

Ю-95

17-80-647

ЮШАНХАЙ  
Виктор Юлиевич

ДИНАМИКА ЧАСТИЦЕПОДОБНЫХ  
ВОЗБУЖДЕНИЙ В КРИСТАЛЛАХ

Специальность 01.04.02. — теоретическая  
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Актуальность проблемы

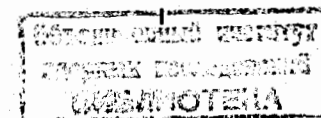
Изучение динамики элементарных возбуждений в твердом теле необходимо для понимания многих его статистических свойств, важных в прикладных и фундаментальных исследованиях. В последнее время все большее внимание привлекают к себе квазиодномерные кристаллические структуры. Свойства таких структур могут быть описаны сравнительно простыми одномерными моделями. Динамические уравнения, описывающие элементарные возбуждения в таких моделях, в ряде случаев сводятся к известным нелинейным уравнениям (уравнению Шредингера с кубической нелинейностью, уравнению синус-Гордона и др.). Последние являются полностью интегрируемыми и имеют в качестве решений частицеподобные (солитонные) решения. Нелинейные динамические уравнения находят в последнее время применение для описания все более широкого круга явлений в физике конденсированного состояния вещества<sup>1/</sup>.

Динамические и структурные свойства твердых тел изучаются как традиционными средствами эксперимента (рассеяние медленных нейтронов ЯМР и др.), так и с помощью интенсивно развиваемого в последнее время нового метода, использующего получаемые на ускорителе пучки поляризованных положительных мюонов. В этой связи задачи исследования особенностей поведения элементарных возбуждений в квазиодномерных структурах и положительных мюонов в различных кристаллах являются бесспорно актуальными.

Цель работы. Использование методов современной квантовой теории твердого тела для исследования на основе адекватных модельных представлений следующих проблем: особенности динамики частицеподобных магнитных возбуждений ряда квазиодномерных магнитоупорядоченных веществ и их вклад в рассеяние медленных нейтронов в этих веществах; поведение в кристалле избыточной заряженной частицы, обладающей спином и посредством короткодействующего потенциала взаимодействующей с колебаниями решетки кристалла (проблема полярона); процесс спиновой релаксации поляризованных частиц (положительных мюонов, в частности), диффундирующих в решетке кристаллов различных симметрий.

Научная новизна и практическая ценность

В диссертации в различных квантовомеханических приближениях в континуальном пределе исследована одномерная холстейновская модель полярона и показано, что возможными поляронными состояниями в такой модели, наряду с зонным и сильно локализованным, является солитонное состояние. Последнее описывается решением нелинейного уравнения Шредингера и дает новый возможный механизм переноса заряда в одномерных структурах.



Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук  
профессор

В.К. ФЕДЯНИН

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук  
профессор

Ю.А. ИЗКМОВ

доктор физико-математических наук  
старший научный сотрудник

Б.И. САДОВНИКОВ

Ведущее научно-исследовательское учреждение: Ленинградский государственный университет им. А.А.Жданова.

Автореферат разослан " " \_\_\_\_\_ 1980 года.

Защита состоится " " \_\_\_\_\_ 1980 года на заседании Специализированного совета К047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г.Дубна, Московская область.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета  
кандидат физико-математических наук

В.И. КУРАВЛЕВ

Впервые подсчитан вклад в продольную корреляционную функцию и в продольную часть динамического структурного фактора солитонных решений нелинейного уравнения Ландау-Лифшица для одномерного ферромагнетика с анизотропией "легкая ось" и уединенных магнитных решений нелинейного уравнения Шредингера для изотропного гейзенберговского ферромагнетика. Исследовано влияние внешнего магнитного поля на параметры солитонного решения уравнения синус-Гордона в одномерном классическом ферромагнетике с анизотропией "легкая плоскость". Предложено развитие представления и результаты проверить в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов в квазиодномерных ферромагнетиках

Построена квантовая модель, описывающая диффузию положительных мюонов в решетке кристалла. Модель исходит из предположения о наличии двух зонных состояний мюона и учитывает поляронный эффект в кристалле, что позволяет дать качественное объяснение обнаруженной в эксперименте "аномальной" диффузии мюонов в ниобии и висмуте.

Расчетаны скорости спиновой релаксации положительных мюонов в кристаллах различной симметрии. Предложен метод определения мест локализации мюонов и величин связанной с ним поляронной деформации решетки путем сравнения расчетных значений с наблюдаемыми в процессе эксперимента, при различных магнитных полях, значениями скоростей спиновой релаксации.

Получено замкнутое выражение, дающее связь между скоростью диффузии мюонов в решетке кристалла и наблюдаемой в эксперименте скоростью спиновой релаксации мюонов. Получены оценки для параметров температурной зависимости коэффициента диффузии  $D = D(T)$  мюонов в меди.

Для защиты выдвигаются следующие основные результаты, полученные в диссертации:

1. На основе модели Холстейна развиты методы учета короткодействующего электрон-фононного взаимодействия: адиабатическое приближение, метод канонического преобразования, метод уравнения движения, позволяющие в различной мере учесть результаты такого динамического взаимодействия. Показано, что в спектр возможных состояний поляронного возбуждения в одномерном кристалле, наряду с сильно локализованным и зонным, входит солитонное состояние. Получен энергетический спектр солитонного состояния.

2. В одномерном анизотропном магнетике методом уравнения движения в длинноволновом приближении получены слабо возбужденные состояния, описываемые солитоноподобными решениями модифицированного уравнения Шредингера с кубической нелинейностью, выведенного ранее<sup>3,4</sup> при исследовании экситон-фононной системы с резонансным взаимодействием.

3. Развита феноменологический подход к выведению статистических свойств одномерных систем с нелинейной динамикой, описываемых уравнением Шредингера с кубической нелинейностью и нелинейным уравнением Ландау-Лифшица с учетом анизотропии магнитного взаимодействия.

4. В области низких температур оценен вклад в продольную часть динамического структурного фактора солитонных спиновых возбуждений для одномерного ферромагнетика с изотропным гейзенберговским обменом, помещенного во внешнее магнитное поле. Существование солитонной моды спиновых возбуждений обусловлено взаимодействием спиновых отклонений с колебаниями решетки одномерной цепочки. Обсуждается возможность наблюдения солитонов, существующих как связанное состояние спиновых отклонений и колебаний решетки, в квазиодномерном ферромагнетике  $[(CH_3)_4N][NiCl_2]$  в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов.

5. Учтен вклад в динамический структурный фактор солитонных решений нелинейного уравнения Ландау-Лифшица для одномерного ферромагнетика с анизотропией "легкая ось". Показано, что следствием существования солитонной моды магнитных возбуждений является наличие квазиупругой компоненты в спектрах рассеяния нейтронов в исследуемом ферромагнетике.

6. Установлено влияние магнитного поля и характера анизотропии обменного взаимодействия на параметры солитонного решения уравнения синус-Гордона в одномерном ферромагнетике с анизотропией "легкая плоскость". Предложено развитие представления проверить в экспериментах по рассеянию нейтронов на квазиодномерных ферромагнетиках  $CsNiF_3$  и  $RbFeCl_3$ .

7. Учтены возможности экспериментального  $\mu^+$ -мезонного метода в изучении диффузии легкой примесной частицы в металлах. На основе уравнения Вангснесса-Блоха для спиновой матрицы плотности получена связь между наблюдаемой в эксперименте скоростью спиновой релаксации положительных мюонов  $\Lambda$  и коэффициентом их диффузии  $D$ .

8. На основе метода моментов теории ЯМР рассчитана скорость релаксации  $\Lambda$  мюона, локализованного в междоузлиях кристаллов различной симметрии. Показано, что сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными в широком интервале значений внешних магнитных полей дает возможность судить о местах преимущественной локализации мюонов и о величине поляронной деформации решетки кристалла, вызванной присутствием в ней положительного мюона.

9. Предложена квантовая модель для описания диффузии мюонов в кристаллах. Модель основана на представлении о поляронном состоянии мюона и на предположении о наличии двух энергетических зон, разрешенных для движения мюонов. На базе формулы Кубо получено выражение для коэффициента диффузии мюонов в широком интервале температур.

10. На основе предложенной модели дано возможное объяснение обнаруженной в эксперименте в образцах висмута и ниобия низкотемпературной "аномальной" квантовой диффузии мюонов.

### Апробация диссертации

Результаты диссертации докладывались на семинарах ЛТФ и ЛЯП ОИЯИ, в Институте атомной энергии им. И.В.Курчатова, на Международном симпозиуме по проблемам мезонной химии и мезомолекулярных процессов в веществе (Дубна, 1977 г.), на 21-м Всесоюзном совещании по физике низких температур (Харьков, 1980 г.), а также были представлены на Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1977 г.).

### Публикации

По результатам диссертации опубликовано десять работ.

### Объем работы

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и двух приложений, содержит 109 страниц машинописного текста, 2 рисунка, 2 таблицы. Библиографический список включает 73 названия.

### СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении содержится краткий обзор современного состояния исследования свойств одномерных систем в физике конденсированного состояния вещества, описываемых полностью интегрируемыми нелинейными динамическими уравнениями. Также дан краткий исторический обзор возникновения и развития нового мюонного метода исследования свойств конденсированных сред. Приводится обоснование выбора темы и кратко изложено содержание диссертации.

В первой главе диссертации на основе одномерной модели Холстейна с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{lat} + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{int},$$

$$\mathcal{H}_{lat} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_l \frac{\partial^2}{\partial u_l^2} + \frac{1}{2} M \omega_0^2 \sum_l u_l^2 + \frac{1}{2} M \omega_1^2 \sum_l u_l u_{l+1},$$

$$\mathcal{H}_e = (\epsilon + w) \sum_l a_l^\dagger a_l - J \sum_l (a_{l+1}^\dagger a_l + a_l^\dagger a_{l+1}), \quad \mathcal{H}_{int} = V \sum_l a_l^\dagger a_l \cdot u_l$$

исследуются эффекты динамического электрон-фононного взаимодействия, описываемого  $\mathcal{H}_{int}$  в линейном по смещениям приближении. Показано, при каких значениях параметров модели: жесткости решетки  $M\omega_0^2$ , ширине электронного уровня  $J$ , силе электрон-фононной связи  $V$ , сле-

дует ожидать, что полярон будет описываться волновой функцией солитонного типа. Последняя является решением нелинейного уравнения Шредингера и дает возможное состояние заряженной частицы в кристалле, в определенном смысле промежуточное между зонным и сильно локализованным состояниями. При этом использованы различные подходы: адиабатическое приближение (в § 1), метод канонического преобразования исходного гамильтониана (§ 2), а также метод уравнения движения (§ 3), позволяющие в различной мере учесть результаты динамического электрон-фононного взаимодействия в модели Холстейна.

В § 4 главы I на основе метода уравнения движения исследован одномерный анизотропный магнетик. Найдено, что слабо возбужденными состояниями такого магнетика являются частицеподобные возбуждения, описываемые решениями модифицированного уравнения Шредингера с кубической нелинейностью

$$i\dot{\phi}_t + \phi_{xx} + \alpha \phi_x^* + |\phi|^2 \phi = 0.$$

Это уравнение, впервые полученное для экситон-фононной системы, является не вполне интегрируемым и допускает как формирование, так и взаимодействие солитонов<sup>3,4/</sup>.

Во второй главе диссертации на основе феноменологического подхода, предложенного в<sup>5/</sup>, оценен вклад солитонных возбуждений в продольную часть динамического структурного фактора  $\mathcal{S}^{sol}(q, \omega)$  ряда квазиодномерных магнетиков<sup>6/</sup>. Так, в § I исследован изотропный гейзенберговский магнетик  $[(CH_3)_4N][NiCl_2]$ , наличие солитонной моды в котором предположительно обусловлено взаимодействием спинового отклонения с колебаниями решетки кристалла. Вклад солитонных возбуждений  $\mathcal{S}^{sol}(q, \omega)$  выражается соотношением

$$\mathcal{S}^{sol}(q, \omega) \sim \bar{n}_s \cdot \frac{1}{2\pi|q|} \left(\frac{m_s}{2\pi T}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m_s}{2T} \left(\frac{\omega}{q}\right)^2} \left(\frac{\sqrt{q} \cdot \Delta}{2}\right)^2 / s\hbar^2 \frac{\sqrt{q} \cdot \Delta}{2},$$

где  $\bar{n}_s$  - средняя плотность солитонов при температуре  $T$ ,  $m_s$  - масса солитона, и  $\Delta$  - его линейный размер. В § 2 рассмотрен ферромагнетик, описываемый нелинейным уравнением Ландау-Лифшица с анизотропией типа "легкая ось"  $\vec{n}$ :

$$\hbar \vec{S}_t = J(\vec{S} \times \vec{S}_{\xi\xi}) + A(\vec{S} \times \vec{n})(\vec{S} \cdot \vec{n}),$$

где  $\xi$  - координата вдоль цепочки и  $J > 0, A > 0$ . Третий параграф посвящен изучению влияния внешнего магнитного поля и характера анизотропии обменного взаимодействия на параметры солитонного решения уравнения синус-Гордона для классических ферромагнетиков с анизотропией типа "легкая плоскость", таких, как  $CsNiF_3$  и  $RbFeCl_3$ .

Обсуждаются эксперименты по рассеянию нейтронов, в которых может быть измерена величина  $\mathcal{S}^{sol}(q, \omega)$  и найдены солитонные моды возбуждений.

В третьей главе диссертации исследуются особенности диффузии положительных мюонов в металлических кристаллах. В § I обсуждаются экспериментальные аспекты проблемы, а также на основе уравнения Вангснесса-Блоха для спиновой матрицы плотности выведена связь между наблюдаемой в эксперименте скоростью  $\mathcal{L}$  спиновой релаксации мюонов и коэффициентом их диффузии  $\mathcal{D}$ . В § 2 на основе метода моментов теории ЯМР рассчитана скорость  $\mathcal{L}$  спиновой релаксации мюона, локализованного в междоузлиях кристалла различной симметрии и при различных значениях внешнего магнитного поля  $H$ . Симметрию межузельных пор, в которых преимущественно локализуется мюон, предложено выводить путем сравнения расчетных значений  $\mathcal{L}$  с экспериментальными в широком интервале величин поля  $H$ . В § 3 построена квантовая модель, описывающая диффузию мюонов по решетке кристалла. В основе лежат предположение о поляронном состоянии мюона в кристалле, а также предположение о наличии двух зон,  $\mathcal{J}_1$  и  $\mathcal{J}_2$ , разрешенных для движения мюона. Гамильтониан модели имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int}$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_q \hbar \omega_q (b_q^+ b_q + \frac{1}{2}) + \sum_{\alpha=1,2} \left\{ \epsilon_\alpha \sum_{\vec{m}} a_{\alpha\vec{m}}^+ a_{\alpha\vec{m}} + \sum_{\vec{m}, \vec{j}} \mathcal{J}_\alpha(\vec{q}) a_{\alpha\vec{m}+\vec{j}}^+ a_{\alpha\vec{m}} \right\} + \sum_{\vec{m}, \vec{j}} \sum_q \left\{ \mathcal{I}_q(\vec{q}) a_{2\vec{m}+\vec{j}}^+ a_{1\vec{m}} b_q + \mathcal{I}_q^*(-\vec{q}) a_{1\vec{m}+\vec{j}}^+ a_{2\vec{m}} b_q^+ \right\}$$

$$\mathcal{H}_{int} = \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\vec{m}} a_{\alpha\vec{m}}^+ a_{\alpha\vec{m}} \left\{ \sum_q \hbar \omega_q u_{\alpha\vec{m}}^q (b_q^+ + b_{-q}^+) + \sum_{q, q'} V_{\alpha\vec{m}}^{qq'} (b_q^+ + b_{-q}^+) (b_{q'} + b_{-q'}) \right\}$$

Здесь  $b_q^+$  ( $b_q$ ) - оператор рождения (уничтожения) фонона с квазиимпульсом  $q$ ,  $a_{\alpha\vec{m}}^+$  ( $a_{\alpha\vec{m}}$ ) - оператор рождения (уничтожения) частицы на уровне  $\alpha$  ( $\alpha=1,2$ ) междоузлия  $\vec{m}$ ,  $\mathcal{I}_q(\vec{q})$  - матричный элемент перехода частицы в соседнее междоузлие с изменением номера уровня. Взаимодействие частицы с решеткой может быть сильным, его конкретный вид определяет величины  $u_{\alpha\vec{m}}^q$  и  $V_{\alpha\vec{m}}^{qq'}$ . В рамках модели на базе формулы Кубо теории линейного отклика получено выражение для коэффициента диффузии в широком интервале температур. На основе предположения  $\mathcal{J}_2 \gg \mathcal{J}_1$  дано возможное объяснение наблюдаемой в эксперименте низкотемпературной "аномальной" диффузии мюонов в висмуте и ниобии.

В заключении перечислены основные результаты, полученные в диссертации.

В приложении I представлены основные этапы вычисления динамического структурного фактора  $\mathcal{S}^{sol}(q, \omega)$  одномерного ферромагнетика, исследуемого в § I главы II диссертации.

В приложении 2 представлены основные этапы вычисления  $\mathcal{S}^{sol}(q, \omega)$  для одномерного ферромагнетика, исследуемого в § 2 главы II диссертации.

#### Результаты диссертации опубликованы в работах:

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай. Полярон в одномерной модели Холстейна в адиабатическом приближении. Дубна, 1978. (Сообщение ОИЯИ, PI7-II1996).

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай. Солитонные возбуждения в модели полярона большого радиуса. ТМФ, 1978, т. 35, № 2, с. 240-246.

V.K.Fedyanin, V.Yu.Yushankhai: Soliton-Like Excitations in Large-Polaron Model. Международный симпозиум по избранным проблемам стат. механики (Дубна, 1977). Труды. - ОИЯИ, Д17-II490, Дубна, 1977. с. 310-319.

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай. Полярон в одномерной модели Холстейна и метод канонического преобразования. Дубна, 1979. (Сообщение ОИЯИ, PI7-I2I55)

V.K.Fedyanin, V.Yu.Yushankhai. One-Dimensional Anisotropic Magnetic in the Long-Wave Approximation. Phys.Lett. A, 1979, v. 70, No. 5-6, p. 459-460.

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай. Вклад одномерных магнитных солитонов в спектр рассеяния нейтронов. Дубна, 1979. (Сообщение ОИЯИ, PI7-I2896)

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай. Влияние магнитного поля на параметры солитонного решения уравнения синус-Гордона в одномерном ферромагнетике. 21-е Всесоюзное совещание по физике низких температур (Харьков, 1980) Тезисы докладов, часть II. - Харьков: ФТИНТ АН УССР, 1980. - с. 98-99.

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай. Возможность наблюдения солитонной моды в  $[(\text{CN})_2]_4\text{N}[\text{NiCl}_2]$  в экспериментах по рассеянию нейтронов. Дубна, 1980 (Препринт ОИЯИ, PI7-80-69)

В.К.Федянин, В.Ю.Юшанхай. Вклад солитонной моды в динамический структурный фактор одноосного ферромагнетика. Дубна, 1980 (Препринт ОИЯИ, PI7-80-I48)

А.Ю.Дидык, В.Д.Шестаков, В.Ю.Юшанхай. О дипольной релаксации спина  $\mu^+$ -мезона, диффундирующего в кристалле. В сб.: "Мезоны в веществе". Труды Международного симпозиума по проблемам мезонной химии и мезомолекулярным процессам в веществе (Дубна, 1977). - Дубна: ОИЯИ, Д1,2,14,-I0908, 1977. - с. 277-281.

А.Ю.Дидык, В.Ю.Юшанхай. Расчет скорости дипольной релаксации спина  $\mu^+$ -мезона, локализованного в междоузлиях кристалла. Дубна, 1977 (Сообщение ОИИИ, I4-I0807)

В.Л.Аксенов, В.Ю.Юшанхай. О квантовой диффузии легкой частицы в кристалле. 21-е Всесоюзное совещание по физике низких температур. (Харьков, 1980). Тезисы докладов, часть IV. - Харьков: ФТИИТ АН УССР, 1980. - с. 80-81.

В.Л.Аксенов, В.Ю.Юшанхай. Квантовая диффузия  $\mu^+$ -мезонов в кристаллах. Дубна, 1980. (Сообщение ОИИИ, P17-80-321)

#### Литература

1. Solitons in Physics. - Springer Series in Solid-State Science, v. 8, Soliton and Condensed Matter Physics, (ed. Bishop A.R., Schneider T.) - Berlin: Springer, 1978. - p. 1-340.
2. Hyperfine Interactions, 1979, v. 6 Proc. 1-st Topical Meeting on Muon Spin Rotation. (Rorschach, 1978).
3. Маханьков В.Г., Федянин В.К. Солитоноподобные решения уравнений, описывающих возбуждения в одномерных молекулярных кристаллах. - Докл. АН СССР, 1977, т. 236, № 4, с. 838-841.
4. Маханьков В.Г., Федянин В.К. Новый вид коллективных частицеподобных возбуждений в одномерных системах с резонансным взаимодействием. - ТМФ, 1979, т. 39, № 3, с. 381-392.
5. Krumhansl J.A., Schrieffer J.R. Dynamics and Statistical Mechanics of a One-Dimensional Model Hamiltonian for Structural Phase Transitions. - Phys.Rev.B, 1975, v. 11, No. 9, p.3535-3545.
6. Mikeska H.J. Solitons in One-Dimensional Magnet with an Easy Plane. - J. Phys. C: Solid St. Phys., 1978, v. 11, No. 1, p. L29-L32.

Рукопись поступила в издательский отдел  
4 октября 1980 года.