由 (10) 式给出, 所涉及的 τ_{ip} 由 (5) 式给出. 再根据超声吸收系数 α 与 $\chi''(\omega)$ 的关系式 (13), 同文献 [7] 所给出的实验曲线进行拟合.

在拟合过程中, 我们发现在高温区, 用 IDR 的理论公式 (40) 同实验比较符合得好, 但在低温区用 Debye 形式的热弛豫率 (18) 式, 理论曲线在实验曲线下面. 为此, 我们作了

$$x = \log \tau_{ip} / (\tau_{ip})_{\max} = P \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_p} \right)$$

随 $1/T$ 变化曲线

$$\left[P = \frac{V}{k_b(1-n_1)} \log \bar{\epsilon} \right],$$

如图 2 所示. 其结果表明, Debye 形式的热弛豫率在 $T > 20\text{K}$, 同实验点符合

得很好, 这时 x 基本上为一直线, 但在 $T < 20\text{K}$, 同实验点偏离很大, x 变为向下弯曲的曲线. 这个事实说明势垒高度 V 是随温度 T 变化的. 为了反映这一实验事实, 用下面的热弛豫率来逼近实验点, 亦即将 (18) 式修改为

$$\tau_{10}^{-1} = \tau_{1\infty}^{-1} e^{-V_{\text{eff}}/k_B T}, \quad (41)$$

式中

$$V_{\text{eff}} = V / \left(1 + \frac{T_c}{T} \right) \quad (42)$$

称为有效势, 而常数 $T_c \simeq 6\text{K}$.

将 (18) 式改用 (41) 式后, 再利用 (40) 式进行拟合, 所得的理论曲线同实验曲线符合得很好 (见图 3), 并同时给出了大小两个吸收峰. 在拟合过程中, 从曲线簇中选定 $n_1 \simeq 0.8$, $n_2 \simeq 0.6$, 改变 $V, E, E_c, \tau_{1\infty}, \tau_{2\infty}$, 最后定出 $V = 0.01\text{eV}$, $E = 3.0 \times 10^{-4}$

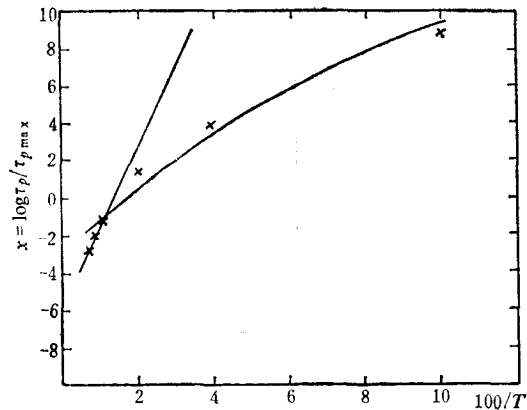


图 2 热弛豫率与温度的关系 实验资料来自文献 [7]

eV, $\tau_{100} = 1.14 \times 10^{-9}$ s, $\tau_{200} \approx 1.00 \times 10^{-7}$ s, $E_c = 4.1 \times 10^{-6}$ eV. 所有这些数值都是实验或理论所允许的. 需要说明, 一般实验上定出的热激活时间参量 $\tau'_{100} \approx 10^{-13}$ s, 比这里定出的 τ_{100} 小 10^4 . 其原因在于, 按 IDR 理论^[3], 前者称为表观时间参量, 即包括了红外发散 ($n_1 \approx 0$) 的影响; 而这里的 τ_{100} 对应于 $n = 0$ 的时间参量. 很易导出两者有如下关系:

$$\tau'_{100} = \tau_{p00} e^{\frac{V^*}{k_B} \left(\frac{1}{T_p + T_c} - \frac{1}{T_{\max}} \right)}, \quad (43)$$

其中 $V^* = V/(1 - n_1)$, 为表观激活能; T_p 为对应于 ($\chi''T$) 的极大值的温度; T_{\max} 为对应于 χ'' 的极大值的温度 (详见文献 [3]); 而

$$\tau_{p00} = [(1 - n_1) E_c^n \tau_{100} e^{n_1 V}]^{\frac{1}{1 - n_1}}. \quad (44)$$

将前面给出的有关量的数值代入 (44) 式, 可得 $\tau_{p00} = 6.2 \times 10^{-12}$ s. 再将 τ_{p00} 和实验值 $T_p \approx 76$ K, $T_{\max} \approx 49$ K 代入 (43) 式, 即得 $\tau'_{100} = 1.02 \times 10^{-13}$ s. 这就是常用的热激活时间参量值, 也是文献 [3] 所用的数值.

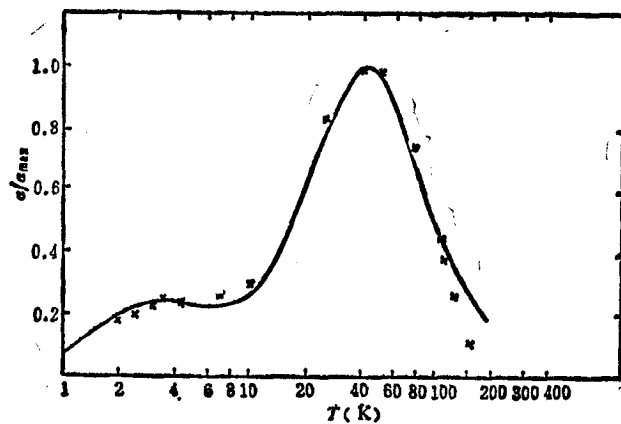


图3 在 SiO₂ 玻璃中超声弛豫损耗与温度的关系
($\omega = 20$ MHz, 实验资料来自文献 [7])

对于 SiO₂ 玻璃, 在小峰峰温以下, $\chi'_2(\omega) \gg \chi'_1(\omega)$, 而且 $\omega\tau_{2p} \gg 1$. 因此求小峰位置可由 (11) 式得到近似式

$$\chi''(\omega) \approx \chi'_2(\omega) \propto \frac{1}{T} e^{-E/k_B T}, \quad (45)$$

也即超声吸收

$$\alpha \propto \frac{1}{T} e^{-E/k_B T}. \quad (46)$$

由 (46) 式, 小峰的极大值所对应的温度 $T \approx 4$ K. 在小峰的左侧超声吸收按 $\frac{1}{T} e^{-E/k_B T}$

下降, 仅在 1K 处在数值上同 T^3 律的相同. 这个结果说明, IDR 理论中的低能元激发具有类-Einstein 声子的性质, 因此未给出 T^3 的规律.

2. 低温区超声吸收的频率特性

由于在 $T = 10\text{K}$ 以下, $\omega\tau_{1p} \gg 1$ 和 $\omega\tau_{2p} \gg 1$ 的条件都能满足, 因此这时的 χ'_1 和 χ'_2 都可用 (11) 式来近似. 于是在这个温区的损耗函数 $\chi''(\omega)$ 有近似的解析式

$$\chi''(\omega) = \beta D_0 \left\{ \Gamma(2 - n_1) \sin \left[(1 - n_1) \frac{\pi}{2} \right] (\omega\tau_{1p})^{n_1-1} + \Gamma(2 - n_2) \sin \left[(1 - n_2) \frac{\pi}{2} \right] (\omega\tau_{2p})^{n_2-1} \right\} \quad (47)$$

为了讨论吸收小峰对频率的依赖关系, 将 (47) 式整理成如下的形式:

$$\chi''(\omega) = \frac{A}{k_B T} \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^{n_2-1} \left[\left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^{n_1-n_2} B e^{-v_{eff}/k_B T} + e^{-E/k_B T} \right], \quad (48)$$

式中 A, B 是只与发散指数有关, 与频率、温度变化无关的常数

$$A = \frac{\Gamma(1 - n_2) \sin \left[(1 - n_2) \frac{\pi}{2} \right]}{\omega_0^{1-n_2} E_c^{n_2} e^{n_2 v} \tau_{2\infty}},$$

$$B = \frac{\tau_{2\infty} \Gamma(1 - n_1) \sin \left[(1 - n_1) \frac{\pi}{2} \right]}{\tau_{1\infty} \Gamma(1 - n_2) \sin \left[(1 - n_2) \frac{\pi}{2} \right]} \cdot [E_c^{-1} e^{-v} \omega_0]^{n_1-n_2}. \quad (49)$$

上两式中的 ω_0 为任选的参考频率. 在图 4 中, 为了同文献 [7] 中的实验曲线相比较, 取

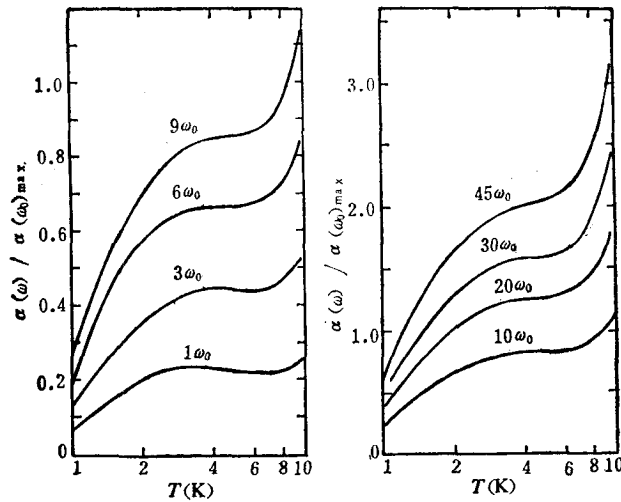


图 4 在 SiO_2 玻璃中低温弛豫损耗曲线形状随频率的变化
($\omega_0 = 20\text{MHz}$, $\alpha(\omega_0)_{\max}$ 为图 3 曲线的极大值)

$\omega_0 = 20\text{MHz}$, 在图中分别画出了 $\omega = 1\omega_0, 3\omega_0, \dots, 45\omega_0$ 八条曲线, 可以看出在 1—10 K 温区, SiO_2 玻璃的超声吸收随频率的增加逐渐由峰变为肩膀的过程, 整个变化趋势是同实验相一致的.

注意到对具体材料, 发散指数 n_1, n_2 是确定的, 如 SiO_2 的 $n_1 \approx 0.8, n_2 \approx 0.6$. 不难从 (48) 式看出, 随着频率的增加, 热激活弛豫对超声吸收的贡献比隧道弛豫多一个相对

因子 $\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^{n_1-n_2} = \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^{1/3} > 1$. 这表明, 随 ω 的增加, 在这个温区热激活弛豫的贡献 $\chi_2''(\omega)$ 相对增加, 而 $\chi_1''(\omega)$ 相对不变; 这样势必当 ω 增加到一定数值, 将小峰逐渐变成肩膀. 由此可得出结论: 在低温区, 热激活弛豫和隧道弛豫对超声频率的不同响应是小峰变为肩膀的主要原因.

最后, 讨论玻璃介质吸收峰的结构. 根据玻璃的超声吸收和介质吸收都是来源于相同的缺陷结构, 那么介质吸收在 5K 附近也应出现一个小峰. 但是, 在实验上未明显地观察到, 根据以上的分析, 很可能是由于在这个温区, 介质的热激活弛豫对频率的响应比隧道弛豫相对稍微大些的缘故.

五、结 语

我们将 Ngai 的红外发散响应理论应用到玻璃的二态缺陷结构弛豫过程, 定量地描述了 SiO_2 玻璃在整个温区上的超声吸收的双峰曲线以及小峰随频率增加逐渐变成肩膀而消失的过程. 我们的工作表明, 红外发散响应在 SiO_2 超声吸收过程中是重要的. 换言之, 在该材料的超声吸收过程中, 除声子外, 还有其它元激发参与. 本文所应用的 Ngai 的理论本身带有调整参数, 再者, 在讨论热激活弛豫时, 根据实验资料引入了有效势. 当物理机制清楚之后, 从第一原理出发, 则可从理论上确定它们.

参 考 文 献

- [1] R. C. Zeller, R. O. Pohl, *Phys. Rev.*, **B4**(1971), 2029.
- [2] J. Jäckle *et al.*, *J. Non. Cryst. Solid*, **20**(1976), 365.
- [3] 范希庆等, 物理学报, **34**(1985), 1270.
- [4] V. N. Fleurov *et al.*, *Solid State Commun.*, **44**(1982), 187.
- [5] K. L. Ngai, *Commets on Solid State Phys.*, **9**(1979), 127; *ibid.*, **9**(1980), 141.
- [6] A. Abragam, *The Principle of Nuclear Magnetism*, Oxford University Press, London, (1961), p. 272.
- [7] J. T. Krause, C. R. Kurkjian, *J. Am. Ceram. Soc.*, **51**(1968), 226.

THE INFRARED DIVERGENCE RESPONSE OF STRUCTURAL RELAXATION IN GLASSES

FAN XI-QING WANG GUO-LING

LIU FU-SUI

(Department of Physics, Zhengzhou University)

(Department of Physics, Peking University)

ABSTRACT

The infrared divergence response theory is applied to the two-level System model of structural defects in glasses, and the twopeak structure of the ultrasonic absorption is explained by this theory. It is reasoned out that the small low-temperature peak depends more strongly on frequency than that of the high-temperature peak. On the basis of introducing the effective potential, a good agreement with experimental data for ultrasonic absorption in SiO_2 is attained over the whole temperature range^[7].