# УКРАИНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

ТОМ XVII, № 12

ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК

Киев — 1972

УДК 539.219.1:535.34

# КЛАССИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СПЕКТРАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЫДЕЛЕННЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ КОЛЕБАНИЙ НА КОМБИНИРОВАННЫХ ЧАСТОТАХ

*М. И. Дыкман, М. А. Кривоглаз*

В ряде задач, например, при определении сечения неупругого рассеяния нейтронов или коэффициента поглощения инфракрасного излучения локальными или квазилокальными колебаниями в кристаллах, необходимо знать спектральное представление $Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega)$ временной корреляционной функции $Q_{\varkappa\varkappa'}(t)=\langle\langle q_\varkappa(t)\,q_{\varkappa'}(0)\rangle\rangle$ координат $q_\varkappa(t)$ таких выделенных колебаний ($\langle\langle\ldots\rangle\rangle$ означает статистическое усреднение). В гармоническом приближении $Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega)$ имеет пики только на частотах $\omega_\varkappa$ выделенных колебаний, но при учете ангармонизма в центрах низкой симметрии появляются пики также в области удвоенных и комбинированных частот [1]. Уширение таких пиков может быть обусловлено как конечным временем жизни выделенных колебаний $\tau$ [2—5], так и эффектами модуляции частот этих колебаний за счет взаимодействия со средой [3—5].

Существенное влияние на ширину, форму и тонкую структуру спектрального распределения оказывает то обстоятельство, что выделенные колебания, вообще говоря, нелинейны, т. е. колебательные уровни неэквидистантны [4, 5]. Нелинейность задачи приводит к ее существенному усложнению. В связи с этим в работах [4, 5], где развивалась квантовая теория, основанная на использовании метода температурных функций Грина, удалось исследовать только предельные случаи $\Delta\omega\ll\Gamma$ и $\Delta\omega\gg\Gamma$ ($\Delta\omega$ определяет неэквидистантность уровней, а $\Gamma=1/\tau$).

С другой стороны, при высоких температурах ($kT\gg\hbar\omega_\varkappa$) в пренебрежении тонкой структурой распределения функцию $Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega)$ можно определять при помощи классической теории, не учитывая квантовых эффектов. Классический подход дает возможность использовать хорошо развитые асимптотические методы теории нелинейных колебаний (см., например, [6]) и некоторые результаты теории стохастических процессов. Таким образом, в работе [7] удалось выразить в квадратурах спектральное представление $Q_{\varkappa\varkappa}(\omega)$ в области основных частот $\omega\approx\omega_\varkappa$ при произвольных соотношениях между $\Delta\omega$ и $\Gamma$ (но в предположении, что эти константы невелики по сравнению с $\omega_\varkappa$).

В данной работе таким же образом будет проведен расчет $Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega)$ в области удвоенной $\omega\approx2\omega_\varkappa$ и комбинированных $\omega\approx\omega_\varkappa\pm\omega_{\varkappa'}$ частот. Кроме того, будут определены спектральные представления корреляционных функций $Q_{\varkappa\varkappa_1\varkappa'\varkappa_1'}(t,0)=\langle\langle q_\varkappa(t)\,q_{\varkappa_1}(t)\,q_{\varkappa'}(0)\,q_{\varkappa_1'}(0)\rangle\rangle$, которые также дают вклад в сечения поглощения и рассеяния на комбинированных частотах. Как и в работе [7], будем использовать модель слабо связанного примесного атома (или молекулы) и ограничимся случаем, когда частоты выделенных колебаний $\omega_\varkappa$ не вырождены ($\omega_\varkappa\neq\omega_{\varkappa'}$) и не близки к комбинированным частотам ($\omega_\varkappa\neq\omega_{\varkappa'}\pm\omega_{\varkappa''}$).

## 1. Общее выражение для функции $Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega)$ в области комбинированных частот

Удобно выбрать координаты и импульсы выделенных колебаний $q_\varkappa$, $p_\varkappa$ и колебаний непрерывного спектра $q_k$, $p_k$ таким образом, чтобы они в отсутствие взаимодействия между выделенными колебаниями и колебаниями непрерывного спектра диагонализовали гармоническую часть гамильтониана. Частоты $\omega_k$ в рассматриваемом случае слабо связанной примеси при этом соответствуют квазинепрерывному спектру кристалла, из которого вынута примесь. После указанного преобразования гамильтониан системы примет вид

$$H = H^0 + H'; \quad H^0 = \frac{1}{2}\sum_\varkappa (p_\varkappa^2 + \omega_\varkappa^2 q_\varkappa^2) + \frac{1}{2}\sum_k (p_k^2 + \omega_k^2 q_k^2),$$

$$H' = \sum_{\varkappa\varkappa'\varkappa''} \beta_{\varkappa\varkappa'\varkappa''} q_\varkappa q_{\varkappa'} q_{\varkappa''} + \frac{1}{4}\sum_\varkappa \gamma_{\varkappa\varkappa} q_\varkappa^4 + \frac{3}{8}\sum_{\varkappa\varkappa'}{}' \gamma_{\varkappa\varkappa'} q_\varkappa^2 q_{\varkappa'}^2 + \sum_k H_k q_k +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{kk'} H_{kk'} q_k q_{k'}, \tag{1}$$

$$H_k = \sum_\varkappa \varepsilon_{\varkappa k} q_\varkappa + \sum_{\varkappa\varkappa'} \zeta_{\varkappa\varkappa' k} q_\varkappa q_{\varkappa'}, \quad H_{kk'} = \sum_\varkappa \xi_{\varkappa kk'} q_\varkappa + \sum_{\varkappa\varkappa'} \eta_{\varkappa\varkappa' kk'} q_\varkappa q_{\varkappa'}.$$

Здесь и ниже штрих у знака суммы по $\varkappa$, $\varkappa'$ (или по $\varkappa'$) означает, что при суммировании следует опускать член с $\varkappa' = \varkappa$. Коэффициенты $\beta$, $\gamma$, $\varepsilon$, $\zeta$, $\xi$ и $\eta$ содержат малые параметры. Как и в работе [7], рассмотрим случай $\zeta = \eta = 0$ (см. обсуждение роли членов с $\zeta$ и $\eta$ на стр. 506 в [7]). Члены типа $\gamma_{\varkappa\varkappa'\varkappa''} q_\varkappa^2 q_{\varkappa'} q_{\varkappa''}$ ($\varkappa'' \neq \varkappa'$) приводят к поправкам высшего порядка малости и в (1) опущены.

Запишем $Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega)$ в виде

$$Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} Q_{\varkappa\varkappa'}(t)\,dt = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dt\,dt'\, e^{-i\omega t + i\omega' t'} Q_{\varkappa\varkappa'}(t-t'). \tag{2}$$

В дальнейшем будет удобно рассматривать вместо быстро осциллирующих функций $q_\varkappa$, $\dot{q}_\varkappa$ относительно медленно изменяющиеся функции $u_{\varkappa\alpha}$ ($\alpha = 1,2$):

$$q_\varkappa = \sum_\alpha u_{\varkappa\alpha} e^{i\omega_{\varkappa\alpha} t}; \quad \dot{q}_\varkappa = i\sum_\alpha \omega_{\varkappa\alpha} u_{\varkappa\alpha} e^{i\omega_{\varkappa\alpha} t}; \quad q_{\varkappa\alpha} = u_{\varkappa\alpha} e^{i\omega_{\varkappa\alpha} t}. \tag{3}$$

Здесь $u_{\varkappa 2} = u_{\varkappa 1}^*$; $\omega_{\varkappa 1} = \omega_\varkappa$; $\omega_{\varkappa 2} = -\omega_\varkappa$. Из формул (3) следует, что $\sum_\alpha \dot{u}_{\varkappa\alpha} \exp(i\omega_{\varkappa\alpha} t) = 0$ и

$$\ddot{q}_\varkappa + \omega_\varkappa^2 q_\varkappa = 2i\omega_{\varkappa\alpha} \dot{u}_{\varkappa\alpha} e^{i\omega_{\varkappa\alpha} t} = -\frac{\partial H'}{\partial q_\varkappa} = -H'^{\varkappa}, \tag{4}$$

откуда

$$\dot{q}_{\varkappa\alpha} = i\omega_{\varkappa\alpha} q_{\varkappa\alpha} - \frac{1}{2i\omega_{\varkappa\alpha}} H'^{\varkappa}. \tag{5}$$

Вместо функции $Q_{\varkappa\varkappa'}(t-t') \equiv Q_{\varkappa\varkappa'}(t,t')$ удобно рассматривать вспомогательные функции $Q^{\alpha\beta}_{\varkappa\varkappa'}(t,t') = \langle\langle q_{\varkappa\alpha}(t)\, q_{\varkappa'\beta}(t')\rangle\rangle$. Согласно (5) $Q^{\alpha\beta}_{\varkappa\varkappa'}$ удовлетворяет дифференциальному уравнению $\dfrac{\partial Q^{\alpha\beta}_{\varkappa\varkappa'}(t,t')}{\partial t} = i\omega_{\varkappa\alpha} Q^{\alpha\beta}_{\varkappa\varkappa'}(t,t') - (2i\omega_{\varkappa\alpha})^{-1}\langle\langle H'^{\varkappa}(t)\, q_{\varkappa'\beta}(t')\rangle\rangle$. Интегрируя это уравнение, можно выразить $Q^{\alpha\beta}_{\varkappa\varkappa'}$ через интеграл от $\langle\langle H'^{\varkappa}(t)\, q_{\varkappa'\beta}(t')\rangle\rangle$. Дифференцируя последнюю величину по $t'$ с учетом (5) и интегрируя полученное уравнение, записываем $Q^{\alpha\beta}_{\varkappa\varkappa'}(t-t')$ в виде

$$Q^{\alpha\beta}_{\varkappa\varkappa'}(t,t') = -\frac{1}{4\omega_{\varkappa\alpha}\omega_{\varkappa'\beta}} e^{i(\omega_{\varkappa\alpha}t+\omega_{\varkappa'\beta}t')} \int\limits_{-\infty}^{t} d\tau \int\limits_{-\infty}^{t'} d\tau' e^{-i(\omega_{\varkappa\alpha}\tau+\omega_{\varkappa'\beta}\tau')} \times$$

$$\times \langle\langle H'^{\varkappa}(\tau)\, H'^{\varkappa'}(\tau')\rangle\rangle. \tag{6}$$

Здесь учтено, что $\langle\langle q_{\varkappa}(-\infty)\, q_{\varkappa'}(t')\rangle\rangle = \langle\langle H'^{\varkappa}(t)\, q_{\varkappa'}(-\infty)\rangle\rangle = 0$. Подставляя (6) в выражение для $Q_{\varkappa\varkappa'}(t-t') = \sum\limits_{\alpha,\beta=1,2} Q^{\alpha\beta}_{\varkappa\varkappa'}(t,t')$ в (2), интегрируя по частям по $t$ и $t'$ и учитывая, что $\langle\langle H'^{\varkappa}(\pm\infty)\, H'^{\varkappa'}(0)\rangle\rangle = 0$, получаем

$$Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{(\omega^2-\omega^2_{\varkappa})(\omega^2-\omega^2_{\varkappa'})} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{-i\omega\tau}\langle\langle H'^{\varkappa}(\tau)\, H'^{\varkappa'}(0)\rangle\rangle. \tag{7}$$

Поскольку необходимо определить $Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega)$ в области комбинированной частоты $\pm\omega_{\varkappa_1} \pm \omega_{\varkappa_2}$, в пренебрежении членами высшего порядка малости в множителе $H'^{\varkappa}$ формулы (7) можно сохранить только члены $3\beta_{\varkappa\varkappa_1\varkappa_2} q_{\varkappa_1} q_{\varkappa_2}$, а в $H'^{\varkappa'}$ — члены $3\beta_{\varkappa'\varkappa_1\varkappa_2} q_{\varkappa_1} q_{\varkappa_2}$. Тогда $Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega)$ примет вид

$$Q_{\varkappa\varkappa'}(\omega) = \frac{36}{(\omega^2-\omega^2_{\varkappa})(\omega^2-\omega^2_{\varkappa'})} \beta_{\varkappa\varkappa_1\varkappa_2}\beta_{\varkappa'\varkappa_1\varkappa_2} Q_{\varkappa_1\varkappa_2\varkappa_1\varkappa_2}(\omega) \qquad (\omega \approx \pm\omega_{\varkappa_1} \pm \omega_{\varkappa_2}),$$

$$Q_{\varkappa_1\varkappa_2\varkappa_1\varkappa_2}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \langle\langle q_{\varkappa_1}(t)\, q_{\varkappa_2}(t)\, q_{\varkappa_1}(0)\, q_{\varkappa_2}(0)\rangle\rangle. \tag{8}$$

Сечение поглощения инфракрасного излучения на частоте $\omega \approx \omega_{\varkappa} \pm \pm\omega_{\varkappa'}$ с точностью до множителя, слабо зависящего от температуры, определяется спектральным представлением $\langle\langle M_x(t)\, M_x(0)\rangle\rangle_{\omega}$ проекции дипольного момента $M_x = \sum\limits_{\varkappa_1} m_{\varkappa_1} q_{\varkappa_1} + \sum\limits_{\varkappa_1\varkappa_2} m_{\varkappa_1\varkappa_2} q_{\varkappa_1} q_{\varkappa_2}$. Из приведенных результатов следует, что это сечение пропорцианально $Q_{\varkappa\varkappa'\varkappa\varkappa'}(\omega)$:

$$\langle\langle M_x(t)\, M_x(0)\rangle\rangle_{\omega} = 4\left(1-\frac{1}{2}\delta_{\varkappa\varkappa'}\right)^2 \left(\sum_{\varkappa_1} \frac{3m_{\varkappa_1}\beta_{\varkappa_1\varkappa\varkappa'}}{\omega^2-\omega^2_{\varkappa_1}} + m_{\varkappa\varkappa'}\right)^2 Q_{\varkappa\varkappa'\varkappa\varkappa'}(\omega)$$

$$(\omega \approx \omega_{\varkappa} \pm \omega_{\varkappa'}). \tag{9}$$

Из формул (3), (8) видно, что определение $Q_{\varkappa\varkappa'\varkappa\varkappa'}(\omega)$ (и $\langle\langle M_x(t)M_x(0)\rangle\rangle_\omega$) сводится к вычислению корреляционной функции

$$\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(t) = \langle\langle u_{\varkappa\alpha}(t)\, u_{\varkappa'\beta}(t)\, u^*_{\varkappa\alpha}(0)\, u^*_{\varkappa'\beta}(0)\rangle\rangle. \tag{10}$$

## 2. Расчет корреляционной функции $\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(t)$

Из формулы (10) видно, что для определения $\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(t)$ необходимо знать временную зависимость функции $u_{\varkappa\alpha}(t)$. При этом для определения спектрального распределения $Q_{\varkappa\varkappa'\varkappa\varkappa'}(\omega)$ в области пика ($\omega\approx\omega_\varkappa\pm\omega_{\varkappa'}$) существенно поведение $u_{\varkappa\alpha}(t)$ в асимптотической области больших времен $t\gg t_0$, где $t_0=\max\{\omega_\varkappa^{-1},\omega_m^{-1}\}$, $\omega_m$—максимальная частота непрерывного спектра. Зависимость $u_{\varkappa\alpha}(t)$ была исследована в работе [7]. После исключения колебаний непрерывного спектра в пренебрежении членами высшего порядка малости относительно малых констант было найдено, что $u_{\varkappa\alpha}$ при $t\gg t_0$ удовлетворяет уравнению (см. формулу (10) в [7])

$$\dot{u}_{\varkappa\alpha} = -\frac{3}{2i\omega_{\varkappa\alpha}}\sum_{\varkappa'}\gamma^{\text{eff}}_{\varkappa\varkappa'}y_{\varkappa'}u_{\varkappa\alpha} - (\Gamma_\varkappa\,\text{sign}t - iP_{\varkappa\alpha})\,u_{\varkappa\alpha} + \frac{1}{2i\omega_{\varkappa\alpha}}e^{-i\omega_{\varkappa\alpha}t}f_\varkappa. \tag{11}$$

Здесь $\gamma^{\text{eff}}_{\varkappa\varkappa'}$ обозначает перенормированную (с учетом квадратичных относительно $\beta_{\varkappa\varkappa'\varkappa''}$ членов) константу $\gamma_{\varkappa\varkappa'}$, определенную на стр. 507 работы [7],

$$y_\varkappa = u_{\varkappa 1}u_{\varkappa 2};\quad f_\varkappa = -\sum_k \varepsilon_{\varkappa k}A_k\cos(\omega_k t + \varphi_k);$$

$$\Gamma_\varkappa = \frac{\pi}{4}g_\varkappa(\omega_\varkappa);\quad P_{\varkappa\alpha} = \frac{1}{2\omega_{\varkappa\alpha}}\int_0^\infty \frac{\omega^2 g_\varkappa(\omega)\,d\omega}{\omega_\varkappa^2-\omega^2};\quad g_\varkappa(\omega)\,d\omega = \sum_{\substack{k\\ \omega<\omega_k<\omega+d\omega}}\frac{\varepsilon^2_{\varkappa k}}{\omega_k^2}. \tag{12}$$

Формулы (12) для $\Gamma_\varkappa$ и $P_{\varkappa\alpha}$ выписаны для простейшего случая, когда можно пренебречь членами с $H_{kk'}$ в гамильтониане (1) по сравнению с $H_k=\sum_\varkappa \varepsilon_{\varkappa k}q_\varkappa$ (более общие выражения рассмотрены в работе [7]). Величины $A_k$ и $\varphi_k$ являются случайными амплитудами и фазами колебаний непрерывного спектра, т. е. $f_\varkappa(t)$ является случайной функцией.

Хотя член, содержащий $y_{\varkappa'}u_{\varkappa\alpha}$, делает уравнение (11) нелинейным, формально можно считать это уравнение линейным, рассматривая $y_{\varkappa'}$ как известную функцию. Решая такое линейное уравнение, можно представить $u_{\varkappa\alpha}$ в виде интегральной формы, содержащей $y_{\varkappa'}=u_{\varkappa'1}u_{\varkappa'2}$:

$$u_{\varkappa\alpha} = \exp[iP_{\varkappa\alpha}t + F_{\varkappa\alpha}(t)]\,[u_{\varkappa\alpha}(0)e^{-\Gamma_\varkappa|t|} + x_{\varkappa\alpha}(t)],$$

$$F_{\varkappa\alpha}(t) = \frac{3i}{2\omega_{\varkappa\alpha}}\int_0^t\sum_{\varkappa'}\gamma^{\text{eff}}_{\varkappa\varkappa'}y_{\varkappa'}(t')\,dt',\qquad x_{\varkappa\alpha}(t) = \sum_{k\alpha_1}x_{k\varkappa\alpha\alpha_1}e^{i\varphi_{k\alpha_1}},$$

$$x_{k\varkappa\alpha\alpha_1} = i\,\frac{\varepsilon_{\varkappa k}A_k}{4\omega_{\varkappa\alpha}}e^{-\Gamma_\varkappa|t|}\int_0^t e^{i(\omega_{k\alpha_1}-\tilde{\omega}_{\varkappa\alpha})t_1}\exp\{\Gamma_\varkappa|t_1| - F_{\varkappa\alpha}(t_1)\}\,dt_1. \tag{13}$$

Здесь $u_{\varkappa\alpha}(0) = u_{\varkappa 0}\exp(i\varphi_{\varkappa\alpha})$, $u_{\varkappa 0}$ и $\varphi_\varkappa$ — начальные амплитуда и фаза колебания $\varkappa$, $\varphi_{\varkappa\alpha} = \varphi_\varkappa(-1)^{\alpha-1}$, $\varphi_{k\alpha} = \varphi_k(-1)^{\alpha-1}$, $\tilde{\omega}_{\varkappa\alpha} = \omega_{\varkappa\alpha} + P_{\varkappa\alpha}$, $x_{\varkappa 2} = x^*_{\varkappa 1}$.

Функция $x_{\varkappa\alpha}(t)$ зависит от случайных амплитуд и фаз как непосредственно (через множители $A_k\exp(i\varphi_{k\alpha})$ в $x_{k\varkappa\alpha\alpha_1}(t)$), так и более сложным образом, поскольку они входят в величину $F_{\varkappa\alpha}(t)$. Однако, как показано в работе [7], асимптотически при $t \gg t_0$ с точностью до малых членов $\sim\varepsilon^2$ или $t_0/t$ эта последняя зависимость оказывается несущественной и не влияет на распределение вероятностей случайной функции $x_{\varkappa\alpha}(t)$. Поэтому $x_{\varkappa\alpha}(t)$ можно рассматривать как сумму $N$ случайных слагаемых, пропорциональных $A_k\exp(i\varphi_{k\alpha})$. В пределе $N\to\infty$ распределение этих величин, как следует из теоремы, доказанной Боголюбовым [8], является гауссовским. Это означает, что вероятности $x'_{\varkappa\alpha}(t_n)$ и $x''_{\varkappa\alpha}(t_n)$ $(x_{\varkappa\alpha} = x'_{\varkappa\alpha} + ix''_{\varkappa\alpha})$ для значений вещественной и мнимой частей случайной функции $x_{\varkappa\alpha}(t)$, взятых в различные моменты времени, определяются формулой

$$w(\ldots x'_\varkappa(t_n)\ldots) = w(\ldots x''_\varkappa(t_n)\ldots) = (2\pi)^{-\frac{m}{2}}\,\|A_{\varkappa nn'}\|^{-\frac{1}{2}}\times$$
$$\times\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{n,n'=1}^{m} A^{-1}_{\varkappa nn'}x'_\varkappa(t_n)\,x'_\varkappa(t_{n'})\right\},$$
$$A_{\varkappa nn'} = \frac{1}{2}\langle x_{\varkappa\alpha}(t_n)\,x^*_{\varkappa\alpha}(t_{n'})\rangle = \frac{kT}{4\omega^2_\varkappa}\,e^{-\Gamma_\varkappa(|t_n|+|t_{n'}|)}\,(e^{2\Gamma_\varkappa|t_{\min}|}-1), \tag{14}$$

где $|t_{\min}|$ — наименьшая из величин $|t_n|$ и $|t_{n'}|$, $t_m \equiv t$ (см. формулы (15) (16) в [7]). Величины $x_{\varkappa\alpha}(t_n)$ и $x^*_{\varkappa'\alpha'}(t_{n'})$ при $\varkappa\neq\varkappa'$ или $\alpha\neq\alpha'$ в пренебрежении членами $\approx\varepsilon^2$ статистически независимы.

Подставляя выражение (13) для $u_{\varkappa\alpha}$ в формулы (10), получаем

$$\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(t) = e^{i(P_{\varkappa\alpha}+P_{\varkappa'\beta})t}\,\langle\langle e^{F_{\varkappa\alpha}(t)+F_{\varkappa'\beta}(t)}[u_{\varkappa\alpha}(0)\,u_{\varkappa'\beta}(0)\,e^{-(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'})|t|}+$$
$$+u_{\varkappa'\beta}(0)\,e^{-\Gamma_{\varkappa'}|t|}x_{\varkappa\alpha}(t)+u_{\varkappa\alpha}(0)\,e^{-\Gamma_\varkappa|t|}x_{\varkappa'\beta}(t)+x_{\varkappa\alpha}(t)\,x_{\varkappa'\beta}(t)]\,u^*_{\varkappa\alpha}(0)\,u^*_{\varkappa'\beta}(0)\rangle\rangle. \tag{15}$$

Статистическое усреднение $\langle\langle\ldots\rangle\rangle$ в формуле (15) подразумевает как усреднение по фазам и амплитудам колебаний непрерывного спектра $\varphi_k$, $A_k$, так и по фазам и начальным амплитудам выделенных колебаний $\varphi_\varkappa$, $u_{\varkappa 0}$. Усреднение по амплитудам проводится с больцмановским статистическим весом. Для определения средних заметим, что

$$F_{\varkappa\alpha}(t_m) + F_{\varkappa'\beta}(t_m) = \sum_{\varkappa''} F_{\varkappa''}(t_m), \qquad F_{\varkappa''}(t_m) = \frac{\tilde{\nu}_{\varkappa''}}{2\Gamma_{\varkappa''}}u^2_{\varkappa''0}\,(1-e^{-2\Gamma_{\varkappa''}|t_m|})+$$
$$+\Delta\sum_{n=1}^{m}[\tilde{\mu}_{\varkappa''}(t_n)\,\mathrm{Re}\,(e^{i\varphi_{\varkappa''}}x^*_{\varkappa''1}(t_n))+\tilde{\nu}_{\varkappa''}\,|x_{\varkappa''1}(t_n)|^2], \tag{16}$$

$$\tilde{\nu}_{\varkappa''} = \frac{3i}{2}\left(\frac{\gamma^{\mathrm{eff}}_{\varkappa\varkappa''}}{\omega_{\varkappa\alpha}}+\frac{\gamma^{\mathrm{eff}}_{\varkappa'\varkappa''}}{\omega_{\varkappa'\beta}}\right), \qquad \tilde{\mu}_{\varkappa''}(t_n) = 2\tilde{\nu}_{\varkappa''}u_{\varkappa''0}e^{-\Gamma_{\varkappa''}|t_n|}; \qquad \Delta = \frac{t_m}{m}.$$

Аналогичное усреднение проводилось в работе [7]. Отличие рассматриваемого здесь выражения (15) от усредняемого выражения в [7] заключается в том, что выражение для $\tilde{\nu}_{\varkappa''}$ в [7] содержало $\gamma_{\varkappa\varkappa''}/\omega_{\varkappa}$ вместо $\frac{\gamma^{\text{eff}}_{\varkappa\varkappa''}}{\omega_{\varkappa\alpha}}+\frac{\gamma^{\text{eff}}_{\varkappa'\varkappa''}}{\omega_{\varkappa'\beta}}$ в формуле (16), а усредняемое выражение содержало не билинейную, а линейную функцию от $x_{\varkappa\alpha}(t)$. Поэтому при $\varkappa\neq\varkappa'$, когда среднее от $x_{\varkappa\alpha}(t)\,x_{\varkappa'\beta}(t)$ распадается на произведение средних, можно непосредственно воспользоваться результатами вычисления выражений $\langle\langle\exp(F_{\varkappa\alpha}(t))\,|\,u_{\varkappa}(0)\,|^2\rangle\rangle$ и $\langle\langle\exp\{F_{\varkappa\alpha}(t)\}\,x_{\varkappa\alpha}(t)\,u^*_{\varkappa\alpha}(0)\rangle\rangle$, заменив в них лишь $\gamma_{\varkappa\varkappa''}/\omega_{\varkappa}$ на $\gamma^{\text{eff}}_{\varkappa\varkappa''}/\omega_{\varkappa\alpha}+\gamma^{\text{eff}}_{\varkappa'\varkappa''}/\omega_{\varkappa'\beta}$. В случае удвоенной частоты, когда $\varkappa=\varkappa'$, необходимо вычислить средние от несколько отличающихся выражений. Они могут быть получены аналогичным образом по методике, изложенной в работе [7]. В результате получим следующее выражение для $\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(t)$:

$$\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}=\frac{(kT)^2}{4\omega^2_{\varkappa}\omega^2_{\varkappa'}}(1+\delta_{\varkappa\varkappa'})\,e^{i(P_{\varkappa\alpha}+P_{\varkappa'\beta})t}\tilde{\psi}^{-1}_{\varkappa}(t)\,\tilde{\psi}^{-1}_{\varkappa'}(t)\prod_{\varkappa''}e^{\Gamma_{\varkappa''}t}\tilde{\psi}^{-1}_{\varkappa''}(t),\qquad t\gg t_0, \tag{17}$$

где

$$\tilde{\psi}_{\varkappa''}(t)=\operatorname{ch}\tilde{a}_{\varkappa''}t+\frac{\Gamma_{\varkappa''}(1-2i\tilde{\alpha}_{\varkappa''})}{\tilde{a}_{\varkappa''}}\operatorname{sh}\tilde{a}_{\varkappa''}t,\qquad \tilde{a}^2_{\varkappa''}=\Gamma^2_{\varkappa''}(1-4i\tilde{\alpha}_{\varkappa''}),$$

$$\tilde{\alpha}_{\varkappa''}=\frac{\tilde{\nu}_{\varkappa''}}{4i\Gamma_{\varkappa''}}\,\frac{kT}{\omega^2_{\varkappa''}}. \tag{18}$$

## 3. Анализ спектрального распределения

Формула (17) позволяет определить спектральное распределение временных корреляционных функций

$$\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-i\Omega t}\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(t)\,dt=\frac{1}{\pi}\operatorname{Re}\int\limits_{0}^{\infty}e^{-i\Omega t}\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(t)\,dt, \tag{19}$$

$$\Omega=\omega-\omega_{\varkappa\alpha}-\omega_{\varkappa'\beta}$$

в области максимума $|\Omega|\ll t_0^{-1}$ на комбинированной частоте при произвольном соотношении между малыми параметрами ангармонизма и взаимодействия с решеткой. Для расчета распределения на крыльях, где существенны времена $t\sim t_0$, может быть использована обычная (неасимптотическая) теория возмущений. Однократные интегралы от элементарных функций в (19) нетрудно вычислить с помощью ЭВМ, как это было сделано в работе [7] для области основной частоты. В случае малых и больших параметров $\tilde{\alpha}_{\varkappa''}$ результаты можно приближенно представить в явном виде. В случае малых $\tilde{\alpha}_{\varkappa''}$, раскладывая $\psi_{\varkappa''}(t)$ в ряд до членов

второго порядка малости включительно, получаем

$$\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(t) = \frac{(kT)^2}{4\omega_\varkappa^2\omega_{\varkappa'}^2}(1+\delta_{\varkappa\varkappa'})\, e^{i(P_{\varkappa\alpha}+P_{\varkappa'\beta})t} \exp\Big\{-(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'})t+$$

$$+2i\sum_{\varkappa''}\tilde{\alpha}_{\varkappa''}\Gamma_{\varkappa''}t\,(1+\delta_{\varkappa\varkappa''}+\delta_{\varkappa'\varkappa''})\Big\}\Big\{1+\sum_{\varkappa''}\tilde{\alpha}_{\varkappa''}^2(1+\delta_{\varkappa\varkappa''}+$$

$$+\delta_{\varkappa'\varkappa''})\,[-2\Gamma_{\varkappa''}t+1-e^{-2\Gamma_{\varkappa''}t}]\Big\}. \tag{20}$$

Спектральное представление этой функции имеет вид

$$\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(\omega) = \frac{(kT)^2}{4\omega_\varkappa^2\omega_{\varkappa'}^2\pi}(1+\delta_{\varkappa\varkappa'})\Big\{\frac{\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'}}{(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'})^2+\tilde{\Omega}^2}+\sum_{\varkappa''}\tilde{\alpha}_{\varkappa''}^2(1+\delta_{\varkappa\varkappa''}+$$

$$+\delta_{\varkappa'\varkappa''})\Big[\frac{\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'}}{(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'})^2+\tilde{\Omega}^2}-\frac{\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'}+2\Gamma_{\varkappa''}}{(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'}+2\Gamma_{\varkappa''})^2+\tilde{\Omega}^2}-$$

$$-\frac{2\Gamma_{\varkappa''}[(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'})^2-\tilde{\Omega}^2]}{[(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'})^2+\tilde{\Omega}^2]^2}\Big]\Big\}, \tag{21}$$

$$\tilde{\Omega} = \omega-\tilde{\omega}_{\varkappa\alpha}-\tilde{\omega}_{\varkappa'\beta}-2\sum_{\varkappa''}\tilde{\alpha}_{\varkappa''}(1+\delta_{\varkappa\varkappa''}+\delta_{\varkappa'\varkappa''})\,\Gamma_{\varkappa''}.$$

Этот результат совпадает с аналогичным выражением для $\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}(\omega)$ при $kT \gg \hbar\omega_\varkappa$, полученным при больших вероятностях переходов в работе [4] при помощи существенно другого метода. Интересно сравнить форму линий на комбинированных частотах с линиями на основных частотах. Если константы $\gamma_{\varkappa\varkappa'}^{\text{eff}}$ малы и поправками $\sim\tilde{\alpha}_{\varkappa''}^2$ можно пренебречь, то распределение (21) является лоренцевским с полушириной $2(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'})$. На удвоенных частотах ($\varkappa=\varkappa'$) полуширина линий вдвое больше полуширины на основных частотах. Сдвиг линий на удвоенных частотах, если не рассматривать взаимодействия между $\varkappa$ и $\varkappa''$, т. е. $\tilde{\alpha}_{\varkappa''}=\tilde{\alpha}\delta_{\varkappa\varkappa''}$, в случае малых $\tilde{\alpha}$ в три раза больше сдвига на основной частоте. В случае квазилокальных колебаний, когда $\tilde{\alpha}=\dfrac{3\gamma_{\varkappa\varkappa}^{\text{eff}}kT}{4\omega_\varkappa^3\Gamma_\varkappa}$ и $\Gamma_\varkappa$ не зависит от $T$, этот сдвиг растет с температурой, а в случае локальных колебаний, когда $\Gamma_\varkappa\sim T$, он от температуры не зависит.

Интегральная ширина $\delta\omega_i=\varphi_{\varkappa\alpha\varkappa'\beta}^{-1}(\Omega_m)$ (интенсивность нормирована на единицу) в случае малых $\tilde{\alpha}_{\varkappa''}$ равна

$$\delta\omega_i = \pi(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'})\Big[1+4\sum_{\varkappa''}\tilde{\alpha}_{\varkappa''}^2(1+\delta_{\varkappa\varkappa''}+\delta_{\varkappa'\varkappa''})\frac{\Gamma_{\varkappa''}^2}{(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'})(\Gamma_\varkappa+\Gamma_{\varkappa'}+2\Gamma_{\varkappa''})}\Big]. \tag{22}$$

По мере роста $\tilde{\alpha}_{\varkappa''}$ распределение (19) становится все более асимметричным и смещается, а его интегральная ширина растет. При сильном ангармонизме ($\tilde{\alpha} \gg 1$) вблизи удвоенной частоты в случае одномерного колебания при частотах $\Omega \gg \Gamma_\varkappa$ (когда существенна область времен $\tilde{\alpha}\Gamma_\varkappa t \gg \Gamma_\varkappa t \sim 1$) спектральное распределение имеет вид

$$\varphi_{\varkappa\varkappa}(\Omega) = \frac{(kT)^2}{2\omega_\varkappa^4 \tilde{\Omega}_0} \left\{ \frac{1}{2} \Theta(\tilde{y}) \tilde{y}^2 e^{-\tilde{y}} + \frac{\Gamma_\varkappa}{6\tilde{\Omega}_0 \pi} [e^{-\tilde{y}} \mathrm{Ei}(\tilde{y}) (\tilde{y}^3 - 3\tilde{y}^2 + 6\tilde{y} - 6) - \tilde{y}^2 + 2\tilde{y} - 5] \right\}, \tag{23}$$

$$\tilde{\Omega}_0 = 2\tilde{\alpha}\Gamma_\varkappa; \qquad \tilde{y} = \frac{\Omega}{\tilde{\Omega}_0}; \qquad \Theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}; \qquad \mathrm{Ei}(x) = \int_{-\infty}^{x} \frac{e^{x'}}{x'} dx'.$$

Интегральная ширина распределения (23) $\delta\omega_i = \frac{1}{2} e^2 \tilde{\Omega}_0 \left\{ 1 + \frac{\Gamma_\varkappa}{12\pi\tilde{\Omega}_0} (5e^2 - 2\,\mathrm{Ei}(2)) \right\}$ пропорциональна параметру $\tilde{\alpha}$ и при $\Gamma_\varkappa = 0$ в $e$ раз превышает асимптотическую интегральную ширину распределения вблизи основной частоты. Поправка к интегральной ширине, пропорциональная $\Gamma_\varkappa$, для удвоенной частоты в 11 раз больше, чем для основной частоты. Если $\Omega \gg \tilde{\Omega}_0$, т. е. $\tilde{y} \gg 1$, то $\varphi_{\varkappa\varkappa}(\Omega) \sim 2\Gamma_\varkappa \Omega^{-2}$, т. е. кривая (23) асимптотически приближается к кривой распределения Лоренца.

Критерием применимости рассмотренной теории является, как уже указывалось выше, кроме больших чисел заполнения отсутствие тонкой структуры. Для этого необходимо, чтобы удовлетворялось неравенство $\Gamma \gtrsim \Delta\omega$. Как показано в работе [7], это условие совместимо с условием применимости (23) $\tilde{\alpha} \gg 1$ при больших вероятностях переходов. Классическое рассмотрение тонкой структуры линий не может быть проведено, а квантовое выполнено в [3—5] при $\tilde{\alpha} \gg 1$.

## ЛИТЕРАТУРА


1. W. Hayes, G. D. Jones, R. J. Elliot, C. T. Sennet, Proc. Intern. Conf. Lattice Dynamics, Copenhagen, 1963, p. 475.
2. С. І. Дудкін, УФЖ, **10**, 873, 1093, 1965.
3. М. А. Кривоглаз, И. П. Пинкевич, Опт. и спектр., **23**, 571, 1967.
4. М. А. Кривоглаз, И. П. Пинкевич, УФЖ, **15**, 1817, 1970.
5. М. А. Кривоглаз, И. П. Пинкевич, УФЖ, **15**, 2039, 1970.
6. Н. Н. Боголюбов, Ю. А. Митропольский, Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний, ГИФМЛ, 1958.
7. М. И. Дыкман, М. А. Кривоглаз, Phys. Stat. Sol., **48**, 497, 1971.
8. Н. Н. Боголюбов, О некоторых статистических методах в математической физике, К., Изд-во АН УССР, 1945.


Институт металлофизики АН УССР,
г. Киев

Поступила в редакцию
21.XII 1971 г.

# CLASSICAL THEORY OF SPECTRAL DISTRIBUTION OF SINGLED OUT NON-LINEAR OSCILLATIONS AT COMBINED FREQUENCIES

*M. I. Dykman, M. A. Krivoglaz*

Summary

A calculation of spectral representation for the time correlation function of singled out (local and quasi-local) oscillations was made in the range of multiple and combined frequencies by means of methods of non-linear mechanics and theory of random processes. In a general case of an arbitrary ratio between the non-linearity parameters and constants of the singled out oscillators interaction with the medium, an expression is obtained for tre spectral representation in the form of the elementary function integral. The shape and width of the spectral representation at combined frequency and their connection with distribution characteristics at fundamental frequency are studied.