

[548.0:53]+530.145

ДИФфуЗИЯ В КВАНТОВЫХ КРИСТАЛЛАХ**А. Ф. Андреев****СОДЕРЖАНИЕ**

1. Введение	251
2. Квантовые кристаллы	252
3. Диффузия в газе примесей	253
4. Диффузия сильно взаимодействующих примесей	255
5. Температурная зависимость диффузии	257
6. Диффузия, индуцированная вакансиями	260
7. Двух- и одномерные квазичастицы	263
8. Дислокации в квантовых кристаллах	268
9. Заключение	270
Цитированная литература	270

1. ВВЕДЕНИЕ

Обычная «квантовая» теория твердых тел основана на предположении о квазиклассической природе кристаллической решетки. С одной стороны, квантовые эффекты в этой теории играют важную роль для фононов кристалла (именно, при температурах ниже температуры Дебая). С другой стороны, образующие кристалл частицы рассматриваются как локализованные вблизи определенных положений равновесия. Последнее свойство является чисто классическим. Действительно, в данном случае образующие кристалл тождественные между собой частицы оказываются индивидуализированными своей принадлежностью к определенным узлам решетки. Между тем в квантовой механике тождественные частицы должны быть неразличимы. Хотя квазиклассическая картина кристалла является по этой причине приближенной, ее точность для огромного большинства кристаллов весьма высока и значительно превосходит возможности эксперимента.

Существует, однако, небольшая группа так называемых квантовых кристаллов, в которых отклонения от обычной картины вполне заметны. Наиболее ярко выраженными квантовыми кристаллами являются кристаллы изотопов гелия (He^3 , He^4 и их растворы), что ясно уже из простого рассмотрения их диаграммы состояния. При низких температурах в свойствах жидкого гелия картина квантовомеханически неразличимых тождественных частиц играет, как известно, определяющую роль (квантовая жидкость). Кристаллизация жидкого гелия происходит при незначительном увеличении давления (25—30 атм) и сопровождается относительно небольшим изменением плотности ($\sim 5\%$). Ясно, что возникающие при этом кристаллы должны в существенной степени сохранить квантовую природу.

Цель настоящей статьи — обзор круга явлений, связанных с поведением примесей и дефектов в твердом гелии. Именно в этих явлениях, как будет видно ниже, квантовая природа гелиевых кристаллов проявляется наиболее ярко и обуславливает появление качественно новых эффектов таких, как квантовая диффузия.

2. КВАНТОВЫЕ КРИСТАЛЛЫ

Рассмотрим вопрос о количественной характеристике области применимости обычной квазиклассической теории и о том, в каких случаях можно ожидать максимальных отклонений от этой теории. Для этого необходимо выяснить соотношение между двумя типами квантовых эффектов в кристаллах, из которых одни учитываются в квазиклассической теории, а другие обуславливают отклонения от этой теории, т. е. квантовую природу кристалла. Рассмотрим температурную зависимость среднеквадратичной амплитуды \bar{u}^2 колебаний атома кристалла около положения равновесия. При температурах T , значительно превосходящих температуру Дебая Θ , имеет место классическая линейная зависимость $\bar{u}^2 \sim a^2 T/U$, где a — межатомное расстояние, U — энергия взаимодействия соседних атомов в кристалле. Обычные квантовые эффекты, учитывающиеся в квазиклассической теории, приводят к тому, что при температурах $T \sim \Theta$ кривая $\bar{u}^2(T)$ выходит на плато, определяющее амплитуду \bar{u}_0^2 нулевых колебаний атома. Ясно, что величина \bar{u}_0^2 может быть получена из классической формулы для $\bar{u}^2(T)$ путем подстановки $T \sim \Theta$, т. е. $\bar{u}_0^2 \sim a^2 \Theta/U$. Ограничение применимости квазиклассической теории связано с возможностью делокализации атома путем его перехода в соседний узел кристаллической решетки или, другими словами, с вероятностью $w(a)$ обнаружить атом на расстоянии $u \sim a$ от положения равновесия. При низких температурах, когда основную роль играют нулевые колебания, вероятности $w(u)$ различных значений u определяются квадратом модуля волновой функции основного состояния осциллятора и подчиняются гауссову закону: $w(u) \propto \exp(-u^2/2\bar{u}_0^2)$. Вероятность $w(a)$ квантового туннелирования атома в соседний узел решетки, следовательно, равна $w(a) \propto \exp(-1/\Lambda)$, где $\Lambda \sim \Theta/U$. Условием применимости квазиклассической теории является малость $w(a)$, что имеет место при малых значениях безразмерного параметра Λ . Существенно, однако, что обычные квантовые эффекты в кристалле связаны с конечностью дебаевской температуры, которая пропорциональна Λ : $\Theta \sim \Lambda U$. Эти эффекты определяются, следовательно, тем же самым параметром Λ . Разница между обычной квантовой теорией кристаллов и теорией квантовых кристаллов заключается в том, что первая из них учитывает лишь те квантовые эффекты, которые пропорциональны некоторой степени параметра Λ , но пренебрегает экспоненциально малым эффектом делокализации частиц. Для большинства кристаллов параметр Λ весьма мал (он равен отношению дебаевской температуры к той температуре $T \sim U$, при которой наступила бы сильная ангармоничность колебаний кристалла) и точность квазиклассической теории высока. В квантовых кристаллах $\Lambda \sim 1$ и эффект делокализации частиц вполне заметен. Подчеркнем, что в квантовых кристаллах имеет место сильная ангармоничность даже нулевых колебаний.

Параметр Λ легко выразить через характеристики атомов кристалла. Учитывая, что $\Theta \sim \hbar\omega$, где $\omega \sim \sqrt{\kappa/m}$ — характерная частота колебаний атомов, m — их масса, $\kappa \sim U/a^2$ — жесткость «пружины», удерживающей атомы в положении равновесия, находим $\Lambda \sim (\hbar/a)(mU)^{-1/2}$. В таком виде параметр Λ известен как квантовый параметр де Бура. Его значение максимально для кристаллов, состоящих из наиболее легких и слабо взаимодействующих атомов. Наибольшие значения Λ достигаются для He^3 ($\Lambda = 0,49$), для He^4 ($\Lambda = 0,43$), для водорода H_2 ($\Lambda = 0,28$) и для неона ($\Lambda = 0,07$). Во всех остальных чистых веществах параметр Λ ничтожно мал. Существуют еще важные случаи, когда эффект делокализации важен не для всех, а лишь для части составляющих кристалл частиц. Например, это относится к примесям водорода в решетках некоторых металлов (нио-

бий, цирконий). Из-за своей малой массы и сравнительно слабого взаимодействия с атомами матрицы атомы водорода могут делокализоваться в кристалле, в то время как сами атомы матрицы ведут себя вполне классическим образом.

Обратим внимание еще на следующее обстоятельство. Энергия взаимодействия U соседних атомов зависит от расстояния между ними a . При увеличении давления межатомное расстояние a убывает, а энергия взаимодействия U возрастает. При этом квантовый параметр Λ убывает или возрастает в зависимости от того, возрастает или убывает произведение Ua^2 . Поскольку энергия взаимодействия нейтральных атомов изменяется при изменении расстояния значительно быстрее $1/a^2$, параметр Λ довольно быстро убывает с увеличением давления. Наиболее квантовым кристаллом является, таким образом, твердый гелий при минимальных давлениях.

3. ДИФФУЗИЯ В ГАЗЕ ПРИМЕСОНОВ

Существует следующий простейший способ обнаружения эффекта делокализации частиц в кристалле. Рассмотрим кристалл гелия, содержащий один атом примеси, например, примесь ^3He в кристалле ^4He . Этот примесный атом даже при нуле температуры может передвигаться в кристалле путем вышеупомянутого квантового туннелирования, при котором он и ближайший атом матрицы меняются местами. Благодаря периодичности потенциала, в котором движется примесный атом, хорошим квантовым числом в данном случае является не координата, а квазиимпульс p . Энергия системы является некоторой периодической функцией $E(p)$ квазиимпульса. Ситуация здесь совершенно аналогична хорошо известному случаю электронов в металле. Примесные атомы ведут себя как квазичастицы, свободно движущиеся через кристалл с постоянной скоростью. Эти квазичастицы были введены И. М. Лифшицем и автором ¹ и Гаером и Зейном ² и названы примесонами или волнами флуктуации массы (mass-fluctuation waves). Их наиболее важными характеристиками является ширина энергетической зоны Δ (или частота туннелирования $J \sim \Delta/\hbar$) и скорость движения $v = \partial E/\partial p \sim aJ$. Типичные значения для примесей ^3He в решетке ^4He таковы: $\Delta \lesssim 10^{-4} \text{ }^\circ\text{K}$, $J \lesssim 1 \text{ Мгц}$, $v \lesssim 10^{-1} \text{ см/сек}$. Важно заметить, что ширина зоны Δ значительно меньше всех других энергий, характеризующих кристалл гелия. Мы увидим ниже, что благодаря этому факту динамика примесонов является весьма своеобразной.

Если концентрация примесей достаточно мала, то они представляют собой разреженный газ примесонов. Из приведенных выше простых соображений следует, таким образом, весьма важный вывод по поводу характера диффузии примесей в квантовых кристаллах ¹. Именно, должна иметь место так называемая квантовая диффузия, характерные черты которой такие же, как у диффузии частиц в газе. Для вычисления коэффициента диффузии D можно использовать обычную формулу газокинетической теории $D \sim vl$, где l — длина свободного пробега примесонов. При низких температурах фононами можно пренебречь и основную роль играет рассеяние примесонов друг на друге. Длина свободного пробега равна $l \sim (n\sigma)^{-1} \sim a^3/\sigma x$; здесь n — число примесей в единице объема, x — концентрация, σ — сечение рассеяния примесона на примесоне. Коэффициент диффузии

$$D \sim \frac{Ja^4}{\sigma x} \quad (1)$$

обратно пропорционален концентрации и не зависит от температуры ³⁻¹⁴.

Квантовая диффузия была обнаружена экспериментально Ричардсом, Поупом и Вайдемом ³ и Григорьевым, Есельсоном, Михеевым и Шуль-

маном⁵⁻⁷. На рис. 1 представлена полученная ими методом ЯМР концентрационная зависимость коэффициента диффузии примесей He^3 в ГПУ-кристалле He^4 с молярным объемом 21 см^3 . Экспериментальные данные хорошо ложатся на сплошную прямую, соответствующую закону $Dx = 1,2 \cdot 10^{-11} \text{ см}^2/\text{сек}$. Григорьевым и др.⁵⁻⁷, кроме того, была подробно исследована температурная зависимость диффузии и показана ее независимость от температуры в низкотемпературной области. Из сравнения формулы (1) с экспериментальными данными при $J \sim 1 \text{ Мгц}$ находим сечение

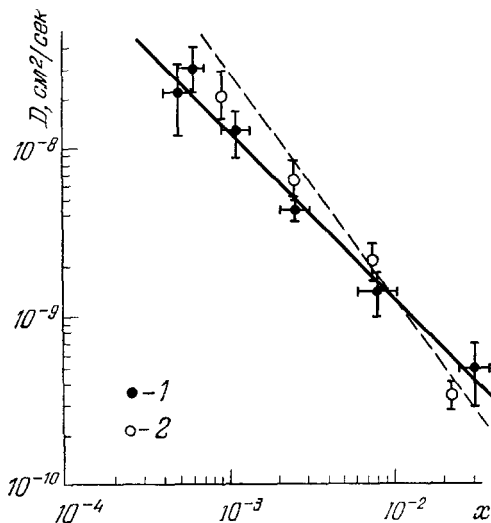


Рис. 1. Концентрационная зависимость коэффициента диффузии примесей He^3 в ГПУ-кристалле He^4 с молярным объемом 21 см^3 при $T < 1,2 \text{ °K}$

1 — данные работы²; 2 — данные работы⁵.

рассеяния $\sigma \sim 100 \text{ а}^2$. На первый взгляд столь большая величина сечения вызывает удивление, однако она может быть легко объяснена особенностями динамики примесонов, возникающими из-за их весьма узкой энергетической зоны. Действительно, рассмотрим взаимодействие двух примесонов между собой. Полная энергия системы равна

$$E_{12} = E(p_1) + E(p_2) + U(r_{12}), \quad (2)$$

где p_1, p_2 — квазиимпульсы примесонов, $E(p)$ — энергия уединенного примесона как функция его квазиимпульса, $U(r_{12})$ — энергия взаимодействия, $r_{12} = r_1 - r_2$, r_1, r_2 — координаты примесонов. Сумма кинетических энергий $E(p_1) + E(p_2)$ не может измениться на величину, большую 2Δ , поскольку Δ — полная ширина энергетической зоны. Так как полная

энергия сохраняется, потенциальная энергия $U(r_{12})$ также не может измениться больше, чем на 2Δ . Сталкивающиеся друг с другом примесоны не могут поэтому сблизиться на расстояние, меньшее радиуса взаимодействия R_0 , определяемого соотношением $U(R_0) \sim \Delta$. Поскольку Δ мало по сравнению со всеми другими характерными энергиями, величина R_0 значительно превышает межатомное расстояние. На больших расстояниях взаимодействие примесонов обусловлено, в основном, упругим взаимодействием. Примесон создает вокруг себя деформацию решетки, с которой взаимодействует другой примесон. Теория упругости¹⁵ приводит к следующему выражению для энергии упругого взаимодействия любых точечных дефектов:

$$U(r_{12}) = V_0(n) \left(\frac{a}{r_{12}} \right)^3, \quad (3)$$

где V_0 — некоторая характерная энергия, зависящая от взаимной ориентации дефектов $n = r_{12}/|r_{12}|$. Отсюда находим радиус взаимодействия $R_0 \sim a(V_0/\Delta)^{1/3}$ и сечение рассеяния примесона на примесоне

$$\sigma \sim R_0^2 \sim a^2 \left(\frac{V_0}{\Delta} \right)^{2/3}.$$

Экспериментальное значение сечения $\sigma \sim 100 \text{ а}^2$ дает возможность определить характерную энергию взаимодействия $V_0 \sim 10^3 \Delta$, что согласуется

с результатом непосредственного вычисления¹⁶ на основе формул теории упругости.

Таким образом, экспериментальные данные полностью соответствуют описанию примесей как газа примесей. Однако возникает следующий вопрос. Область применимости газовой модели определяется требованием, чтобы среднее расстояние между примесями было велико по сравнению с радиусом взаимодействия, т. е. $a/x^{1/3} \gg R_0$ или $x \ll \Delta/V_0 \sim 10^{-3}$. Между тем эксперимент показывает (см. рис. 1), что коэффициент диффузии приблизительно обратно пропорционален концентрации в более широкой области концентраций $10^{-4} < x < 10^{-2}$. Мы должны, следовательно, рассмотреть область больших концентраций $10^{-3} < x < 10^{-2}$, в которой среднее расстояние между атомами примеси меньше R_0 и система примесей не является газом.

4. ДИФФУЗИЯ СИЛЬНО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ПРИМЕСЕЙ

Пусть два атома примеси находятся друг от друга на расстоянии, меньшем радиуса взаимодействия, т. е. $r_{12} < R_0$. Найдём область расстояний r_{12} , в которой эти атомы можно рассматривать как взаимодействующие примеси с полной энергией, определяемой формулой (2). Эта формула справедлива при условии, что изменение энергии взаимодействия

$$\delta U(r_{12}) = U(r_{12} + a) - U(r_{12}) \sim a \frac{\partial U}{\partial r_{12}}, \quad (4)$$

возникающее при туннельном переходе одного из атомов в соседний узел решетки, мало по сравнению с шириной зоны Δ . Это условие выполняется с большим запасом при $r_{12} \sim R_0$, поскольку

$$\delta U(R_0) \sim V_0 \frac{a^4}{R_0^4} \sim \left(\frac{a}{R_0}\right) \Delta \sim 10^{-4} \Delta.$$

Оно нарушается в области расстояний $r_{12} < R_1$, где $R_1 \sim a(V_0/\Delta)^{1/4}$. В промежуточной области $R_1 < r_{12} < R_0$, таким образом, взаимодействие между атомами примеси является уже сильным, но эти атомы ведут себя еще как взаимодействующие примеси.

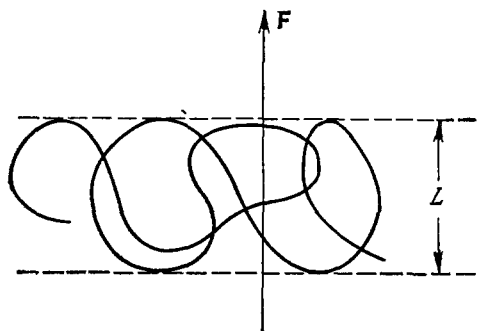
Область концентраций, в которой справедлива картина сильно взаимодействующих примесей, определяется требованием, чтобы среднее расстояние между атомами ^3He было меньше R_0 , но больше R_1 , т. е.

$$\frac{V_0}{\Delta} < x < \left(\frac{V_0}{\Delta}\right)^{3/4} \quad \text{или} \quad 10^{-3} < x < 10^{-2}.$$

Это как раз та область, которую необходимо рассмотреть для объяснения экспериментальных данных. Для выяснения характера движения сильно взаимодействующих примесей удобно рассмотреть сначала упрощенную задачу о движении уединенного примесей под действием постоянной силы

Г. Из обычного уравнения движения $\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F}$ находим зависимость квазиимпульса от времени $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 + \mathbf{F}t$, где \mathbf{p}_0 — начальное значение квазиимпульса. Если \mathbf{F} направлена вдоль одной из кристаллографических осей, то энергия $E(\mathbf{p})$ и скорость $\mathbf{v} = \partial E / \partial \mathbf{p}$ меняются при изменении \mathbf{p} периодическим образом с периодом порядка \hbar/a . Так как \mathbf{p} — линейная функция времени, E и \mathbf{v} — являются периодическими функциями времени с периодом порядка \hbar/aF , причем среднее значение скорости равно нулю. Под действием постоянной силы, таким образом, примесей совершает колебательное движение вблизи некоторого среднего положения с частотой порядка aF/\hbar и амплитудой порядка $v/(aF/\hbar) \sim \Delta/F$. Имеется, однако, существенная разница между рассмотренным частным случаем и общим случаем,

когда направление силы произвольно. Поскольку вдоль произвольного направления периодичность в импульсном пространстве отсутствует, все три компоненты скорости примесона в общем случае меняются во времени довольно случайным образом. Траектория примесона представляет собой случайную кривую типа изображенной на рис. 2. Так как потенциальная энергия — Fz не может изменяться больше чем на Δ , траектория заключена внутри перпендикулярного направления силы слоя толщиной порядка



ка $L \sim \Delta/F$. Характерный радиус кривизны траектории по порядку величины совпадает с толщиной слоя L . Примесон движется вдоль траектории со скоростью порядка aJ . Он, следовательно, диффундирует в плоскости, перпендикулярной направлению силы. Коэффициент диффузии по порядку величины равен $D \sim vL$ или

$$D \sim \frac{\hbar J^2 a}{F}. \quad (5)$$

Рис. 2. Траектория движения примесона под действием постоянной силы.

В принципе, такая картина движения давно известна из теории электронов в металлах. Однако для электронов рассмотренное диффузионное движение ненаблюдаемо из-за огромной ширины их энергетической зоны, благодаря которой характерное расстояние L всегда значительно превосходит длину свободного пробега.

Приведенные рассуждения делают ясным характер движения сильно взаимодействующих примесонов. Сила F , обусловленная их взаимодействием, равна

$$F \sim \frac{\partial U}{\partial r_{12}} \sim V_0 \frac{a^3}{r_{12}^4}. \quad (6)$$

Под действием этой силы каждый из примесонов совершает диффузионное движение с коэффициентом диффузии, определяемым формулами (5) и (6):

$$D \sim \frac{\hbar J^2}{a^2 V_0} r_{12}^4. \quad (7)$$

Для вычисления коэффициента диффузии раствора $\text{He}^3\text{—He}^4$ в области концентраций $10^{-3} < x < 10^{-2}$ достаточно подставить в (7) вместо r_{12} среднее расстояние между атомами He^3 , т. е. $r_{12} \sim a/x^{1/3}$. В результате находим

$$D \sim \frac{\hbar J^2 a^2}{V_0} x^{-4/3}. \quad (8)$$

Эта формула согласуется с экспериментальными данными, поскольку при $x \sim \Delta/V_0 \sim 10^{-3}$ она приводит к тому же результату, что и (4), а точность эксперимента не достаточна для того, чтобы на интервале $10^{-3} < x < 10^{-2}$ различить близкие законы x^{-1} и $x^{-4/3}$. Пунктирная прямая на рис. 1 соответствует закону $x^{-4/3}$. Таким образом, экспериментальные данные в области немалых концентраций естественным образом объясняются специфической диффузией примесонов под действием силы взаимодействия¹⁷.

Задача о диффузии примесей в области не малых концентраций рассматривалась Ландесманом и Винтером⁸ и Хуангом и др.¹⁴. Хотя эти авторы специально подчеркивали, что их подход представляет собой аль-

тернативу описанию с помощью понятия примесонов, формула (8) совпадает с результатом Ландесмана и Винтера. Хуанг и др. получили численно похожий результат. Следует отметить, что в работе⁸ в качестве области применимости формулы (8) указано неравенство $x \gg (\Delta/V_0)^2 \sim 10^{-6}$, откуда авторы сделали вывод о невозможности наблюдать примесоны в экспериментально исследованной области концентраций.

5. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ДИФФУЗИИ

До сих пор мы рассматривали область достаточно низких температур, в которой квантовая диффузия определяется взаимодействием примесонов между собой. При увеличении температуры начинает играть важную роль также и взаимодействие примесонов с фононами, что приводит к уменьшению длины свободного пробега. Таким образом, коэффициент диффузии примесонов должен убывать с повышением температуры. По этой причине, однако, при достаточно высокой температуре вместо квантовой диффузии более существенную роль начинает играть термоактивационная диффузия, экспоненциально возрастающая с повышением температуры. Имеется, следовательно, три характерные области температур (рис. 3). В области I диффузия ограничена рассеянием примесонов на примесонах и не зависит от температуры, в области II диффузия ограничена рассеянием примесонов на фононах и убывает с повышением температуры. Наконец, в области III основную роль играет термоактивационный механизм диффузии. Поскольку концентрационная зависимость диффузии имеет место, очевидно, лишь в области I, увеличение концентрации приводит к сужению области II и, наконец, к ее полному исчезновению. Пунктирные кривые на рис. 3 демонстрируют изменение характера температурной зависимости при больших концентрациях $x_3 > x_2 > x_1$.

Рассмотрим более подробно фононную область II. Время между столкновениями примесона с фононами равно $\tau \sim (Nc\sigma_\phi)^{-1}$, где $N \sim (T/\Theta a)^3$ — число фононов в единице объема, c — скорость звука, σ_ϕ — сечение рассеяния фонона на примесоне. Если температура мала по сравнению с температурой Дебая, то основную роль играют длинноволновые акустические фононы, сечение рассеяния которых на точечных дефектах пропорционально, как известно, четвертой степени волнового вектора фононов $q \sim T/\Theta a$. Таким образом, $\sigma_\phi \sim a^2 (qa)^4 \sim a^2 (T/\Theta)^4$ и время между столкновениями оказывается равным $\tau \sim (a/c) (\Theta/T)^7 \sim (\hbar/\Theta) (\Theta/T)^7$. В выражение для коэффициента диффузии примесонов $D \sim v^2 \tau_{tr}$ входит, однако, не τ , а транспортное время между столкновениями, сильно отличающееся от τ . Дело в том, что при всех достижимых температурах ширина энергетической зоны примесонов меньше температуры. Квазиимпульсы примесонов поэтому по порядку величины равны \hbar/a . Фононные же импульсы значительно меньше этой величины. В этом случае, как обычно, транспортное время

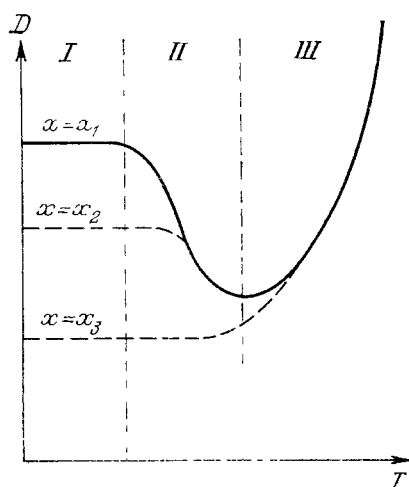


Рис. 3. Температурная зависимость коэффициента диффузии примесей.

отличается от τ добавочным множителем $(\Theta/T)^2$. Коэффициент диффузии

$$D \sim \frac{\hbar a^2 J^2}{\Theta} \left(\frac{\Theta}{T} \right)^9 \quad (9)$$

в фононной области обратно пропорционален, следовательно, девятой степени температуры¹.

Интересен вопрос об области применимости формулы (9). Длина свободного пробега примесона равна $l \sim v\tau \sim a (\Delta/\Theta) (\Theta/T)^7$.

При температурах $T \ll T_0$, где $T_0 \sim \Theta (\Delta/\Theta)^{1/7}$, длина свободного пробега велика по сравнению с межатомным расстоянием и приведенный выше вывод формулы (9) не вызывает сомнений. Интересно, однако, что, как было показано Каганом и Максимовым¹¹ и Каганом и Клиngerом¹², формула (9) сохраняется без всяких изменений в значительно более широкой температурной области, вплоть до температур порядка дебаевской температуры. Проще всего этот результат можно получить с помощью следующих рассуждений, показывающих к тому же, что понятие примесонов в существенной степени сохраняет свой смысл даже в условиях, когда их длина свободного пробега много меньше межатомного расстояния¹⁷.

Речь идет о движении взаимодействующей с фононами квазичастицы со спектром

$$E(\mathbf{p}) = E_0 + e(\mathbf{p}),$$

где E_0 — постоянная, $e(\mathbf{p})$ — функция квазиимпульса, по порядку величины равная Δ и потому малая по сравнению с температурой. Кинетическое уравнение для классической функции распределения квазичастицы $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ имеет следующий вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial e}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = I, \quad (10)$$

где \mathbf{F} — действующая на примесон внешняя сила, I — интеграл столкновений с фононами

$$I = - \int d^3 p' \int d^3 q d^2 q' W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \{ n(\mathbf{q}) [1 + n(\mathbf{q}')] f(\mathbf{p}) - \\ - n(\mathbf{q}') [1 + n(\mathbf{q})] f(\mathbf{p}') \} \delta(\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{q}' - \mathbf{p}') \delta[\omega(\mathbf{q}) - \omega(\mathbf{q}')]. \quad (11)$$

Здесь $n(\mathbf{q})$ — функция распределения фононов, $\omega(\mathbf{q})$ — их энергетический спектр, W — вероятность столкновения примесона с фононом. В аргументе δ -функции, выражающей закон сохранения энергии, мы пренебрегли величиной $e(\mathbf{p})$ по сравнению с энергией фононов, поскольку последняя по порядку величины совпадает с температурой.

Легко видеть, что в таком виде кинетическое уравнение справедливо при условии $\hbar/\tau \ll T$. Более жесткого условия $\hbar/\tau \ll \Delta$, эквивалентного условию малости межатомного расстояния по сравнению с длиной свободного пробега примесона, не требуется. Действительно, если f и \mathbf{F} медленно меняются в пространстве и во времени и сила \mathbf{F} достаточно мала, то уравнение (10) справедливо и в общем квантовом случае, но описывающая столкновения величина I , вообще говоря, даже не выражается через функцию распределения. Однако если мы пренебрежем $e(\mathbf{p})$ в выражении для спектра примесона, то условие $\hbar/\tau \ll \omega \sim T$ гарантирует возможность использования формулы (11), поскольку неопределенность энергии \hbar/τ мала по сравнению с энергией фононов. Энергия $e(\mathbf{p}) \sim \Delta$ вообще не фигурирует при этом в задаче. Разница между случаями $\hbar/\tau \ll \Delta$ (или $l \gg a$) и $\hbar/\tau \gg \Delta$ (или $l \ll a$) заключается лишь в том, что в первом из них в аргументе δ -функции в (11) можно было бы учесть $e(\mathbf{p})$, в то время как во

втором — это являлось бы превышением точности. В обоих случаях для определения коэффициента диффузии следует использовать газокинетические уравнения (10), (11), откуда получается формула (9). Условие $\hbar/\tau \ll T$ при этом эквивалентно, очевидно, неравенству $T \ll \Theta$. Следует подчеркнуть, однако, что приведенные рассуждения не доказывают применимость при $T \ll \Theta$ формулы (9) для фактически наблюдаемого коэффициента

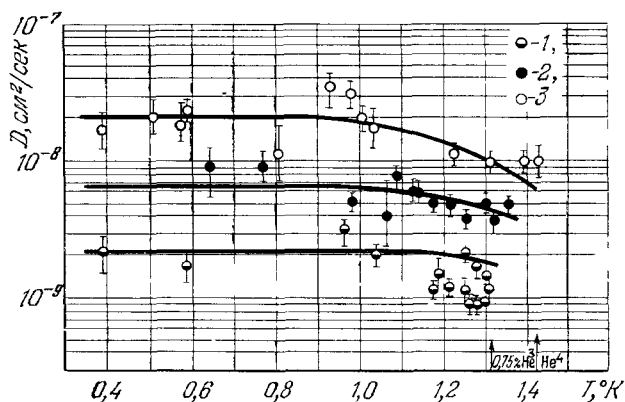


Рис. 4. Температурная зависимость коэффициента диффузии примесей He^3 в ГПУ-кристалле He^4 с молярным объемом 21 см^3 при различных концентрациях. 1 — 0,75%; 2 — 0,25%; 3 — 0,092%. Вертикальные стрелки указывают температуры перехода в ОЦК-фазу для чистого He^4 и раствора с концентрацией 0,75% He^4 .

диффузии. В рассуждениях молчаливо предполагалось, что термсактивационный механизм диффузии пренебрежим. Однако он может стать основным механизмом диффузии при температурах, значительно меньших

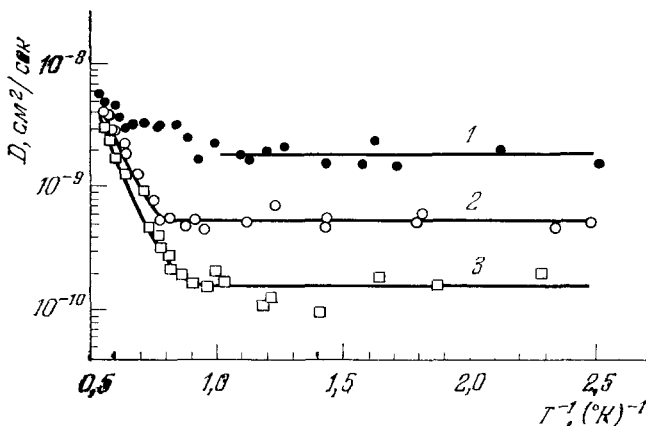


Рис. 5. Зависимость коэффициента диффузии примесей He^3 в ГПУ-кристалле He^4 с молярным объемом $20,7 \text{ см}^3$ от обратной температуры. 1 — концентрация 0,25%; 2 — 0,75%; 3 — 2,17%.

температуры Дебая. Именно такая ситуация фактически имеет место в растворах изотопов гелия.

На рис. 4 представлены экспериментальные данные Григорьева и др.⁶ о температурной зависимости коэффициента диффузии примесей He^3 в ГПУ-кристалле He^4 при различных концентрациях. Здесь видна температурная область I и начало области II. Измерения при более высоких температурах невозможны, поскольку при $T = 1,3 \div 1,4 \text{ }^\circ\text{K}$ происходит

фазовый переход в ОЦК кристаллическую модификацию. Сплошные кривые на рис. 4 проведены согласно формуле $D^{-1} = 6,2 \cdot 10^{10} x + 4,6 \cdot 10^6 T^9$, что соответствует одновременному учету рассеяния примесонов друг на друге и на фононах.

Экспериментальные данные Григорьева и др.⁷ для молярного объема $20,7 \text{ см}^3$ и концентраций $x = 0,25\%$; $0,75\%$ и $2,17\%$ приведены на рис. 5. Здесь видны температурные области I и III. Промежуточная фононная область II отсутствует.

6. ДИФФУЗИЯ, ИНДУЦИРОВАННАЯ ВАКАНСИОНАМИ

Рассмотрим температурную область III. В ней возможны два механизма движения примеси. Это, во-первых, классическая термоактивационная диффузия, когда примесный атом переходит в соседний узел решетки, преодолевая некоторый энергетический барьер, и, во-вторых, диффузия, обусловленная наличием термоактивированных вакансий. В первом случае активационная энергия, характеризующая температурную зависимость диффузии, равна высоте энергетического барьера. Во втором — энергии образования вакансии. Движение примеси здесь является результатом

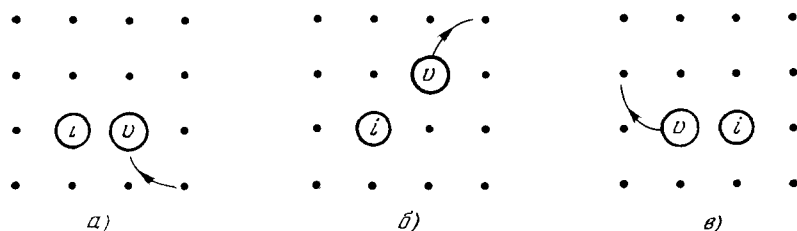


Рис. 6. Взаимодействие вакансии с примесным атомом.

следующего процесса (рис. 6). Двигаясь в кристалле, вакансия может занять ближайший к примесному атому узел решетки (см. рис. 6, а). В дальнейшем вакансия может перейти на узел, занятый либо атомом матрицы (см. рис. 6, б), либо примесным атомом (см. рис. 6, в). Затем вакансия уйдет далеко от места расположения примеси. В случае рис. 6, в процесс сопровождается перемещением примеси.

Индукцированная вакансиями диффузия примесей представляет для нас особый интерес. Дело в том, что в квантовых кристаллах вакансии превращаются в делокализованные квазичастицы, так называемые вакансии или вакансионные волны (vacancy waves). Они значительно более подвижны, чем примесоны. Согласно вычислениям Хезерингтона¹⁸, который впервые рассматривал этот вопрос, и других авторов^{9,16,19-21} ширина энергетической зоны вакансии Δ_v порядка 1°K , т. е. значительно превосходит ширину зоны примесона. Мы можем, следовательно, пренебречь собственным туннелированием примеси и рассматривать процесс, изображенный на рис. 6 как квантовомеханическое рассеяние делокализованной вакансии на локализованном примесном атоме¹³. Процесс, изображенный на рис. 6, б, соответствует упругому рассеянию, поскольку в этом случае конечное состояние мишени (т. е. примесного атома) совпадает с начальным состоянием. Случай рис. 6, в соответствует неупругому рассеянию, сопровождающемуся смещением примесного атома. Индукцированная вакансиями диффузия определяется, следовательно, вероятностью неупругого рассеяния. Коэффициент диффузии равен $D \sim a^2 v$, где v — частота актов неупругого рассеяния, определяемая соотношением $v \sim N_v v \sigma_{in}$. Здесь σ_{in} — сечение неупругого рассеяния вакансии на примеси, N_v — число

вакансионнов в единице объема, v — их скорость. При высоких температурах $T \gg \Delta_v$ имеем

$$N_v \sim \frac{1}{a^3} e^{-\varepsilon_0/T}, \quad v \sim \frac{a\Delta_v}{\hbar},$$

где ε_0 — энергия образования вакансии, откуда находим

$$D \sim \frac{\Delta_n \sigma_{in}}{\hbar} e^{-\varepsilon_0/T}. \quad (12)$$

Чтобы ответить на вопрос о природе термоактивационной диффузии примесей He^3 , мы должны сравнивать коэффициенты диффузии атомов He^3

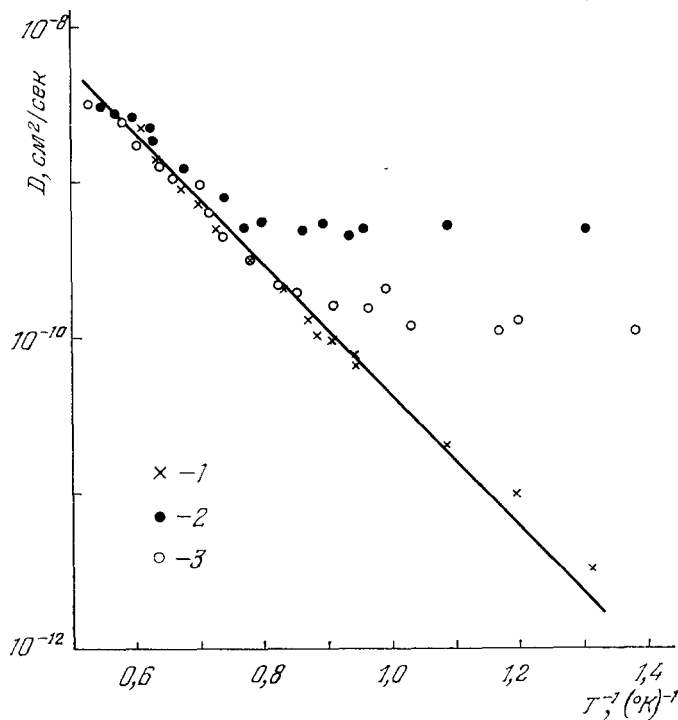


Рис. 7. Температурная зависимость коэффициента диффузии примесей в ГПУ-кристалле He^4 с молярным объемом $20,7 \text{ см}^3$.

1 — положительные ионы 26 ; 2 — 0,75% He^3 , 3 — 2,17% He^3 .

и каких-либо других примесей в том же самом кристалле. Если активационные энергии совпадут, то это будет сильным аргументом в пользу вакансионного механизма диффузии. Кроме изотопических примесей в кристаллы гелия можно контролируемым образом вводить и исследовать лишь ионы. Коэффициент диффузии ионов может быть легко вычислен из экспериментально измеряемой подвижности во внешнем электрическом поле. Эти измерения проводились Шальниковым²² и затем рядом других авторов^{23–27}. На рис. 7 представлена температурная зависимость коэффициента диффузии положительных ионов в твердом He^4 с молярным объемом $20,7 \text{ см}^3$, полученная Кешишевым и Шальниковым²⁶. На том же рисунке представлены соответствующие данные Григорьева и др.⁷ по диффузии изотопических примесей. В температурной области III, где диффузия является термоактивационной, не только активационная энергия, но и абсолютная величина диффузии атомов He^3 совпадают с соответствующими величинами для положительных зарядов²⁷. Экспериментальные данные описываются уравнением $D = 6,6 \cdot 10^{-7} \exp(-9,5/T)$, которому соответствует прямая, проведенная на рис. 7. Предполагая $\Delta_v \sim 1 \text{ °K}$ и сравнивая экспе-

риментальные данные с формулой (12), находим $\varepsilon_0 = 9,5^\circ\text{K}$ и $\sigma_{in} \sim \sim 5 \cdot 10^{-3} a^2$. Столь малое значение сечения неупругого рассеяния можно качественно объяснить следующим образом. Ситуация здесь аналогична рассмотренному выше случаю рассеяния примесона на примесоне. Энергия взаимодействия вакансии с примесью имеет аналогичный вид $U(r) \sim V(a/r)^3$, где V — некоторая характерная энергия взаимодействия. Если $V > \Delta_v$, то вакансион не может проникнуть в область $r < a(V/\Delta_v)^{1/3}$. Точнее, вероятность такого проникновения весьма мала. Это приводит, как мы видели выше, к большой величине полного сечения рассеяния. Неупругий процесс, однако, возможен лишь в случае, когда вакансион и примесь являются ближайшими соседями в решетке. Таким образом, в случае $V > \Delta_v$ сечение неупругого рассеяния значительно меньше a^2 , хотя полное сечение значительно превосходит a^2 . Существенно отметить, однако, что взаимодействия вакансии с примесью He^3 и ионом различны. Не существует причины для совпадения неупругих сечений, когда оба они значительно меньше a^2 . Только более детальные измерения одновременно диффузии He^3 и подвижности ионов могли бы помочь прояснить этот вопрос.

Изложенный выше подход к задаче о вакансионной диффузии ионов (или об эквивалентной величине ионной подвижности) позволяет выяснить зависимость подвижности от температуры и электрического поля при достаточно низких температурах в общем виде, не вдаваясь в детали конкретной структуры ионов¹³. Пусть $\sigma_n(\mathbf{p})$ — сечение неупругого рассеяния вакансии с квазимпульсом \mathbf{p} , сопровождающегося перемещением иона на вектор \mathbf{a}_n , соединяющий исходный узел решетки с его n -м ближайшим соседом. Энергия иона i , следовательно, энергия вакансии меняются при этом на величину $e\mathbf{E}\mathbf{a}_n$, где e — заряд иона, \mathbf{E} — приложенное электрическое поле. Средняя дрейфовая скорость иона выражается через сечения формулой

$$\mathbf{u} = \sum_n \mathbf{a}_n \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \sigma_n(\mathbf{p}) v(\mathbf{p}) [n(\varepsilon) - n(\varepsilon + e\mathbf{E}\mathbf{a}_n)], \quad (13)$$

где $v(\mathbf{p})$ — скорость вакансии, $n(\varepsilon)$ — равновесная функция распределения вакансионных по энергиям $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$. Здесь и в дальнейшем суммирование по n проводится по тем из ближайших соседей \mathbf{a}_n , для которых $e\mathbf{E}\mathbf{a}_n > 0$. Смещения ионов на векторы $(-\mathbf{a}_n)$ учтены в формуле (13) как обратные процессы.

Выражение (13) можно записать в виде

$$\mathbf{u} = \sum_n \mathbf{a}_n \int \frac{d\varepsilon}{(2\pi\hbar)^3} [n(\varepsilon) - n(\varepsilon + e\mathbf{E}\mathbf{a}_n)] \int \sigma_n(\mathbf{p}) dS,$$

причем последний интеграл берется по поверхности постоянной энергии. В простейшем случае, когда все векторы \mathbf{a}_n кристаллографически эквивалентны (в ОЦК-кристалле гелия, но не в ГПУ-кристалле), этот интеграл вследствие симметрии решетки не зависит от индекса n . Пусть температура мала по сравнению с шириной энергетической зоны вакансионных. Тогда практически все они расположены вблизи дна зоны, где их спектр квадратичен, а скорость движения мала. Согласно известному результату квантовой механики сечение неупругого рассеяния медленных частиц обратно пропорционально их скорости. Поэтому

$$\int \sigma_n dS = \alpha \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_0},$$

где ε_0 — энергия, соответствующая дну зоны вакансионных, α — некоторая постоянная.

Функцию распределения $n(\varepsilon)$ можно считать больцмановской, поскольку ε_0 равна, как мы видели выше, примерно 10°K и, следовательно, много больше температуры.

Окончательно получаем

$$\mathbf{u} = \frac{\alpha}{16\pi\hbar^3} \left(\frac{T}{\pi} \right)^{3/2} e^{-\varepsilon_0/T} \sum_n \mathbf{a}_n \cdot \left[1 - \exp \left(-\frac{eE\mathbf{a}_n}{T} \right) \right]. \quad (14)$$

В слабых полях $eE\mathbf{a} \ll T$ скорость дрейфа пропорциональна величине поля

$$u_i = eB_{ik}E_k,$$

где тензор подвижности B_{ik} , согласно (14), равен

$$B_{ik} = \frac{\alpha}{16\pi^2\hbar^3} \left(\frac{T}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\varepsilon_0/T} \sum_n a_{ni}a_{nk}.$$

В сильных полях $eE\mathbf{a} \gg T$ возникает своеобразная ситуация. Практически при всех направлениях поля дрейфовая скорость достигает насыщения и не зависит от $|E|$:

$$\mathbf{u} = \frac{\alpha}{16\pi\hbar^3} \left(\frac{T}{\pi} \right)^{3/2} e^{-\varepsilon_0/T} \sum_n \mathbf{a}_n. \quad (15)$$

Существенно, однако, что суммирование здесь ведется только по тем n , для которых $eE\mathbf{a}_n > 0$. Поэтому при изменении направления поля направление скорости меняется почти скачкообразно, когда вектор \mathbf{E} проходит через плоскость, перпендикулярную одному из векторов \mathbf{a}_n . Угловая ширина переходной области порядка величины $T/eEa \ll 1$. В такой переходной области скорость меняется не только по направлению, но и по абсолютной величине. Для иллюстрации на рис. 8 изображена зависимость абсолютной величины скорости и ее направления от ориентации вектора \mathbf{E} в плоской квадратной решетке с двумя перпендикулярными и равными по абсолютной величине элементарными векторами трансляции $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$. В данном случае максимальное значение скорости дрейфа u_{\max} равно согласно (15)

$$u_{\max} = \frac{\sqrt{2}\alpha}{16\pi\hbar^3} \left(\frac{T}{\pi} \right)^{3/2} e^{-\varepsilon_0/T} |\mathbf{a}_1|.$$

Угловая зависимость скорости дрейфа непосредственно отражает геометрию кристаллической решетки.

7. ДВУ- И ОДНОМЕРНЫЕ КВАЗИЧАСТИЦЫ

Каждая из рассмотренных выше квазичастиц (примесоны, вакансии) представляет собой непосредственный квантовый аналог соответствующего точечного дефекта или примеси в классическом кристалле. Оказывается, однако, что энергетический спектр квантового кристалла отнюдь не исчер-

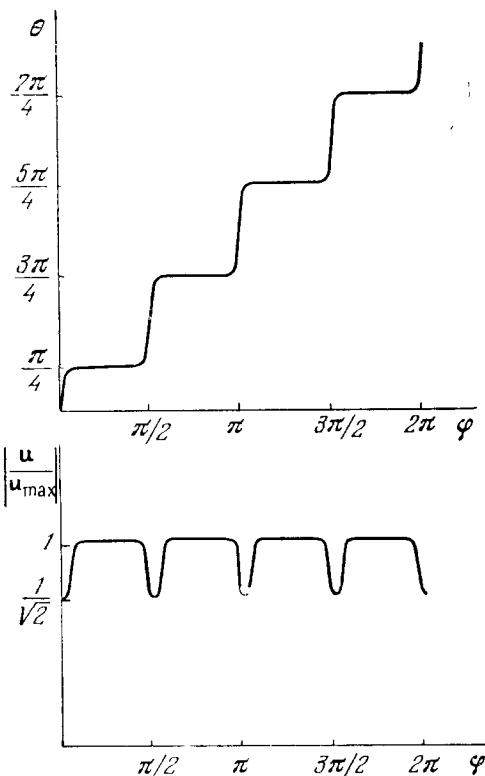


Рис. 8. Зависимость абсолютной величины и направления дрейфовой скорости ионов от ориентации электрического поля. θ — угол между \mathbf{u} и \mathbf{a}_1 ; φ — угол между \mathbf{E} и \mathbf{a}_1 .

пывается этими простейшими квазичастицами. Ниже будет показано, что в квантовом кристалле должны существовать своеобразные вторичные квазичастицы, возникающие при наличии одновременно нескольких примесей или дефектов того или иного типа. Уникальной особенностью этих квазичастиц является то, что они двигаются свободно, но лишь вдоль некоторых определенных плоскостей или осей кристаллической решетки, т. е. являются дву- или одномерными квазичастицами в объеме трехмерного кристалла. Мы видели выше, что два атома примеси, помещенные на расстояние r_{12} друг от друга меньше радиуса взаимодействия $R_0 \sim a (V_0/\Delta)^{1/3}$, но больше $R_1 \sim a (V_0/\Delta)^{1/4}$ совершают диффузионное движение под действием силы взаимодействия с коэффициентом диффузии, характеризующим, в частности, движение пары примесей как целого, определяемым формулой (7). Поскольку при $r_{12} < R_0$ энергия взаимодействия больше 2Δ , примеси не могут разойтись в дальнейшем на бесконечное расстояние. Они ведут себя, следовательно, как связанные потенциалом взаимодействия, причем этот вывод справедлив независимо от знака взаимодействия (притяжение или отталкивание).

Интересно проследить за изменением характера возможных типов движения двух примесей при дальнейшем уменьшении относительного расстояния r_{12} ¹⁷. При $r_{12} < R_1$ туннелирование одного из атомов примеси на межатомное расстояние сопровождается изменением энергии взаимодействия δU (см. (4)), превышающем ширину зоны Δ . В этих условиях вероятность туннелирования пропорциональна Δ^2 , т. е. пренебрежимо мала. Столь же мала и вероятность одновременного туннелирования обоих атомов с сохранением энергии. Таким образом, возможность движения примесей практически исчезает. Существуют, однако, важные исключения из этого результата. Предположим, что прямая, соединяющая примесные атомы, почти параллельна кристаллографической оси достаточно высокого порядка. В ГПУ-кристалле гелия, например, таковой является гексагональная ось. Функция $V_0(\mathbf{n})$, определяющая энергию взаимодействия согласно формуле (3), имеет, очевидно, экстремум при \mathbf{n} , параллельном гексагональной оси. Поэтому смещение одного из примесных атомов на малое расстояние ρ в направлении, перпендикулярном \mathbf{n} , меняет энергию взаимодействия на величину порядка

$$\delta U_\rho \sim V_0 \left(\frac{a}{r_{12}} \right)^3 \left(\frac{\rho}{r_{12}} \right)^2. \quad (16)$$

Если $r_{12} > R_2$, где $R_2 \sim a (V_0/\Delta)^{1/5}$, то δU_ρ при $\rho \sim a$ меньше ширины зоны Δ . Таким образом, в рассматриваемых условиях практически невозможно движение примесей вдоль \mathbf{n} , но для движения в плоскости, перпендикулярной \mathbf{n} , возникает ситуация, аналогичная рассмотренной выше в разделе 4. Траектории примесных атомов представляют собой случайные кривые, лежащие в плоскостях, перпендикулярных гексагональной оси. Радиус кривизны траекторий $\bar{\rho}$ определяется из условия, чтобы при $\rho \sim \bar{\rho}$ было $\delta U_\rho \sim \Delta$, т. е. $\bar{\rho} \sim a (\Delta/U_0)^{1/2} (r_{12}/a)^{5/2}$. Два атома примеси, расположенные на расстоянии r_{12} таком, что $R_1 > r_{12} > R_2$ в направлении \mathbf{n} , близком к гексагональной оси, совершают, следовательно, своеобразное двумерное диффузионное движение в гексагональной плоскости кристалла. Коэффициент диффузии по порядку величины равен

$$D \sim v\bar{\rho} \sim \sqrt{\frac{\Delta^3 r_{12}^5}{\hbar^2 V_0 a}}.$$

Подчеркнем, что для возможности такого движения недостаточно экстремума функции $V_0(\mathbf{n})$. Необходимо также, чтобы кристалл в перпендикулярной плоскости был периодичен.

Пусть, наконец, $r_{12} < R_2$. При этом смещение одного из примесных атомов в соседний узел решетки даже в направлении, перпендикулярном гексагональной оси, приводит, вообще говоря, к изменению энергии взаимодействия, большому Δ . Здесь, однако, также имеются важные исключения. Пусть один из атомов примеси расположен в некоторой точке A (рис. 9)

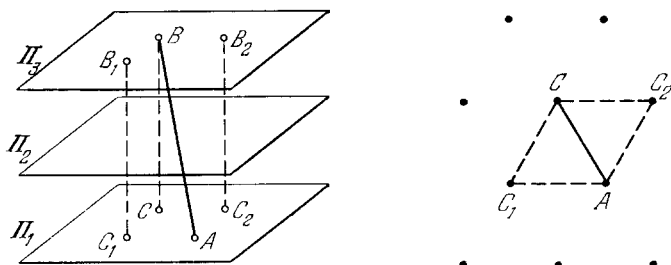


Рис. 9. Двумерная квазичастица из двух примесных атомов.

гексагональной плоскости Π_1 . ГПУ-кристалл построен из семейства параллельных гексагональных плоскостей (Π_1, Π_2, Π_3 , на рис. 9). Предположим, что второй атом примеси расположен в некоторой точке B другой, вообще говоря, гексагональной плоскости (Π_3 на рис. 9), но так, что его проекция C на плоскость Π_1 является ближайшим соседом точки A . На рис. 9 плоскость Π_1 вместе с точками A и C показана отдельно. Перемещение второго атома в своей гексагональной плоскости из точки B в точки B_1 или B_2 , проекциями которых на плоскость Π_1 являются соответственно точки C_1 или C_2 , вообще не сопровождается изменением энергии взаимодействия, поскольку пары точек AB, AB_1 и AB_2 кристаллографически эквивалентны. То же самое имеет место при перемещении первого атома в плоскости Π_1 из A в C_1 или C_2 . Легко понять, что в результате перемещений такого типа система может двигаться как целое по всей гексагональной плоскости. Поскольку рассматриваемые перемещения не меняют энергию взаимодействия, в данном случае движение является полностью когерентным. Пара примесных атомов ведет себя как одна своеобразная двумерная квазичастица, двигающаяся как свободная, но только в гексагональной плоскости кристалла¹⁷. Так как при заданной координате одного из атомов имеется шесть возможных положений другого атома, энергетический спектр этих квазичастиц содержит шесть ветвей.

Подробный анализ всех возможных типов таких бинарных квазичастиц был произведен Мейеровичем²⁸. Им показано, в частности, что кроме двумерных существуют также одномерные квазичастицы. На рис. 10 показана конфигурация двух атомов примеси, способная совершать одномерное движение. Точка A соответствует положению первого примесного атома, точка C — проекции второго на ту же гексагональную плоскость. Первый атом может здесь туннелировать без изменения энергии взаимодействия

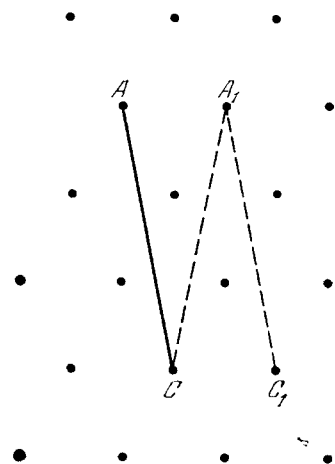


Рис. 10. Одномерная квазичастица из двух примесных атомов.

из A в A_1 . Затем второй атом может туннелировать в своей гексагональной плоскости из положения с проекцией C в положение с проекцией C_1 и т. д. Пара примесных атомов ведет себя как одномерная квазичастица, свободно двигающаяся вдоль прямой, параллельной направлению AA_1 . Энергетический спектр этих квазичастиц содержит две ветви.

Интересный пример комплекса из трех примесных атомов, представляющего собой одномерную квазичастицу, показан на рис. 11²⁸. Исходная конфигурация ABC путем перемещений каждый раз одного из атомов в ближайший узел решетки может быть переведена через эквивалентные конфигурации AB_1C , AB_1C_1 , AB_2C_1 в конфигурацию $A_1B_2C_1$, отличающуюся от исходной трансляцией вдоль прямой, параллельной AA_1 .

Ричардсом и др.²⁹ до работ^{17 28} была высказана мысль о возможности

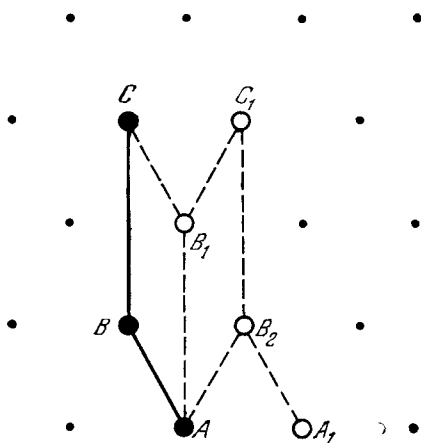


Рис. 11. Одномерная квазичастица из трех примесных атомов.

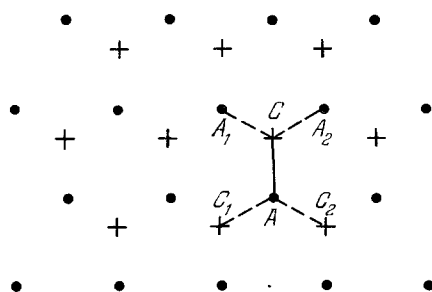


Рис. 12. Двумерная квазичастица из двух атомов, являющихся ближайшими соседями.

когерентного движения примесных атомов, образующих пары ближайших соседей. Это было сделано в связи с полученными в работе²⁹ экспериментальными данными о зависимости времени спин-решеточной релаксации T_1 от частоты ядерного магнитного резонанса для примесей He^3 в ГПУ-кристаллах He^4 . Наиболее интересной особенностью этих данных является наличие ярко выраженных резонансных аномалий при частотах вблизи 1,5 и 3,0 МГц. В дальнейшем Муллин и др.³⁰ выяснили, что пары примесных атомов, являющиеся ближайшими соседями, ведут себя как двумерные квазичастицы. Имеется два типа таких пар. Первый тип является частным случаем рис. 9 и соответствует ситуации, когда оба атома находятся в одной гексагональной плоскости (точка B совпадает с точкой C). Второй тип изображен на рис. 12. Примесные атомы находятся в этом случае в соседних гексагональных плоскостях. Точки на рис. 12 соответствуют узлам решетки, находящимся в одной из этих плоскостей, крестики — проекциям узлов второй гексагональной плоскости на первую плоскость. Точка A — положение первого атома, точка C — проекция второго. Первый атом может здесь туннелировать без изменения энергии в A_1 и A_2 , второй — в состояние с проекциями C_1 и C_2 . Муллин и др.³⁰ вычислили вклад двумерных квазичастиц в скорость релаксации T_1^{-1} . Вычисления приводят к резонансным особенностям, характер и положение которых согласуются с экспериментальными данными²⁹. Эксперимент²⁹, таким образом, подтверждает существование двумерных примесных квазичастиц.

Более непосредственное подтверждение могло бы быть получено при изучении тонкой структуры крыльев линии ядерного магнитного резонан-

са. Известно ³¹, что система из двух спинов благодаря диполь-дипольному взаимодействию имеет резонансные частоты ω , несколько сдвинутые относительно частоты γH (γ — гиромагнитное отношение, H — внешнее магнитное поле) резонанса для уединенного спина:

$$\omega = \gamma H \pm \frac{3}{4} \frac{\hbar \gamma^2}{r_{12}^3} (1 - 3 \cos^2 \theta), \quad (17)$$

где θ — угол между магнитным полем и осью, соединяющей ядра. В слабом растворе кроме уединенных атомов He^3 , имеются также пары атомов. Комплексами из большого числа примесей можно пренебречь. Наибольший сдвиг частоты дают, как видно из (17), пары с $r_{12} \sim a$. Эти пары могут быть трех видов: неподвижные пары (к ним формула (17) применима буквально) и пары, представляющие собой дву- или одномерные квазичастицы. В последних двух случаях состояние системы определяется заданием квазиимпульса \mathbf{p} (дву- или одномерного) и номера энергетической зоны ν . Такое состояние является суперпозицией всех возможных локализованных состояний, которые мы будем нумеровать индексом i , с некоторыми коэффициентами $A_i^\nu(\mathbf{p})$. Резонансные частоты зависят, вообще говоря, от \mathbf{p} и ν и равны

$$\omega_\nu(\mathbf{p}) = \gamma H \pm \frac{3}{4} \frac{\hbar \gamma^2}{r_{12}^3} (1 - 3 \langle \cos^2 \theta \rangle), \quad (18)$$

где

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \sum_i |A_i^\nu(\mathbf{p})|^2 \cos^2 \theta_i; \quad (19)$$

здесь θ_i — угол между магнитным полем и прямой, соединяющей атомы в локализованном состоянии i . Коэффициенты $A_i^\nu(\mathbf{p})$ удовлетворяют условию нормировки

$$\sum_i |A_i^\nu(\mathbf{p})|^2 = 1. \quad (20)$$

Самый большой сдвиг частоты дают пары атомов, являющихся ближайшими соседями. Они ведут себя как двумерные квазичастицы и могут быть, как мы видели, двух типов, соответствующих рис. 9 и рис. 12. В обоих случаях индекс i принимает три значения, поскольку обе пары имеют три различные ориентации (соответствующие конфигурациям AC , AC_1 , AC_2 на рис. 9 и рис. 12). Пусть магнитное поле направлено вдоль гексагональной оси. Тогда для пар первого типа $\cos \theta_i = 0$ при всех i и $\cos \theta_i = \sqrt{2/3}$ для пар второго типа. В этом случае в силу условия (20) выражения, стоящие в скобках формулы (18), для двух типов пар равны по абсолютной величине и отличаются знаком, так что спектр частот дискретен и состоит всего из двух линий

$$\omega_{1,2} = \gamma H \pm \frac{3\hbar\gamma^2}{4r_{12}^3}$$

одинаковой интенсивности. Такой же результат получился бы и в жесткой решетке, однако в данном случае квазичастицы легко двигаются в гексагональной плоскости и потому реагируют на градиент магнитного поля, причем только на градиент, параллельный гексагональной плоскости. Существенно, что сдвиг частот значительно превышает ширину линии. Величина сдвига порядка $\hbar\gamma^2/a^3 \sim 10^4 \text{ сек}^{-1}$. Время же релаксации T_2 , наблюдаемое экспериментально ^{3,32} в слабых растворах He^3 в твердом He^4 , достигает значений 10^{-1} — 1 сек . Если магнитное поле направлено под углом к гексагональной оси, то частоты зависят от квазиимпульса и спектр становится непрерывным. Форма спектра может быть, однако, точно

вычислена, поскольку коэффициенты $A_i^{\nu}(\mathbf{p})$ удовлетворяют простой системе линейных алгебраических уравнений.

Для одномерных квазичастиц спектр дискретен при любом направлении магнитного поля, так как в этом случае имеются всего две различные ориентации пары и при любом значении квазиимпульса имеет место равенство $|A_1^{\nu}(\mathbf{p})| = |A_2^{\nu}(\mathbf{p})|$. Каждая из одномерных частиц дает две линии

$$\omega_{1,2} = \gamma H \pm \frac{3\hbar\gamma^2}{4r_{12}^3} \left[1 - \frac{3}{2} (\cos \theta_1 + \cos \theta_2) \right].$$

Подчеркнем, что дискретная тонкая структура крыльев линии ЯМР может наблюдаться только на монокристаллических образцах.

Обсудим, наконец, те процессы, которые обуславливают возможность движения примесных атомов в условиях, когда туннелирование одного из них на межатомное расстояние сопровождается изменением энергии взаимодействия, значительно превышающим ширину зоны Δ . Вероятность этих процессов w (в единицу времени) определяет, в частности, время жизни рассмотренных выше бинарных квазичастиц. Простейшим процессом является здесь термоактивационная диффузия. Соответствующая вероятность w , однако, экспоненциально убывает с понижением температуры и потому в низкотемпературной области основную роль играют процессы квантового туннелирования с участием фононов, обеспечивающих энергетический баланс при переходе примеси в соседний узел решетки. Возможны два типа таких процессов. Первый из них — туннелирование примеси, сопровождающееся рассеянием фонона. Вероятность этого процесса w_1 легко оценить, используя результаты работ^{11,12}:

$$w_1 \sim \frac{\Delta^2}{\hbar\Theta} \left(\frac{T}{\Theta} \right)^7.$$

Второй процесс — это туннелирование примеси с одновременным спонтанным излучением фонона¹³. Энергия фонона $\hbar\omega$ равна изменению энергии взаимодействия $\hbar\omega \sim \delta U \sim Fa \sim V_0 (a/r_{12})^4$. Вероятность w_2 спонтанного излучения, как обычно, пропорциональна кубу частоты фонона и квадрату интеграла перекрытия волновых функций примеси на соседних узлах, т. е. квадрату ширины зоны Δ :

$$w_2 \sim \frac{\Delta^2}{\hbar\Theta} \left(\frac{\hbar\omega}{\Theta} \right)^3 \sim \frac{\Delta^2}{\hbar\Theta} \left(\frac{V_0}{\Theta} \right)^3 \left(\frac{a}{r_{12}} \right)^{12}.$$

Для наиболее важного случая квазичастиц с $r_{12} \sim a$ второй процесс становится основным при $T < V_0 (\Theta/V_0)^{4/7}$. В этой низкотемпературной области время жизни большинства квазичастиц не зависит от температуры.

8. ДИСЛОКАЦИИ В КВАНТОВЫХ КРИСТАЛЛАХ

Рассмотрим линейную дислокацию в квантовом кристалле, расположенную в плоскости скольжения под некоторым углом к кристаллографическим направлениям¹⁷. Как известно, дислокационная линия не является в этом случае прямой. Она состоит из отдельных прямолинейных участков, расположенных вдоль направления, в котором энергия дислокации минимальна (это направление совпадает с одной из кристаллографических осей), и некоторого числа перегибов, в окрестности которых дислокация переходит из одной долины в другую (рис. 13). Каждый такой перегиб можно рассматривать как точечный дефект на дислокации. Поскольку вдоль кристаллографической оси кристалл периодичен, в квантовом кристалле такой точечный дефект превращается в квазичастицу, состояния которой классифицируются по значениям одномерного квазиимпульса. Пусть на дисло-

кации имеется один перегиб с определенным значением квазиимпульса. В этом случае перегиб с одинаковой вероятностью находится во всех точках дислокации, а это означает, что дислокация равномерно распределена между двумя соседними долинами. При наличии большого числа перегибов дислокация распределяется по большому числу долин. Таким образом, квантовомеханическая делокализация перегибов приводит к делокализации дислокации в плоскости скольжения.

Если ширина энергетической зоны перегибов мала, т. е. мала вероятность J его квантового подбарьерного перескока на один период решетки a в направлении дислокации, то для вычисления энергетического спектра можно применить известное приближение сильной связи. В результате получаем следующую зависимость энергии перегиба E от квазиимпульса p :

$$E(p) = E_0 + 2\hbar J \cos\left(\frac{pa}{\hbar}\right),$$

где E_0 — энергия локализованного перегиба в классическом пределе.

Пусть n — число перегибов, приходящихся на единицу длины дислокации. Если среднее расстояние между ними n^{-1} велико по сравнению с радиусом взаимодействия r_0 , то перегибы можно рассматривать как разреженный газ квазичастиц. Радиус взаимодействия определяется условием $U(r_0) \sim \hbar J$, где $U(r) \sim \beta/r$ — энергия взаимодействия двух перегибов, обратно пропорциональная ³³, первой степени расстояния r между ними, здесь β — некоторая постоянная, по порядку величины равная $\beta \sim \mu a^4$, где μ — модуль сдвига.

Важной экспериментально наблюдаемой характеристикой газа перегибов является их коэффициент диффузии. В области высоких температур он определяется столкновениями перегибов с фононами и колебаниями дислокации. При понижении температуры число фононов и колебаний убывает и коэффициент диффузии быстро возрастает, пока не достигнет предельного значения, определяемого взаимными столкновениями между перегибами. Для оценки этого предельного значения важно заметить следующее. В одномерном случае импульсы, приобретаемые квазичастицами в результате парного столкновения, однозначно определяются законами сохранения. Имеется два неизвестных импульса и два уравнения для их определения (закон сохранения энергии и импульса). Единственным является в этом случае тривиальное решение, соответствующее тому, что квазичастицы в результате столкновения меняются своими импульсами. Функция распределения квазичастиц по импульсам при этом вообще не изменяется. Другими словами, интеграл парных столкновений равен нулю, и все кинетические явления определяются тройными столкновениями. Соответствующая длина свободного пробега l_3 отличается от длины пробега $l_2 \sim n^{-1}$, характеризующей парные столкновения, большим множителем $(nr_0)^{-1}$. Коэффициент диффузии, таким образом, равен

$$D \sim \frac{\partial E}{\partial p} l_3 \sim \frac{\hbar J^2 a}{\beta n^2},$$

т. е. вместо обычного закона $D \propto n^{-1}$ в данном случае должна наблюдаться обратная пропорциональная зависимость диффузии от квадрата плотности квазичастиц.

Движение имеющихся на дислокации перегибов не может обеспечить непрерывное движение самой дислокации под действием внешней силы. Такое движение является результатом рождения пары противоположно

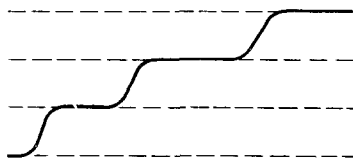


Рис. 13. Дислокация с перегибами.

направленных перегибов, в результате чего часть длины дислокации переходит в соседнюю долину. В обычных кристаллах этот процесс является термоактивационным и соответствует классическому надбарьерному переходу в соседнюю долину. Средняя скорость дислокации под действием заданной силы экспоненциально убывает с понижением температуры. Петуховым и Покровским³⁴ было показано, что в квантовых кристаллах рождение пары перегибов представляет собой квантовомеханический туннельный процесс, вероятность которого не зависит от температуры.

Наиболее, по-видимому, удобным методом, позволяющим наблюдать обсуждаемые особенности поведения дислокаций, является измерение внутреннего трения. Эти измерения дают возможность исследовать диффузию дефектов, не доступных наблюдению другими методами. В квантовых кристаллах здесь имеются дополнительные возможности³⁵. Проведенные недавно эксперименты по внутреннему трению твердого гелия³⁶ и ниобия, содержащего примеси водорода³⁷, продемонстрировали квантовый характер ответственных за внутреннее трение релаксационных процессов. Дальнейшее развитие этих экспериментов может привести к наблюдению особенностей динамики дислокаций в квантовых кристаллах.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящее время, таким образом, можно считать твердо установленным, что при низких температурах примесные атомы в квантовых кристаллах ведут себя как делокализованные квазичастицы (примесоны), свободно движущиеся через кристалл. Тем более это должно относиться к вакансиям (и вообще к любым точечным дефектам в кристалле), которые значительно подвижнее примесных атомов. Хотя для вакансий этот факт до сих пор и не получил прямого экспериментального подтверждения из-за существенных экспериментальных трудностей наблюдения вакансий, в нем вряд ли можно сомневаться. В связи с этим важно отметить, что в квантовых кристаллах имеется принципиальная возможность для существования так называемых нулевых вакансион¹, т. е. соответствующих вакансиям квазичастиц, которые, как нулевые колебания, существуют в кристалле при нуле температуры. Кристалл, содержащий нулевые вакансионы, должен представлять собой уникальный объект¹. Он не является, вообще говоря, твердым телом. В нем возможны два вида движения, один из которых обладает свойствами движения в твердом теле, другой — в жидкости. Интересно, что в последнее время появились указания^{38,39} на существование нулевых вакансион¹ в твердом гелии 3. Окончательное выяснение этого вопроса представляло бы существенный принципиальный интерес.

Институт физических проблем
АН СССР

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. А. Ф. Андреев, И. М. Лифшиц, ЖЭТФ 56, 2057 (1969).
2. R. A. Guyer, L. I. Zane, Phys. Rev. Lett. 24, 660 (1970).
3. M. G. Richards, J. Pope, A. Widom, ibid. 29, 708 (1972).
4. A. Widom, M. G. Richards, Phys. Rev. A6, 1196 (1972).
5. В. Н. Григорьев, Б. Н. Есельсон, В. А. Михеев, Ю. Е. Шулман, Письма ЖЭТФ 17, 25 (1973).
6. V. N. Grigoriev, B. N. Esel'son, V. A. Mikhееv, V. A. Slusarev, M. S. Strzheimchny, Yu. E. Shul'man, J. Low Temp. Phys. 13, 65 (1973).
7. В. Н. Григорьев, Б. Н. Есельсон, В. А. Михеев, ЖЭТФ 66, 321 (1974).

8. A. Landesman, J. M. Winter, in: Proc. of the 13th Conference on Low Temperature Physics (LT-13), v. 2, N.Y., Plenum Press, 1974, p. 73.
9. Д. И. Пушкарёв, ЖЭТФ 59, 1755 (1970); 68, 1471 (1975); Письма ЖЭТФ 19, 751 (1974).
10. Y. Yamashita, J. Phys. Soc. Japan 37, 1210 (1974).
11. Ю. К а г а н, Л. А. Максимов, ЖЭТФ 65, 622 (1973).
12. Yu. Kagan, M. I. Klinger, J. Phys. C7, 2791 (1974).
13. А. Ф. Андреев, А. Э. Мейерович, ЖЭТФ 67, 1559 (1974).
14. W. Huang, H. A. Goldberg, R. A. Guyer, Phys. Rev. B11, 3374 (1975).
15. Дж. Эшелби. Континуальная теория дислокаций, М., ИЛ, 1963, стр. 68.
16. R. A. Guyer, R. C. Richardson, L. I. Zane, Rev. Mod. Phys. 43, 532 (1971).
17. А. Ф. Андреев, ЖЭТФ 68, 2341 (1975).
18. J. H. Hetherington, Phys. Rev. 176, 231 (1968).
19. R. A. Guyer, J. Low Temp. Phys. 8, 427 (1972).
20. В. П. Минеев, ЖЭТФ 63, 1822 (1972).
21. N. Sullivan, G. Deville, A. Landesman, Phys. Rev. B11, 1858 (1975).
22. А. И. Шальников, ЖЭТФ 47, 1727 (1964).
23. К. О. Кешишев, Л. П. Межов-Деглин, А. И. Шальников, Письма ЖЭТФ 12, 234 (1970).
24. G. A. Sai-Halasz, A. J. Dahm, Phys. Rev. Lett. 28, 1244 (1972).
25. D. Marty, F. I. B. Williams, J. de Phys. 34, 989 (1973).
26. К. О. Кешишев, А. И. Шальников, Физ. низ. темп. (ФНТ) 1, 590 (1975).
27. A. J. Dahm, *ibid.*, стр. 593.
28. А. Э. Мейерович, ЖЭТФ 69, 1325 (1975).
29. M. G. Richards, J. H. Smith, P. S. Tofts, W. J. Mullin, Phys. Rev. Lett. 34 1545 (1975).
30. W. J. Mullin, R. A. Guyer, H. A. Goldberg, Preprint (в печати).
31. А. Абрагам, Ядерный магнетизм, М., ИЛ, 1963, стр. 204.
32. A. S. Greenberg, W. C. Thomlinson, R. C. Richardson, J. Low Temp. Phys. 8, 3 (1972).
33. Дж. Хирт, И. Лоте, Теория дислокаций, М., Атомиздат, 1972, § 8.5.
34. Б. В. Петухов, В. Л. Покровский, Письма ЖЭТФ 15, 63 (1972).
35. А. Э. Мейерович, ЖЭТФ 67, 744 (1974).
36. Э. Л. Андроникашвили, И. А. Гачечиладзе, В. А. Мелик-Шахназаров, ФНТ 1, 635 (1975).
37. Э. Л. Андроникашвили, В. А. Мелик-Шахназаров, И. А. Наскидашвили, *ibid.*, стр. 606.
38. D. S. Greywall, Phys. Rev. B11, 4717 (1975).
39. J. B. Sokoloff, A. Widom, Phys. Rev. Lett. 35, 673 (1975).

