СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

14 - 10807

А.Ю.Дидык, В.Ю.Юшанхай

РАСЧЕТ СКОРОСТИ ДИПОЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ СПИНА μ^+-МЕЗОНА, ЛОКАЛИЗОВАННОГО В МЕЖДОУЗЛИЯХ КРИСТАЛЛА

1977

14 - 10807

А.Ю.Дидык, В.Ю.Юшанхай

РАСЧЕТ СКОРОСТИ ДИПОЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ СПИНА μ^+-МЕЗОНА, ЛОКАЛИЗОВАННОГО В МЕЖДОУЗЛИЯХ КРИСТАЛЛА

Дидык А.Ю., Юшанхай В.Ю.

14 - 10807

Расчёт скорости дипольной релаксации спина μ^+-мезона, локализованного в междоузлиях кристалла

Рассчитана скорость дипольной релаксации поперечной составляющей спина μ^+-мезона, локализованного в междоузлиях кристаллов различной симметрии. Показано, что сравнение результатов с экспериментальными данными позволит судить о местах локализации μ^+-мезонов в кристаллах и о величине локальной деформации решетки кристалла.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

1. При изучении свойств вещества с помощью поляризованных μ^+-мезонов /1-3/ для описания временного спектра позитронов ($\mu^+ \to e^+$)-распада используется выражение

$$\frac{dN}{dt} = N_0 e^{-t/\tau_\mu} [1 - P(t) a \cos\omega_\mu t], \qquad (1)$$

где a - коэффициент асимметрии, $\omega_\mu = \gamma_\mu H_0$ - лармировская частота прецессии спина мюона, γ_μ - его гиромагнитное отношение, H_0 - величина внешнего магнитного поля, τ_μ - время жизни мюона, P(t) - функция, определяющая временную зависимость скорости релаксации поперечной составляющей спина μ^+-мезона из-за влияния локальных магнитных полей вещества.

Как показано в /3/, в случае ядерной дипольной релаксации спина мюона, локализованного в междоузлии кристалла, экспериментальный спектр хорошо аппроксимируется выражением (1), где:

$$P(t) = \exp(-\sigma^2_{\text{эксп.}}\, t^2), \qquad (2)$$

а параметр $\sigma_{\text{эксп.}}$ подбирается по методу наименьших квадратов. О величине $\sigma_{\text{эксп.}}$ говорят как о скорости дипольной релаксации спина μ^+-мезона при отсутствии диффузии.

В теории ЯМР хорошо известен следующий факт: если затухание прецессии спина описывается гауссовой зависимостью (2), то значение второго момента M_2

резонансной кривой обеспечивает удовлетворительное приближение для ширины $\sigma_{\text{эксп.}}$, а именно $M_2 \simeq 2\sigma_{\text{эксп.}}$. Ниже получены значения второго момента M_2 при различных величинах внешнего магнитного поля H_0.

Принимая обозначение $M_2 = 2\sigma_{\text{теор.}}$, следует ожидать, что $\sigma_{\text{теор.}} \simeq \sigma_{\text{эксп.}}$.

Но, как правило, экспериментальные значения $\sigma_{\text{эксп.}}$ меньше соответствующих теоретических, $\sigma_{\text{эксп.}}/\sigma_{\text{теор.}} < 1$, так как расчёты проводятся для жесткой кристаллической решетки, т.е. без учёта раздутия ячейки кристалла, вызванного присутствием в ней мюона. По величине отношения $\sigma_{\text{эксп.}}/\sigma_{\text{теор.}}$ можно судить о величине этого раздутия. Но ситуация несколько осложняется тем, что в кристаллах со сложной решеткой существуют междоузлия различной симметрии, причём каждому типу междоузлий соответствует своя расчётная скорость дипольной релаксации, и априори нельзя сказать, в каком из них преимущественно локализуется μ^+-мезон.

Тем не менее о локализации мюона все же можно судить по ряду отношений $\sigma_{\text{эксп.}}/\sigma_{\text{теор.}}$ для различных значений внешнего магнитного поля. Следует ожидать, что эта частица не меняет мест локализации с изменением H_0.

Проблема определения местоположения в кристаллах примесной частицы, в особенности протонов, привлекает определенное внимание в целом ряде теоретических и экспериментальных исследований. Особый интерес вызывает локализация протонов в металлах. По-видимому, протон и мюон будут занимать междоузлия одного и того же типа, поскольку в электромагнитных взаимодействиях ведут себя одинаково. Поэтому по результатам исследований для мюона можно судить о поведении водорода в веществе.

2. Общий гамильтониан системы, состоящей из μ^+-мезона и ядер кристалла, можно записать в виде:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\mu-n} + \mathcal{H}_{n-n}, \qquad (3)$$

где

$$\mathcal{H}_0 = -\gamma_\mu \hbar H_0 S_z - \gamma_n \hbar H_0 \sum_i I_z^i -$$

– зеемановский гамильтониан системы спинов во внешнем поле H_0, направленном вдоль оси z; $\vec{S}$ и $\vec{I}^{\,i}$ – операторы спинов мюона и i-го ядра, γ_n – гиромагнитное отношение ядер кристалла; $\mathcal{H}_{n-n}$ – гамильтониан дипольных взаимодействий ядер. Далее им пренебрегаем, так как дипольное взаимодействие ядер проявляется на временах

$$t \simeq \left(\frac{\mu_n^2}{r^3}\right)^{-1} \simeq 10^{-5} \text{ c},$$

существенно больших, чем характерное время наблюдения $\sim 10^{-6}$ с. Здесь μ_n – магнитный момент ядер, r – расстояние между соседними ядрами. Гамильтониан дипольных взаимодействий мюона и ядер $\mathcal{H}_{\mu-n}$ выписан ниже в обозначениях Ван-Флека:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\mu-n} &= \gamma_\mu \gamma_n \hbar^2 \sum_i r_i^{-3} (A_i + B_i + C_i + D_i + E_i + F_i), \\
A_i &= S_z I_z^i (1 - 3\cos^2\theta_i), \\
B_i &= -\frac{1}{4}(1 - 3\cos^2\theta_i)(S_+ I_-^i + S_- I_+^i), \\
C_i &= -\frac{3}{2}(S_z I_+^i + S_+ I_z^i) \sin\theta_i \cos\theta_i \, e^{-i\phi_i}, \\
D_i &= -\frac{3}{2}(S_z I_-^i + S_- I_z^i) \sin\theta_i \cos\theta_i \, e^{i\phi_i}, \\
E_i &= -\frac{3}{4}\sin^2\theta_i \, e^{-2i\phi_i} S_+ I_+^i, \\
F_i &= -\frac{3}{4}\sin^2\theta_i \, e^{2i\phi_i} S_- I_-^i,
\end{aligned} \qquad (4)$$

где ϕ_i и θ_i – соответственно азимутальный и полярный углы радиус-вектора $\vec{r}_i$, соединяющего i-е ядро и мюон.

Обоснование того, что при различных величинах внешнего магнитного поля H_0 следует учитывать лишь те или иные члены гамильтониана $\mathcal{H}_{\mu-n}$, содержится в [4] и вкратце сводится к следующему: различные члены гамильтониана $\mathcal{H}_{\mu-n}$ приводят к матричным элементам от спиновых операторов $\vec{S}$, $\vec{I}^i$, осциллирующим с одной из частот:

$$\gamma_\mu H_0,\ \gamma_n H_0,\ \gamma_\mu H_d,$$

где H_d – дипольное поле, наводимое ядрами кристалла на мюоне, причем быстроосциллирующие матричные элементы не вносят вклада в значение второго момента M_2. В силу того, что $\gamma_\mu / \gamma_n > 10$, для большинства ядер выполняется следующее сильное неравенство для ларморовских частот:

$$\gamma_\mu H_0 \gg \gamma_n H_0.$$

Учёт в $\mathcal{H}_{\mu-n}$ секулярных частей A_i приводит к сдвигу ларморовской частоты вращения спина мюона на величину $\gamma_\mu H_d$. Если же поля H_0 достаточно сильные, т.е.

$$\gamma_n H_0 \gg \gamma_\mu H_d,$$

то следует пренебречь в $\mathcal{H}_{\mu-n}$ слагаемыми B_i, C_i, D_i, E_i, F_i, не дающими вклада в значение второго момента M_2. В этом случае эффективный гамильтониан $\mathcal{H}_{\mu-n}$ сводится к следующему:

$$\mathcal{H}_{\mu-n} = \gamma_\mu \gamma_n \hbar^2 \sum_i r_i^{-3} S_z I_z^i (1 - 3\cos^2\theta_i). \qquad (5)$$

При промежуточных значениях поля H_0, когда

$$\gamma_\mu H_0 \gg \gamma_\mu H_d \gtrsim \gamma_n H_0,$$

необходимо учитывать вклад от слагаемых C_i и D_i, вследствие чего эффективный дипольный гамильтониан принимает вид:

$$\mathcal{H}_{\mu-n} = \gamma_\mu \gamma_n \hbar^2 \sum_i r_i^{-3} S_z [I_z^i (1-3\cos^2\theta_i) - \qquad (6)$$

$$- \frac{3}{2}\sin 2\theta_i (I_x^i \sin\phi_i + I_y^i \cos\phi_i)].$$

При нулевом внешнем поле ($H_0=0$) зеемановские слагаемые в (3) пропадут и релаксация спина мюона будет обусловлена полным гамильтонианом (4).

3. Рассчитаем далее скорость дипольной релаксации спина μ^+-мезона, основываясь на уравнении для матрицы плотности системы спинов $\rho(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [\mathcal{H}, \rho(t)]. \qquad (7)$$

Решение этого уравнения запишем в форме

$$\rho(t) = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} \rho(0) e^{i\mathcal{H}t/\hbar}, \qquad (8)$$

где $\rho(0)$ – матрица плотности системы спинов в начальный момент времени до включения взаимодействия мюона с ядрами кристалла. Поэтому будем считать, что

$$\rho(0) = \rho_n(0) \cdot \rho_\mu(0), \qquad (9)$$

где $\rho_n(0)$ и $\rho_\mu(0)$ – матрицы плотности системы ядер и мюона соответственно.

Поскольку спин μ^+-мезона первоначально направлен по оси x, матрицу плотности $\rho_\mu(0)$ можно выбрать в виде

$$\rho_\mu(0) = \frac{1}{2} I + S_x, \qquad (10)$$

где I – единичная матрица (2 x 2), а S_x – оператор x-й проекции спина.

Тогда среднее наблюдаемое значение $\langle S_x \rangle_t$ будет равно:

$$\langle S_x \rangle_t = Sp\{ e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} \rho(0) e^{i\mathcal{H}t/\hbar} S_x \} / Sp\{\rho(0)\}. \qquad (11)$$

Причём, в (11) след берется по ядерным и мюонным переменным. В высокотемпературном приближении для матрицы плотности системы ядерных спинов $\rho_n(0)$, используя соотношение (10), можно (11) преобразовать к виду:

$$\langle S_x \rangle_t = Sp\{e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} S_x e^{i\mathcal{H}t/\hbar} S_x\}/(2I+1)^N. \qquad (12)$$

Учитывая далее вид гамильтониана (3), после несложных преобразований получаем

$$\langle S_x \rangle_t = \cos\omega_\mu t \cdot Sp\{e^{-i\mathcal{H}_{\mu-n}t/\hbar} S_x e^{i\mathcal{H}_{\mu-n}t/\hbar} S_x\} =$$

$$= \frac{1}{2} P(t) \cos\omega_\mu t. \qquad (13)$$

Выберем гамильтониан $\mathcal{H}_{\mu-n}$ в форме (6). Тогда для малых времен наблюдения t, разложив экспоненты, входящие в (13), в ряд, и ограничиваясь членами, квадратичными по времени, берем след по ядерным и мюонным переменным, и для функции $P(t)$ получаем выражение в области промежуточных внешних магнитных полей:

$$P_{\text{теор.}}(t) \simeq 1 - \frac{1}{6}(\gamma_\mu \gamma_n \hbar)^2 I(I+1) \sum_i r_i^{-6} [(1-3\cos^2\theta_i)^2 +$$

$$+ \frac{9}{4}\sin^2 2\theta_i] t^2. \qquad (14)$$

Проделывая эти же преобразования с использованием гамильтониана (4), в нулевом внешнем поле H_0 получаем

$$P_{\text{теор.}}(t) = 1 - \frac{(\gamma_\mu \gamma_n \hbar)^2}{6} I(I+1) \sum_i r_i^{-6} [5 - 3\cos^2\phi_i \cdot \sin^2\theta_i] t^2. \qquad (15)$$

Проводя усреднение по углам θ_i и ϕ_i (случай поликристалла), для величин $\sigma_{\text{теор.}}$ имеем выражения:

$$\sigma^2_{\text{теор. 1}} = \frac{1}{3}(\gamma_\mu \gamma_n \hbar)^2 I(I+1) \sum_i r_i^{-6}, \quad H_d \ll H_0 \lesssim \frac{\gamma_\mu}{\gamma_n} H_d; \qquad (16)$$

$$\sigma^2_{\text{теор. 2}} = \frac{2}{3}(\gamma_\mu \gamma_n \hbar)^2 I(I+1) \sum_i r_i^{-6}, \quad H_0 = 0. \qquad (17)$$

Приведем из работы [4] величину $\sigma^2_{\text{теор. 3}}$ для случая сильных полей:

$$\sigma^2_{\text{теор. 3}} = \frac{2}{15}(\gamma_\mu \gamma_n \hbar)^2 I(I+1) \sum_i r_i^{-6}. \qquad (18)$$

Таким образом, скорости релаксации спина мюона в нулевом, промежуточном и сильном внешних полях соотносятся как:

$$\sigma_{\text{теор. 2}} : \sigma_{\text{теор. 1}} : \sigma_{\text{теор. 3}} = \sqrt{5} : \sqrt{\frac{5}{2}} : 1. \qquad (19)$$

4. Рассчитаем $\sigma_{\text{теор.}}$ для нескольких веществ с кристаллическими решетками различной симметрии и для двух типов междоузлий (октапоры и тетрапоры), которые может занимать μ^+-мезон. Данные по двум веществам, меди и ванадию, приведены в таблице.

Из таблицы следует, что, во-первых, на основании имеющихся экспериментальных данных невозможно достоверно сказать о том, где же в действительности локализуется мюон (в отличие от выводов работы [5]), и, во-вторых, все соответствующие значения $\sigma_{\text{теор.}}$ больше $\sigma_{\text{эксп.}}$. Таким образом, можно сделать вывод, что ячейка кристалла при помещении в нее μ^+-мезона деформируется и эта деформация носит характер сильного раздутия, хотя оценить количественно его величину затруднительно.

Таблица

Вещество	Тип решетки	a (Å)	Спин $I(\hbar)$	Магнитный момент (МБ)	Поле	σ (мкс$^{-1}$) тетрапора	σ (мкс$^{-1}$) октапора	$\sigma_{эксп}$
Cu медь	Г.Ц.К	3,594	3/2	2,227 (69%) 2,385 (31%)	Сильное	0,255	0,204	
					Промежуточное	0,404	0,323	0,252 ± 0,007
					Нулевое	0,571	0,456	
V ванадий	О.Ц.К.	3,0282	7/2	5,1470	Сильное	0,399	0,429	
					Промежуточное	0,631	0,678	0,287 ± 0,007
					Нулевое	0,893	0,960	

Следует думать, что, используя всю совокупность экспериментальных данных по релаксации спина μ^+-мезона в зависимости от величины внешнего магнитного поля, можно сделать однозначный вывод о том, где преимущественно останавливается мюон при его диффузии по междоузлиям кристалла, а затем путем сравнения соответствующих $\sigma_{эксп.}$ и $\sigma_{теор.}$ оценить величину деформации пор кристаллической решетки. Однако не исключена возможность, что мюон занимает с определенными вероятностями междоузлия обоих типов, что, естественно, несколько усложнит подобный анализ.

В заключение авторы благодарят И.И.Гуревича, В.А.Жукова, Б.А.Никольского, В.И.Селиванова за полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гребинник В.Г. и др. ЖЭТФ, 1975, 68, с. 1548.
2. Гребинник В.Г. и др. Препринт ИАЭ-2635, М., 1976.
3. Гуревич И.И. и др. Phys.Lett., 1972, 40A, p.143.
4. Абрагам А. Ядерный магнетизм. ИЛ., М., 1961.
5. Лундин А.В., Фалалеев О.В., Сергеев Н.А. Письма в ЖЭТФ, 1976, 25, с. 103.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 июля 1977 года.