сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-80-321

В.Л.Аксенов, В.Ю.Юшанхай

КВАНТОВАЯ ДИФФУЗИЯ μ^+-МЕЗОНОВ В КРИСТАЛЛАХ

1980

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение механизма диффузии положительных мюонов в металлах представляет интерес в связи с широкими возможностями μ^+ -мезонного метода при исследовании свойств твердого тела [1,2]. μ^+ -мезон в кристалле представляет собой легкую межузельную примесь /его можно рассматривать как легкий изотоп протона, $9m_\mu \approx m_p$ /. Возможными механизмами диффузии квантовой частицы в кристалле являются некогерентные подбарьерные перескоки и когерентное перемещение в зоне [3-5]. При экспериментальном наблюдении эти механизмы могут быть легко различимы, поскольку они имеют существенно разную температурную зависимость. В большинстве изученных металлов диффузия μ^+ -мезона осуществляется посредством некогерентных подбарьерных перескоков [1,2]. В некоторых же из них экспериментальные данные можно было объяснить возникновением ниже определенной температуры $T < T_1$ когерентного быстрого движения в зоне [6а,6б]. Однако при дальнейшем понижении температуры $T < T_2 < T_1$ /например, для ниобия [6б] $T_1 \simeq 40$ К, $T_2 \simeq 20$ К/ характер диффузионного процесса резко менялся: скорость диффузии падала. Такая зависимость коэффициента диффузии от температуры не укладывалась в имеющиеся представления [3-5] и была названа аномальной. Однозначного объяснения это явление до сих пор не получило.

В настоящей работе предложена модель квантовой диффузии легкой примесной частицы в кристалле. Исходными положениями являются представления о поляронном состоянии заряженной квантовой частицы в решетке и механизм когерентной диффузии по зонам, образованным на междоузлиях разной симметрии. Тензор коэффициента диффузии, в отличие от предыдущих работ, вычислен на основе формулы Кубо с помощью теории возмущения по интегралам перекрытия. Получено выражение для измеряемой в эксперименте скорости релаксации спина μ^+ -мезона. Показано, что предложенная модель позволяет качественно описать диффузию μ^+ -мезона в металлах во всем интервале температур, включая аномальную область.

2. МОДЕЛЬНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН

Рассмотрим легкую примесную частицу в кристалле. Как показывают эксперименты по изучению поведения μ^+-мезонов [2], а также водорода в металлах [7], движение частиц примеси может осуществляться по междоузлиям разной симметрии. Этот факт является исходным для предлагаемого в настоящей работе описания квантовой диффузии легкой частицы. Последняя в междоузлиях двух различных симметрий /сортов/ имеет разную энергию основного состояния ϵ_1 и ϵ_2; условимся, что $\epsilon_1 < \epsilon_2$. В результате квантового туннелирования на вектор трансляции $\vec{g}$ в соседнее междоузлие того же сорта /диагональный переход/ уровни ϵ_1 и ϵ_2 размываются в зоны с ширинами $J_1(\vec{g})$ и $J_2(\vec{g})$ соответственно. Возможны также квантовые переходы между уровнями ϵ_1 и ϵ_2 с участием фонона с энергией $\hbar\omega_q = \epsilon_2 - \epsilon_1$. Матричный элемент, соответствующий такому недиагональному переходу, обозначим $I_q(\vec{g})$. Введем фермиевские операторы рождения $a^+_{\alpha\vec{m}}$ и уничтожения $a_{\alpha\vec{m}}$ частицы на уровне α междоузлия с радиус-вектором $\vec{m}$, а также операторы рождения b^+_q и уничтожения b_q фононов с квазиимпульсом q. Гамильтониан модели представим в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int}, \qquad /1/$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_q \hbar\omega_q (b^+_q b_q + \frac{1}{2}) + \sum_{\alpha=1,2} \{ \epsilon_\alpha \sum_{\vec{m}} a^+_{\alpha\vec{m}} a_{\alpha\vec{m}} + \sum_{\vec{m},\vec{g}} J_\alpha(\vec{g}) \times$$

$$\times a^+_{\alpha\vec{m}+\vec{g}} a_{\alpha\vec{m}} \} + \sum_{\vec{m},\vec{g}} \sum_q \{ I_q(\vec{g}) a^+_{2\vec{m}+\vec{g}} a_{1\vec{m}} b_q + I^*_q(-\vec{g}) a^+_{1\vec{m}+\vec{g}} a_{2\vec{m}} b^+_q \}, \qquad /2/$$

$$\mathcal{H}_{int} = \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\vec{m}} a^+_{\alpha\vec{m}} a_{\alpha\vec{m}} \sum_q \{ \hbar\omega_q u^q_{\alpha\vec{m}} + \sum_{q'} V^{qq'}_{\alpha\vec{m}} (b_{q'} + b^+_{-q'}) \} (b_q + b^+_{-q}). \qquad /3/$$

Здесь величины $u^q_{\alpha\vec{m}}$, $V^{qq'}_{\alpha\vec{m}}$ определяются конкретным видом взаимодействия частицы с колебаниями решетки кристалла. В общем случае это взаимодействие сильное, поэтому гамильтониан $\mathcal{H}_{int}$ не может трактоваться как возмущение. Эффекты взаимодействия должны быть учтены уже в "нулевом" порядке, что позволяет сделать хорошо известный в теории полярона [8] метод канонического преобразования исходного гамильтониана /1/. Каноническое преобразование осуществляется с помощью унитарного оператора $U = e^{-S}$, где

$$S = \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\vec{m}} \hat{S}_{\alpha\vec{m}} a^+_{\alpha\vec{m}} a_{\alpha\vec{m}}, \qquad \hat{S}_{\alpha\vec{m}} = \sum_q u^q_{\alpha\vec{m}} (b_q - b^+_{-q}).$$

При этом операторы рождения и уничтожения преобразуются следующим образом:

$$\tilde{b}_q = e^{-S} b_q e^S = b_q - \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\vec{m}} \overset{*}{u}{}^q_{\alpha\vec{m}} a^+_{\alpha\vec{m}} a_{\alpha\vec{m}},$$

$$\tilde{b}^+_q = e^{-S} b^+_q e^S = b^+_q - \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\vec{m}} u^q_{\alpha\vec{m}} a^+_{\alpha\vec{m}} a_{\alpha\vec{m}},$$

$$\tilde{a}_{\alpha\vec{m}} = e^{-S} a_{\alpha\vec{m}} e^S = e^{\hat{S}_{\alpha\vec{m}}} a_{\alpha\vec{m}}, \qquad /4/$$

$$\tilde{a}^+_{\alpha\vec{m}} = e^{-S} a^+_{\alpha\vec{m}} e^S = e^{-\hat{S}_{\alpha\vec{m}}} a^+_{\alpha\vec{m}}.$$

Как видно из последних соотношений, смысл преобразования заключается в следующем: во-первых, за счет мюонной плотности $a^+_{\alpha\vec{m}} a_{\alpha\vec{m}}$ смещаются равновесные положения узлов, относительно которых атомы кристалла совершают тепловые колебания; во-вторых, происходит "одевание" мюона в облако фононов, что описывается операторами $\exp[-\hat{S}_{\alpha\vec{m}}]$.

Преобразованный гамильтониан системы имеет вид

$$\tilde{\mathcal{H}} = e^{-S} \mathcal{H} e^S = \tilde{\mathcal{H}}_0 + \tilde{\mathcal{H}}_{int} + \Delta\mathcal{H}. \qquad /5/$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = \sum_q \hbar\omega_q (b^+_q b_q + \frac{1}{2}) + \sum_{\alpha=1,2} \{ \tilde{\epsilon}_\alpha \sum_{\vec{m}} a^+_{\alpha\vec{m}} a_{\alpha\vec{m}} \}, \qquad /6/$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_{int} = \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\vec{m},\vec{g}} J_\alpha(\vec{g}) e^{-(\hat{S}_{\alpha\vec{m}+\vec{g}} - \hat{S}_{\alpha\vec{m}})} a^+_{\alpha\vec{m}+\vec{g}} a_{\alpha\vec{m}} +$$

$$+ \sum_{\vec{m},\vec{g}} \sum_q \{ I_q(\vec{g}) e^{-(\hat{S}_{2\vec{m}+\vec{g}} - \hat{S}_{1\vec{m}})} a^+_{2\vec{m}+\vec{g}} a_{1\vec{m}} b_q + I^*_q(-\vec{g}) \times \qquad /7/$$

$$\times e^{-(\hat{S}_{1\vec{m}+\vec{g}} - \hat{S}_{2\vec{m}})} a^+_{1\vec{m}+\vec{g}} a_{2\vec{m}} b^+_q \} + \sum_{\alpha,\vec{m}} \sum_{qq'} a^+_{\alpha\vec{m}} a_{\alpha\vec{m}} V^{qq'}_{\alpha\vec{m}} (b_q + b^+_{-q})(b_{q'} + b^+_{-q'}).$$

Здесь $\tilde{\epsilon}_{\alpha} = \epsilon_{\alpha} - \sum_q \hbar\omega_q |u^q_{\alpha\vec{m}}|^2$, а ΔH включает в себя члены, пропорциональные произведению операторов мюонной плотности на разных узлах $n_{\alpha\vec{m}} n_{\alpha'\vec{m}'}$.

Как видим, результатами канонического преобразования гамильтониана /1/ являются: во-первых, поляронный сдвиг уровня ϵ_{α} на величину $\sum_q \hbar\omega_q |u_{\alpha\vec{m}}|^2$, которая не зависит от индекса $\vec{m}$ в силу трансляционной симметрии задачи; во-вторых, эффект сужения зон $J_{\alpha}(\vec{g})$ и перенормировки амплитуд $I_q(\vec{g})$ за счет операторов "одевания" $\exp[-(\hat{S}_{\beta\vec{m}+\vec{g}} - S_{\alpha\vec{m}})]$ в $\tilde{H}_{int}$ и, в третьих, появление гамильтониана ΔH, описывающего корреляции в положении мюонов на разных узлах.

Гамильтониан H_0 в /6/, собственными векторами которого являются векторы, соответствующие локализованному в междоузлии состоянию частицы и равновесному состоянию решетки, дает хорошее нулевое приближение для описания мюона в кристалле. Действительно, как показывает эксперимент [1,2], мюон некоторое среднее время τ, большое по сравнению с характерным периодом колебаний решетки, $\omega^{-1} \sim 10^{-13}$ с, находится в одном из междоузлий в тепловом равновесии с решеткой и лишь изредка совершает прыжок в соседнее положение равновесия. Последнее обстоятельство позволяет нам при описании диффузии пренебречь динамическими корреляциями между двумя последовательными прыжками мюона. В пределе малых плотностей мюонов в кристалле, который и реализуется в рассматриваемом случае, несущественны также статические корреляции, описываемые ΔH. Опуская эту добавку в /5/, получим эффективный гамильтониан мюона в кристалле:

$$H_{eff} = \tilde{H}_0 + \tilde{H}_{int} . \qquad /8/$$

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ

Тензор коэффициента диффузии вычислим, основываясь на формуле Кубо [9]:

$$D_{ik} = \frac{1}{\beta} \lim_{s\to 0} \int_0^{\infty} dt\, e^{-st} \int_0^{\beta} d\lambda \langle \hat{V}_i(-i\hbar\lambda)\, \hat{V}_k(t) \rangle , \qquad \beta = \frac{1}{kT} . \qquad /9/$$

Здесь $\hat{V}_i(t)$ – оператор i-той компоненты скорости / $i = x,y,z$ / в гейзенберговском представлении. Используя полную систему собственных функций гамильтониана H_{eff}, после ряда несложных преобразований перепишем соотношение /9/ в следующем виде:

$$D_{ik} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \hat{V}_i(t) \hat{V}_k(0) \rangle . \qquad /10/$$

Введем оператор радиус-вектора мюона:

$$\hat{R} = \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\vec{n}} \vec{n}\, a^+_{\alpha\vec{n}} a_{\alpha\vec{n}} ,$$

тогда для оператора скорости $\hat{V}$ имеем выражение

$$\hat{V} = \frac{\partial \hat{R}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [H_{eff}, \hat{R}] = \frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_{int}, \hat{R}] .$$

Вычислив последний коммутатор и подставив результат в /10/, получим следующее выражение для тензора коэффициента диффузии:

$$D_{ik} = -\frac{1}{2\hbar^2} \sum_{\alpha=1,2} \sum_{\vec{m}_1,\vec{g}_1} \sum_{\vec{m}_2,\vec{g}_2} g^i_1 g^k_2 J_{\alpha}(\vec{g}_1) J_{\alpha}(\vec{g}_2) \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle a^+_{\alpha\vec{m}_1+\vec{g}_1}(t)\, e^{-\hat{S}_{\alpha\vec{m}_1+\vec{g}_1}(t)}\, a_{\alpha\vec{m}_1}(t)\, e^{\hat{S}_{\alpha\vec{m}_1}(t)} \times$$

$$\times a^+_{\alpha\vec{m}_2+\vec{g}_2}(0)\, e^{-\hat{S}_{\alpha\vec{m}_2+\vec{g}_2}(0)}\, a_{\alpha\vec{m}_2}(0)\, e^{\hat{S}_{\alpha\vec{m}_2}(0)} \rangle -$$

$$-\frac{1}{2\hbar^2} \sum_{\vec{m}_1,\vec{g}_1} \sum_{\vec{m}_2,\vec{g}_2} g^i_1 g^k_2 \sum_{q_1,q_2} \{ [I_{q_1}(\vec{g}_1) I^*_{q_2}(-\vec{g}_2)) \times$$

$$\times \int dt \langle a^+_{2\vec{m}_1+\vec{g}_1}(t)\, e^{-\hat{S}_{2\vec{m}_1+\vec{g}_1}(t)}\, a_{1\vec{m}_1}(t)\, e^{\hat{S}_{1\vec{m}_1}(t)}\, b_{q_1}(t) \times$$

$$\times a^{+}_{1\vec m_2+\vec g_2}(0)\, e^{-\hat S_{1\vec m_2+\vec g_2}(0)}\, a_{2\vec m_2}(0)\, e^{+\hat S_{2\vec m_2}(0)}\, b^{+}_{q_2}(0)>] +$$

$$+[I^{*}_{q_1}(-\vec g_1) I_{q_2}(\vec g_2) \int_{-\infty}^{+\infty} dt < a^{+}_{1\vec m_1+\vec g_1}(t)\, e^{-\hat S_{1\vec m_1+\vec g_1}(t)} \times \qquad /11/$$

$$\times a_{2\vec m_1}(t)\, e^{\hat S_{2\vec m_1}(t)}\, b^{+}_{q_1}(t)\, a^{+}_{2\vec m_2+\vec g_2}(0)\, e^{-\hat S_{2\vec m_2+\vec g_2}(0)} \times$$

$$\times a_{1\vec m_2}(0)\, e^{\hat S_{1\vec m_2}(0)}\, b_{q_2}(0)>]\}.$$

Угловые скобки означают здесь усреднение по распределению Гиббса с гамильтонианом $\mathcal{H}_0$, собственными состояниями которого являются локализованные состояния мюона. Как видно из структуры $\tilde{\mathcal{H}}_{int}$ в /7/, взаимодействие приводит к затуханию этих локализованных состояний с некоторыми частотами $\hbar^{-1}\Gamma_\alpha$ / $\alpha = 1,2$/, которые введем с помощью S-матрицы, определяющей гейзенберговское представление мюонных операторов:

$$a^{+}_{\alpha\vec m}(t) = e^{i\hbar^{-1}\mathcal{H}_{eff}\cdot t}\, a^{+}_{\alpha\vec m}\, e^{-i\hbar^{-1}\mathcal{H}_{eff}\cdot t} = S^{+}(t)\, e^{i\hbar^{-1}\tilde{\mathcal{H}}_0\cdot t}\, a^{+}_{\alpha\vec m} \times$$

$$\times e^{-i\hbar^{-1}\tilde{\mathcal{H}}_0\cdot t} \quad S(t) = e^{i\hbar^{-1}\bar\epsilon_\alpha\cdot t} \quad S^{+}(t)\, a^{+}_{\alpha\vec m}\, S(t) \to e^{i\hbar^{-1}\bar\epsilon_\alpha\cdot t - \hbar^{-1}\Gamma_\alpha|t|}\, a^{+}_{\alpha\vec m}. \qquad /12/$$

Частота затухания $\hbar^{-1}\Gamma_\alpha$ состояния мюона, локализованного на уровне α междоузлия $\vec m$, так же, как и энергия этого состояния $\tilde\epsilon_\alpha$, не зависит от индекса $\vec m$ в силу трансляционной инвариантности гамильтониана $\mathcal{H}_{eff}$.

Пусть в начальный момент времени мюон помещен в междоузлие $\vec n$. Воспользовавшись /12/, преобразуем корреляционную функцию, входящую в первый интеграл выражения /11/, следующим образом:

$$< a^{+}_{\alpha\vec m_1+\vec g_1}(t)\, e^{-\hat S_{\alpha\vec m_1+\vec g_1}(t)}\, a_{\alpha\vec m_1}(t)\, e^{\hat S_{\alpha\vec m_1}(t)}\, a^{+}_{\alpha\vec m_2+\vec g_2}(0)\, e^{-\hat S_{\alpha\vec m_2+\vec g_2}(0)} \times$$

$$\times a_{\alpha\vec m_2}\, e^{\hat S_{\alpha\vec m_2}(0)}> = Z^{-1} e^{-\frac{\tilde\epsilon_2}{T}}\, e^{-2\hbar^{-1}\Gamma_\alpha|t|}\, \delta_{\vec m_2,\vec n}\, \delta_{\vec m_1,\vec n+\vec g_2}\, \delta_{\vec g_1,-\vec g_2} \times \qquad /13/$$

$$\times < e^{-\hat S_{\alpha\vec n}(t)}\, e^{\hat S_{\alpha\vec n+\vec g_2}(t)}\, e^{-\hat S_{\alpha\vec n+\vec g_2}(0)}\, e^{\hat S_{\alpha\vec n}(0)} >.$$

Здесь $Z = e^{-\tilde\epsilon_1/T} + e^{-\tilde\epsilon_2/T}$ и оставшиеся скобки означают усреднение лишь с фононным гамильтонианом. Подобные корреляционные функции возникают в теории полярона малого радиуса [8]. Приведем результат вычисления:

$$< e^{-\hat S_{\alpha\vec n}(t)}\, e^{S_{\alpha\vec n+\vec g}(t)}\, e^{-S_{\alpha\vec n+\vec g}(0)}\, e^{S_{\alpha\vec n}(0)} > = e^{f^{\vec g}_{\alpha\alpha}(t)}, \qquad /14/$$

$$f^{\vec g}_{\alpha\beta}(t) = 2\sum_q \gamma^{q}_{\alpha\beta}(\vec g)[(1+2\bar n_q) - (1+\bar n_q)e^{-i\omega_q t} - \bar n_q e^{i\omega_q\cdot t}], \qquad /15/$$

$$2\gamma^{q}_{\alpha\beta}(\vec g) = |u^{q}_{\alpha\vec n} - u^{q}_{\beta\vec n+\vec g}|^2.$$

Здесь $\bar n_q$ - среднее тепловое число фононов с квазиимпульсом q.

Корреляционную функцию, входящую во второй интеграл выражения /11/, преобразуем аналогично /13/:

$$< a^{+}_{2\vec m_1+\vec g_1}(t)\, e^{-\hat S_{2\vec m_1+\vec g_1}(t)}\, a_{1\vec m_1}(t)\, e^{\hat S_{1\vec m_1}(t)}\, b_{q_1}(t) \times$$

$$\times a^{+}_{1\vec m_2+\vec g_2}(0)\, e^{-\hat S_{1\vec m_2+\vec g_2}(0)}\, a_{2\vec m_2}(0)\, e^{\hat S_{2\vec m_2}(0)}\, b^{+}_{q_2}(0)> =$$

$$= Z^{-1} e^{-\tilde{\epsilon}_2/T} e^{i\hbar^{-1}(\tilde{\epsilon}_2-\tilde{\epsilon}_1)t} e^{-\hbar^{-1}(\Gamma_1+\Gamma_2)|t|} \delta_{\vec{m}_2,\vec{n}} \delta_{\vec{m}_1,\vec{n}+\vec{g}_2} \times \qquad /16/$$

$$\times \delta_{\vec{g}_1,-\vec{g}_2} < e^{-\hat{S}_{2\vec{n}}(t)} e^{\hat{S}_{1\vec{n}+\vec{g}_2}} b_{q_1}(t) e^{-\hat{S}_{1\vec{n}+\vec{g}_2}(0)} e^{\hat{S}_{2\vec{n}}(0)} b^+_{q_2}(0)>.$$

Полученную корреляционную функцию расцепим следующим образом:

$$< e^{-\hat{S}_{2\vec{n}}(t)} e^{\hat{S}_{1\vec{n}+\vec{g}}(t)} b_{q_1}(t) e^{-\hat{S}_{1\vec{n}+\vec{g}}(0)} e^{\hat{S}_{2\vec{n}}(0)} b^+_{q_2}(0)> \simeq \qquad /17/$$

$$\simeq < e^{-\hat{S}_{2\vec{n}}(t)} e^{\hat{S}_{1\vec{n}+\vec{g}}(t)} e^{-\hat{S}_{1\vec{n}+\vec{g}}(0)} e^{\hat{S}_{2\vec{n}}(0)} > < b_{q_1}(t) b^+_{q_2}(0)>.$$

Это расцепление позволяет учесть лишь такие недиагональные переходы мюона, которые сопровождаются самосогласованной перестройкой коррелированного с ним фононного облака. Не представляет труда учет в исходной корреляционной функции /17/ всех других спариваний фононных операторов, которые соответствуют вкладу недиагональных переходов мюона, сопровождающихся "встряхиванием" фононного облака. Полученные таким образом дополнительные слагаемые в /17/ имеют тот же характер зависимости от температуры, что и главное приближение /17/. Поэтому их учет не меняет окончательных выводов о виде температурной зависимости коэффициента диффузии мюона в кристалле. Преобразуя результат /17/ так же, как и /13/, /14/, получим следующее выражение для корреляционной функции:

$$< e^{-\hat{S}_{2\vec{n}}(t)} e^{\hat{S}_{1\vec{n}+\vec{g}}(t)} e^{-\hat{S}_{1\vec{n}+\vec{g}}(0)} e^{\hat{S}_{2\vec{n}}(0)} > < b_{q_1}(t) b^+_{q_2}(0)> = \qquad /18/$$

$$= e^{-f^{\vec{g}}_{21}(t)} e^{-i\hbar^{-1}\omega_{q_2} t} (1+\bar{n}_{q_2}) \delta_{q_1,q_2},$$

где $f^{\vec{g}}_{21}(t)$ определено в /15/.

Аналогичным путем получаем

$$\times a^+_{1\vec{m}'_1+\vec{g}'_1}(t) e^{-\hat{S}_{1\vec{m}'_1+\vec{g}'_1}(t)} a_{2\vec{m}'_1}(t) e^{\hat{S}_{2\vec{m}'_1}(t)} b^+_{q_1}(t) \times$$

$$\times a^+_{2\vec{m}'_2+\vec{g}'_2}(0) e^{-\hat{S}_{2\vec{m}'_2+\vec{g}'_2}(0)} a_{1\vec{m}'_2}(0) e^{\hat{S}_{1\vec{m}'_2}(0)} b_{q_2}(0)> = \qquad /19/$$

$$= Z^{-1} e^{-\tilde{\epsilon}_1/T} e^{i\hbar^{-1}(\tilde{\epsilon}_1-\tilde{\epsilon}_2)t} e^{-\hbar^{-1}(\Gamma_1+\Gamma_2)|t|} \delta_{\vec{m}'_2,\vec{n}} \delta_{\vec{m}'_1,\vec{n}+\vec{g}_2} \times$$

$$\times \delta_{\vec{g}'_2,-\vec{g}'_1} e^{-f^{\vec{g}'}_{12}(t)} e^{i\hbar^{-1}\omega_{q_1} t} \bar{n}_{q_1} \delta_{q_1,q_2}.$$

Подставляя /14/-/19/ в /11/, получаем выражение для тензора коэффициента диффузии:

$$D_{ik} = \frac{1}{2\hbar^2} Z^{-1} \sum_{\alpha=1,2} e^{-\tilde{\epsilon}_\alpha/T} \sum_{\vec{g}} g^i g^k J^2_\alpha(\vec{g}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{-2\hbar^{-1}\Gamma_\alpha|t|} e^{-f^{\vec{g}}_{\alpha\alpha}(t)} +$$

$$+ \frac{1}{2\hbar^2} Z^{-1} \sum_{\vec{g}} g^i g^k \sum_q |I_q(\vec{g})|^2 \Big\{ e^{-\tilde{\epsilon}_1/T} \bar{n}_q \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\hbar^{-1}(\tilde{\epsilon}_1-\tilde{\epsilon}_2+\hbar\omega_q)t} \times$$

$$\times e^{-\hbar^{-1}(\Gamma_1+\Gamma_2)|t|} e^{-f^{\vec{g}}_{12}(t)} + \qquad /20/$$

$$+ e^{-\tilde{\epsilon}_2/T} (1+\bar{n}_q) \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{-i\hbar^{-1}(\tilde{\epsilon}_1-\tilde{\epsilon}_2+\hbar\omega_q)t} e^{-\hbar^{-1}(\Gamma_1+\Gamma_2)|t|} e^{-f^{\vec{g}}_{21}(t)} \Big\}.$$

Тензор /20/ может быть представлен в виде

$$D_{ik} = \sum_{\vec{g}} g^i g^k W(\vec{g}),$$

где $W(\vec{g})$ - частота диффузионных скачков мюона на вектор $\vec{g}$. Из /20/ вытекает следующее выражение для частоты:

$$W(\vec g) = Z^{-1}\{ W_1(\vec g) + e^{-\tilde\epsilon_2-\tilde\epsilon_1/T} W_2(\vec g) + W_{1\to 2}(\vec g) +$$

$$+ e^{-\tilde\epsilon_2-\tilde\epsilon_1/T} W_{2\to 1}(\vec g)\}. \qquad /21/$$

Здесь $W_\alpha(\vec g)$ $/\ \alpha = 1,2/$ - частоты диагональных, а $W_{1\to 2}$ и $W_{2\to 1}$ - недиагональных переходов мюона.
Анализ выражения /20/ показывает, что, как и в общей теории /3-5/, диагональные переходы мюона определяются как механизмом когерентного движения в зоне, так и механизмом некогерентных случайных прыжков:

$$W_\alpha(\vec g) = W_\alpha^{(\text{ког.})}(\vec g) + W_\alpha^{(\text{пр.})}(\vec g), \qquad /22/$$

$$W_\alpha^{(\text{ког.})}(\vec g) = \frac{J_\alpha^2(\vec g)}{2\hbar\Gamma_\alpha} e^{-2\Phi^{\vec g}_{\alpha\alpha}(T)}, \qquad /23/$$

$$W^{(\text{пр.})} = \frac{J_\alpha^2(\vec g)}{2\hbar\Gamma_\alpha} e^{-2\Phi_{\alpha\alpha}(T)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2\Gamma_\alpha\cdot|t|}{\hbar}} \left\{ e^{2\sum\limits_q \gamma^q_{\alpha\alpha}(\vec g) \frac{\cos\omega_q\cdot t}{\text{sh}\frac{\hbar\omega_q}{2T}}} - 1 \right\}, \qquad /24/$$

где

$$\Phi^{\vec g}_{\alpha\beta}(T) = \sum_q \gamma^q_{\alpha\beta}(\vec g)\,\text{cth}\frac{\hbar\omega_q}{2T}. \qquad /25/$$

Для частот недиагональных переходов из /20/ получим выражения

$$W_{1\to 2}(\vec g) = \sum_q \frac{|I_q(\vec g)|^2}{2\hbar^2} e^{-2\Phi^{\vec g}_{12}(T)} \bar n_q \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp\{ i\hbar^{-1}(\tilde\epsilon_1 - \tilde\epsilon_2 + \hbar\omega_q)t -$$

$$-\hbar^{-1}(\Gamma_1+\Gamma_2)\cdot|t| + e^{-i\omega_q t}(1+\bar n_q) + e^{i\omega_q t}\bar n_q\}. \qquad /26/$$

$$W_{2\to 1}(\vec g) = \sum_q \frac{|I_q(\vec g)|^2}{2\hbar^2} e^{-2\Phi^{\vec g}_{21}(T)}(1+\bar n_q)\times$$

$$\times\int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp\{ -i\hbar^{-1}(\tilde\epsilon_1 - \tilde\epsilon_2 + \hbar\omega_q)t - \hbar^{-1}(\Gamma_1+\Gamma_2)\cdot|t| + \qquad /27/$$

$$+ e^{-i\omega_q t}(1+\bar n_q) + e^{i\omega_q t}\bar n_q\}.$$

Входящие в /23/-/27/ частоты $\hbar^{-1}\Gamma_\alpha$ затухания локализованного на уровне $\alpha = 1,2$ состояния частицы обусловлены диагональными: $\Gamma_\alpha^{(\text{диаг.})} \sim z_\alpha J_\alpha^2(\vec g)\exp[-2\Phi^{\vec g}_{\alpha\beta}(t)]\cdot F(T)\cdot\delta_{\alpha\beta}$ и недиагональными переходами: $\Gamma^{(\text{нед.})} \sim z_\beta \sum_q |I_q(\vec g)|^2 \exp[-2\Phi^{\vec g}_{\alpha\beta}(T)]\cdot \mathcal{F}_q(T)(1-\delta_{\alpha\beta})$,
где z_α - число ближайших междоузлий; $F(T)$ и $\mathcal{F}_q(T)$ - монотонно растущие функции температуры; α, $\beta = 1,2$. В случае узких исходных зон $J_\alpha(\vec g)$ и малых амплитуд $I_q(\vec g)$ или в случае сильного поляронного эффекта, $\Phi^{\vec g}_{\alpha\beta}(0) \gg 1$, главный вклад в ширину Γ_α дают процессы многократного "внутриямного" рассеяния частицы на фононах, вызванного взаимодействием $V^{qq}_{\alpha\vec m}$ в /1/. Согласно /3,4/ $\Gamma^{(\text{вн.я})} \sim B(T/T_Д)^9$, где $T_Д$ - дебаевская температура кристалла, B - не зависящая от температуры величина.

4. ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

Проанализируем на основе всего вышеизложенного характер температурной зависимости частоты $W(\vec g)$ диффузионных переходов мюона. В области достаточно низких температур из /20/, /24/ для частоты некогерентных прыжков $W_\alpha^{(\text{пр.})}(\vec g)$ получим следующее выражение:

$$W_\alpha^{(\text{пр})}(\vec g) \simeq \frac{J_\alpha^2(\vec g)}{2\hbar^2} e^{-2\Phi^{\vec g}_{\alpha\alpha}(T)} \times 8\pi \sum_{q_1,q_2} \gamma^{q_1}_{\alpha\alpha}(\vec g)\times\gamma^{q_2}_{\alpha\alpha}(\vec g)\times \qquad /28/$$

$$\times\,\bar n_{q_1}(1+\bar n_{q_2})\delta(\omega_{q_1}-\omega_{q_2}).$$

В частности, для дебаевской модели кристалла при $T \ll T_Д$ оценка /28/ дает

$$W_{\alpha}^{(\text{пр.})}(\vec g) \simeq \frac{J_{\alpha}^{2}(\vec g)}{2\hbar T_{Д}} e^{-2\Phi_{\alpha\alpha}^{\vec g}(T)} [\Phi_{\alpha\alpha}^{\vec g}(0)]^{2} 2^{7} \cdot 6!\,(\frac{T}{T_{Д}})^{7}. \qquad /29/$$

В области высоких температур методом перевала из /24/ получим

$$W_{\alpha}^{(\text{пр.})}(\vec g) \simeq \frac{J_{\alpha}^{2}(\vec g)}{2\hbar^{2}} [\frac{\pi\hbar^{2}}{4TE_{\alpha\vec g}}]^{1/2} e^{-E_{\alpha\vec g}/kT}, \qquad /30/$$

где $E_{\alpha\vec g} = \frac{1}{2}\sum_{q}\hbar\omega_{q}\gamma_{\alpha\alpha}^{q}(\vec g)$. Для энергии активации $E_{\alpha\vec g}$ оценки дают, к примеру в дебаевской модели, результат

$$E_{\alpha\vec g} \simeq \frac{2}{5} T_{Д} \cdot \Phi_{\alpha\alpha}^{\vec g}(0).$$

Таким образом, если вклад в диффузию, обеспечиваемый механизмом некогерентных прыжков мюона, монотонно растет с увеличением температуры, то, как следует из /23/, /25/, частота когерентных переходов $W_{\alpha}^{(\text{ког.})}(\vec g)$ падает с ростом температуры по двум причинам: из-за поляронного сужения зоны, описываемого зависимостью $\exp[-2\Phi_{\alpha\alpha}^{\vec g}(T)]$, и за счет эффектов затухания, описываемых величинами Γ_{α}. На основании соотношений /23/, /28/-/29/ можно заключить, что в области низких температур $/T \ll T_{Д}/$ некогерентные процессы перехода мюона несущественны и доминирующей является когерентная диффузия в зоне $W_{\alpha}^{(\text{ког})}(\vec g) \gg W_{\alpha}^{(\text{пр.})}(\vec g)$. Поскольку $W^{(\text{ког.})}(\vec g)$ быстро падает с ростом температуры, а $W_{\alpha}^{(\text{пр.})}(\vec g)$ растет, при некоторой температуре T_m, определяемой параметрами задачи: силой мюон-фононной связи, жесткостью решетки, величинами $J_{\alpha}(\vec g)$ и $I_{q}(\vec g)$, достигается минимум величины $W_{\alpha}(\vec g) = W_{\alpha}^{(\text{ког.})}(\vec g) + W_{\alpha}^{(\text{пр.})}(\vec g)$. При температуре выше T_m частота $W_{\alpha}(\vec g)$ определяется практически лишь некогерентными процессами перескока мюона $W_{\alpha}^{(\text{пр.})}(\vec g) \gg W_{\alpha}^{(\text{ког.})}(\vec g)$.

Из анализа выражений /26/, /27/ для частот недиагональных переходов мюона с изменением номера зоны $W_{1\to 2}$ и $W_{2\to 1}$ следует, что рост этих частот с увеличением температуры обусловлен, в основном, увеличением среднего теплового числа фононов $\bar n_{q}$.

В области температур $T < T_m$, где несущественен вклад некогерентных диагональных процессов, из /22/-/27/ получаем следующее выражение для частоты диффузионных переходов мюона:

$$W(\vec g) \simeq Z^{-1}\{\frac{J_{1}^{2}(\vec g)}{2\hbar\Gamma_{1}} e^{-2\Phi_{11}^{\vec g}(T)} + e^{-\frac{\tilde\epsilon_2-\tilde\epsilon_1}{T}} \cdot \frac{J_{2}^{2}(\vec g)}{2\hbar\Gamma_{2}} e^{-2\Phi_{22}^{\vec g}(T)} +$$

$$+\pi\sum_{q}\frac{|I_{q}(\vec g)|^{2}}{2\hbar^{2}}[\bar n_{q} e^{-2\Phi_{12}^{\vec g}(T)} + e^{-\frac{\tilde\epsilon_2-\tilde\epsilon_1}{T}}(1+\bar n_{q}) e^{-2\Phi_{21}^{\vec g}(T)}]\times \qquad /31/$$

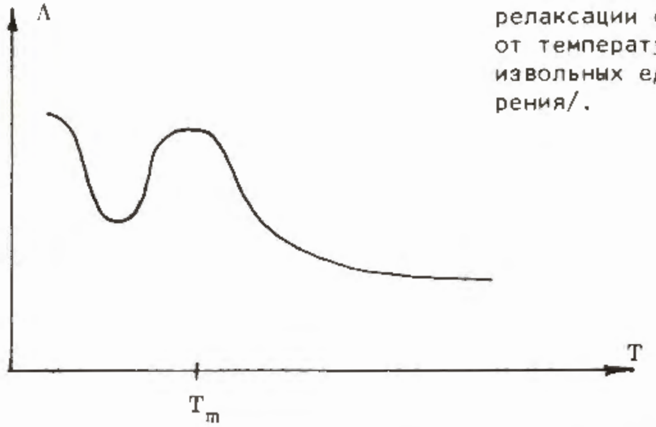
$$\times\delta(\tilde\epsilon_{1}-\tilde\epsilon_{2}+\hbar\omega_{q}).$$

В случае $J_{2}^{2}(\vec g)\exp[-2\Phi_{22}^{\vec g}(T)] \gg J_{1}^{2}(\vec g)\exp[2\Phi_{11}^{\vec g}(T)]$ когерентное движение мюона по второй зоне более эффективно, чем по первой. Таким образом, если при $T \ll \tilde\epsilon_2-\tilde\epsilon_1$, согласно /31/, осуществляется перенос по узкой нижней зоне, то с ростом температуры по мере заполнения второй широкой зоны следует ожидать рост величины $W(\vec g)$. Максимум $W(\vec g)$ реализуется в области температур $T \sim \tilde\epsilon_2-\tilde\epsilon_1 < T_m$, а с дальнейшим повышением температуры, $\tilde\epsilon_2-\tilde\epsilon_1 < T < T_m$, эффективность когерентного механизма, а с ней и $W(\vec g)$, быстро падают за счет эффектов рассеяния на фононах, описываемых зависимостью $\Gamma_{\alpha}(T)$. Такая зависимость частоты $W(\vec g)$ от температуры позволяет объяснить "аномальную" диффузию μ^{+}-мезонов /6а,6б/.

5. ДИФФУЗИЯ μ^{+}-МЕЗОНА В НИОБИИ И ВИСМУТЕ. ОБСУЖДЕНИЕ

В μ^{+}-мезонном эксперименте, в конечном счете, измеряется скорость релаксации спина мюона Λ. Используя результаты /10/, можно показать, что при медленной диффузии, когда частота W диффузионных скачков по междоузлиям определенного сорта мала, $W \ll \sigma$, где σ - параметр, характерный для междоузлий данного сорта $/\sigma \sim \gamma_{\mu}\sqrt{\overline{H^{2}_{лок.}}}$, γ_{μ} - гиромагнитное отношение мюона, $\overline{H^{2}_{лок}}$ - среднее значение квадрата локального магнитного поля междоузлия/, имеем для скорости релаксации $\Lambda \simeq \sigma$. В случае быстрой диффузии $/W \gg \sigma/$ получаем $\Lambda = \sigma^{2}/W$, т.е. $\Lambda \sim D^{-1}$. В результате в нашей модели диффузии по двум зонам выражение для скорости релаксации спина мюона Λ при $T < T_m$ имеет вид

$$\Lambda = (1+e^{-\frac{\tilde\epsilon_2-\tilde\epsilon_1}{T}})^{-1}[\sigma_{1} + e^{-\frac{\tilde\epsilon_2-\tilde\epsilon_1}{T}} \times \frac{\sigma_{2}^{2}}{W_{2}^{(\text{ког})}(\vec g)}]. \qquad /32/$$



Зависимость скорости релаксации спина мюона от температуры T /в произвольных единицах измерения/.

Используя /29/-/32/, получаем температурную зависимость в виде, изображенном на рисунке.

Рассмотрим диффузию μ^+-мезона в ниобии[6б]. Ниобий имеет ОЦК-решетку, элементарная ячейка содержит шесть междоузлий октаэдрического типа, характеризующиеся параметром σ_1, и двенадцать междоузлий тетраэдрического типа с параметром σ_2. Можно предположить, что за счет большей концентрации в кристалле тетраэдрических междоузлий соответствующая им ширина зоны $J_2(\vec{g})$ превосходит ширину зоны $J_1(\vec{g})$ октаэдрических междоузлий. Моноизотопный состав и малое количество примесей в эксперименте[6б] создают необходимые условия для существования когерентной диффузии. Действительно, сравнивая рисунок с результатом эксперимента[6б], видим, что характер полученной в нашей модели температурной зависимости Λ совпадает с наблюдаемой зависимостью скорости релаксации спина μ^+-мезона.

Широкую вторую примесную зону в кристалле могут обеспечить не только междоузлия другой симметрии, но и более высокий уровень данного междоузлия. Так можно объяснить аномальную диффузию в висмуте[6а], решетка которого имеет междоузлия одного сорта.

Таким образом, предложенная в данной работе модель позволяет качественно объяснить диффузию μ^+-мезона в нормальных металлах. Основным условием применимости рассматриваемого механизма является достаточная идеальность решетки кристалла[4]: предельно низкая концентрация дефектов, дислокаций. Поэтому для выяснения вопроса о применимости модели необходимы дополнительные экспериментальные исследования влияния примесей на

диффузию. Механизм когерентной диффузии в аномальной области можно отличить от альтернативного ему механизма захвата μ^+-мезона на примесях или междоузлиях также с помощью предложенного недавно метода[11] изучения релаксации спина μ^+-мюона в отсутствие внешнего поля.

Авторы признательны И.И.Гуревичу и Б.А.Никольскому за обсуждение результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мезоны в веществе. Труды Международного симпозиума. ОИЯИ, Д1-2, 14-10908, Дубна, 1977, с.229-346.
2. Белоусов Ю.М. и др. УФН, 1979, 129, с.3.
3. Андреев А.Ф., Лифшиц И.М. ЖЭТФ, 1969, 56, с.2057.
4. Kagan Yu., Klinger M.I. J.Phys.C, 1974, 7, p.2791.
5. Андреев А.Ф. УФН, 1976, 118, с.251.
6. а. Гребинник В.Г. и др. Письма в ЖЭТФ, 1977, 25, с.322;
   б. Birnbaum H.K. et al. Phys.Lett., 1978, 65A, p.435.
7. Springer T. In: Topics in Current Physics, vol.3, Ed.Lovesey S.W., Springer T. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1977, p.255-300.
8. Поляроны /сборник под ред. Фирсова Ю.А./. "Наука", М., 1975.
9. Kubo R. J.Phys.Soc.Jap., 1957, 12, p.570.
10. Дидык А.Ю., Шестаков В.Д., Юшанхай В.Ю. В сб.: Мезоны в веществе. Труды Международного симпозиума. ОИЯИ, Д1-2, 14-10908, Дубна, 1977, с.277.
11. Petzinger K.G. Phys.Lett.A, 1980, 75, p.225.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 апреля 1980 года.