Письма в ЖЭТФ, том 19, вып. 10, стр. 628 – 630 *20 мая 1974 г.*

КВАНТОВАЯ ДИФФУЗИЯ В ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Г.Е.Гургенишвили, А.А.Нерсесян, Г.А.Харадзе

Рассмотрен характер квантового переноса легких частиц в деформированной решетке. Показано, что коэффициент диффузии должен обнаруживать немонотонное поведение при низких температурах.

За последнее время заметно возрос интерес к исследованию низкотемпературной подвижности (квантовой диффузии) легких атомов в твердых телах. Подходящими объектами для наблюдения квантового характера переноса вещества при низких температурах являются примесные атомы He^3 в твердом He^4, а также примесные атомы водорода, внедренные в кристаллическую решетку. Сейчас уже имеются достоверные сведения (полученные с помощью импульсных методов ЯМР) о том, что в области 1°К подвижность примесей He^3 в твердом He^4 носит существенно квантовый характер [1, 2].

Общие закономерности температурной вариации коэффициента диффузии D при переходе от классического режима к квантовому описаны в работе [3]. В области низких температур, где надбарьерные процессы подавлены, существенную роль приобретают туннельные переходы с участием небольшого числа фононов, и экспоненциальная температурная зависимость D сменяется на степенную. В крайне низкотемпературном режиме будет преобладать когерентный характер движения примесных атомов, и в этой области D должно возрастать по мере понижения температуры.

При наличии заметного количества примесей рост D при понижении температуры лимитируется эффектами рассеяния примесонов друг на друге. В результате на кривой, изображающей $D = D(T)$, возникает низкотемпературное плато [4].

В настоящей статье мы хотим обратить внимание на то, что в деформированной решетке, содержащей предельно малое количество легких примесей, коэффициент диффузии должен обнаруживать в низкотемпературном когерентном режиме немонотонное поведение: при понижении температуры рост D будет постепенно замедляться и, пройдя через максимум, коэффициент диффузии начнет спадать при дальнейшем понижении температуры.

Для того, чтобы продемонстрировать характер низкотемпературной подвижности примеси в деформированном кристалле, мы будем исходить из следующего общего выражения для коэффициента диффузии (ниже для простоты рассматривается одномерная задача):

$$D = {}^1/_2 \lim_{t \to \infty} \sum_n x_n^2 \dot{\rho}_{nn}(t), \qquad (1)$$

где x_n – координаты равновесных положений примеси, а $\rho_{nn'}(t)$ – одночастичная матрица плотности в узельном представлении. Уравнение движения для $\rho(t)$ можно представить в виде

$$\dot{\rho}_{nn'}(t) + i\,[\mathcal{H}\,;\,\rho(t)]_{nn'} = -\,\{\,(1-\delta_{nn'})\Gamma_{nn'}\rho_{nn'} +$$

$$+\,\delta_{nn'}\sum_{n''}\gamma_{nn''}(\,\rho_{nn}-\rho_{n''n''}\,)\,\}\,. \qquad (2)$$

Здесь $\mathcal{H}$– гамильтониан, задающий поведение примеси в жесткой решетке, а правая (столкновительная) часть описывает эффекты затухания, обязанные взаимодействию с фононами. Уравнение, схожее по структуре с (2), использовалось недавно для описания движения частиц в узких зонах [5, 6].

Гамильтониан $\mathcal{H}$ в узельном представлении можно записать в виде

$$\mathcal{H} = \sum_n \epsilon_n c_n^+ c_n + \sum_{nn'} h_{nn'} c_n^+ c_{n'}\,, \qquad (3)$$

где ϵ_n – энергия основного состояния примеси, локализованной в n-м узле, матричный элемент $h_{nn'}$ описывает соответствующие туннельные переходы. Ниже мы рассмотрим простейший случай деформации, когда имеет место однородный сбой локальных уровней, т. е. $\epsilon_{n+1}-\epsilon_n=\Delta$. В этой ситуации, исходя из уравнения (2), нетрудно получить выражение для среднеквадратичного смещения диффундирующей частицы $\overline{x^2(t)} = \sum_n x_n^2\,\rho_{nn}(t)$. Решая соответствующую систему уравнений с начальным условием $\rho_{nn'}(0)=\delta_{n0}\,\delta_{n'0}$, можно показать, что

$$\overline{x^2(t)} = 2a^2\left\{\left(\frac{2h^2}{\Gamma^2+\Delta^2}\,\Gamma+\gamma\right)t + \frac{2h^2}{\Gamma^2+\Delta^2}\left(e^{-\Gamma t}-1\right) + \right.$$
$$\left. + \frac{2h^2\Delta^2}{(\Gamma^2+\Delta^2)^2}\left(1-\cos(\Delta t)\,e^{-\Gamma t}\right) - \frac{2h^2\Gamma\Delta}{(\Gamma^2+\Delta^2)^2}\sin(\Delta t)\,e^{-\Gamma t}\right\}. \qquad (4)$$

Воспользовавшись результатом (4), легко убедиться в том, что в случае однородного сбоя локальных уровней коэффициент диффузии

$$D = a^2\left(\frac{2h^2}{\Gamma^2+\Delta^2}\,\Gamma+\gamma\right) = D_{\mathrm{coh}} + D_{\mathrm{in\,coh}}. \qquad (5)$$

Физическое содержание этой формулы весьма прозрачно. При достаточно низких температурах ($\Gamma \ll \Delta$) когерентный перенос подавлен в силу тенденции к локализации примесей (эффект сбоя локальных уровней). Повышение температуры приводит к постепенному "размораживанию" блокированных примесей, и вначале D_{coh} растет. При $\Gamma \approx \Delta$ наступает наиболее благоприятный режим для когерентной диффузии. При дальнейшем повышении температуры (в области $\Gamma > \Delta$) D_{coh} начинает спадать, поскольку становятся эффективными процессы рассеяния, лимитирующие когерентное движение. Таким образом, в деформированной решетке со сбитыми уровнями следует ожидать наличия низкотемпературного максимума (в области $\Gamma \approx \Delta$) на кривой $D = D(T)$. Разумеется, такую картину можно наблюдать в случае достаточно низкой концентрации примесей, когда их взаимное рассеяние не маскирует температурную зависимость D.

Авторы благодарят А.Ф.Андреева за обсуждение изложенных выше результатов.

Институт физики
Академии наук Грузинской ССР

Поступила в редакцию
4 апреля 1974 г.

Литература

[1] В.Н.Григорьев, Б.Н.Есельсон, В.А.Михеев, Ю.Е.Шульман. Письма в ЖЭТФ, **17**, 25, 1973.

[2] M.Richards, J.Pope, A.Widom. Phys. Rev. Lett., **29**, 708, 1972.

[3] А.Ф.Андреев, И.М.Лифшиц. ЖЭТФ, **56**, 2057, 1969.

[4] В.Н.Григорьев, Б.Н.Есельсон, В.А.Михеев, В.А.Слюсарев, М.А.Стржемечный, Ю.Е.Шульман. J. Low Temp. Phys., **13**, 65, 1973.

[5] Ю.Каган, Л.А.Максимов. ЖЭТФ, **65**, 622, 1973.

[6] P.Reineker. Z. fur Physik, **261**, 187, 1973.