Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. Л. Буишвили, Л. Ж. Захаров, А. И. Тугуши, Квантовая диффузия в нерегулярных кристаллах, содержащих туннельные двухуровневые системы, *ТМФ*, 1996, том 106, номер 3, 489–497

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1131>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.6.47.48

26 апреля 2023 г., 12:29:19

Л. Л. Буишвили, Л. Ж. Захаров, А. И. Тугуши¹⁾

КВАНТОВАЯ ДИФФУЗИЯ В НЕРЕГУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ, СОДЕРЖАЩИХ ТУННЕЛЬНЫЕ ДВУХУРОВНЕВЫЕ СИСТЕМЫ

Исследована задача квантовой диффузии примесных частиц, взаимодействующих с туннельными двухуровневыми системами (ДУС). Показано, что в температурной области $\omega_0 < T \lesssim 1\text{K}$ (где ω_0 – среднее значение сдвоя уровней энергии примесных в соседних ямах) и при концентрации ДУС $N_D \gtrsim 10^{27}\text{м}^{-3}$ коэффициент квантовой диффузии примесных определяется взаимодействием примесных с ДУС.

Посвящается светлой памяти Дмитрия Николаевича Зубарева

1. ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Исследованию явления квантовой диффузии было посвящено большое число работ [1–4]. На характер квантовой диффузии примесных частиц существенное влияние оказывают различного рода статические и динамические флуктуации, имеющиеся в реальном кристалле. Статические флуктуации, вызванные нерегулярностью кристалла, а также наличием примесей, стремятся привести к локализации частиц, которая может преодолеваться слабым туннелированием. Что касается динамических флуктуаций, они в определенных случаях приводят к локализации частиц, в других же случаях способствуют делокализации. В нерегулярных кристаллах собственно квантовая диффузия примесных может протекать лишь на фоне динамических (температурных) флуктуаций [3, 4].

Источником динамических флуктуаций обычно считают колебания решетки и учитывают взаимодействие примесных частиц с фононами. Эти вопросы детально изучались в работах [2–4]. Однако, как известно, при низких температурах $T \lesssim 1\text{K}$ фононный вклад в кинетику процессов сильно подавляется.

Источником динамических флуктуаций могут быть также туннельные элементарные возбуждения, плотность состояний которых является величиной постоянной (или почти постоянной) [5]. Значение плотности состояний этих возбуждений может достигать значительных величин порядка $\bar{P} \sim 10^{46}\text{Дж}^{-1}\text{м}^{-3}$, в то же время при низких температурах возбуждены в основном низкочастотные акустические фононы, плотность состояний которых значительно меньше, поэтому следует ожидать, что в образцах, содержащих туннельные двухуровневые системы (ДУС), динамика флуктуаций, влияющая на

¹⁾Сотрудник Тбилисского государственного университета.

кинетику квантовой диффузии, при низких температурах определяется связью примесонов с ДУС, а не с фононами.

В настоящей статье исследуется влияние туннельных ДУС на процессы квантовой диффузии.

В качестве примера кристаллов, содержащих туннельные ДУС, в которых наблюдаются процессы квантовой диффузии, можно привести водородосодержащие кристаллы ниобия и циркония.

Оператор взаимодействия примесных частиц с ДУС может быть получен по аналогии с тем, как это было проделано в работе [1], где выведено взаимодействие примесных частиц друг с другом. Действительно, ДУС является локальным образованием, имеющим два близлежащих состояния равновесия, переходы между которыми осуществляются благодаря туннельному эффекту [5], поэтому для получения оператора взаимодействия примесных частиц с ДУС достаточно представить расстояние между примесным атомом и ДУС в виде

$$r_{Sz} = r + lS^z,$$

где S^z – матрица Паули, l – расстояние между соседними равновесными положениями атома в ДУС, r – расстояние между центром ДУС и примесной частицей, которое учитывает возможность того, что атом может находиться либо в одной, либо в соседней потенциальной яме.

Следовательно, оператор взаимодействия примет вид

$$V_0 = U(\mathbf{n}) \frac{d^3}{(r + lS^z)^3},$$

где d – межатомное расстояние, $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}$ – единичный вектор, $U(\mathbf{n})$ – характерная энергия, зависящая от взаимной ориентации примесного атома и ДУС. Учитывая то обстоятельство, что $r \gg l$, и проводя разложение по малому параметру l/r , получим

$$V_0 = U(\mathbf{n}) \frac{d^3}{r^3} - 3U(\mathbf{n}) \frac{ld^3}{r^4} S^z. \quad (1)$$

Первый член в (1) статический, вызывающий смещение уровней энергии примесных частиц в соседних ямах на величину $\Delta E \sim 3U(\mathbf{n})d^4/r^4$ тем большую, чем ближе расположена примесная частица к ДУС. Второй член в (2) описывает динамическое взаимодействие примесной частицы и ДУС. В диагональном по состояниям ДУС представлении (которое осуществляется посредством унитарного оператора $W \sim \exp(i\varphi S^y)$, где $\tan \varphi = \frac{\Delta_0}{\Delta}$, Δ – асимметрия ямы, Δ_0 – туннельная энергия [5]) динамическая часть оператора взаимодействия примет вид

$$V_0 = -3U(\mathbf{n}) \frac{ld^3}{r^4} \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta_0^2}}{\varepsilon} S^z - 3U(\mathbf{n}) \frac{ld^3}{r^4} S^x,$$

здесь $\varepsilon = \sqrt{\Delta^2 + \Delta_0^2}$ – энергия расщепления ДУС.

Запишем гамильтониан, описывающий задачу квантовой диффузии примесных частиц в узельном представлении [6]:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + V_1 + V_2 + V_3, \\ H_0 &= \sum_{\mathbf{m}} E_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} + \sum_k \varepsilon_k S_k^z, \\ V_1 &= \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{m}} J_{\mathbf{nm}} \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}}, \\ V_2 &= \sum_{\mathbf{nm}i} A_{\mathbf{nm}i} \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} S_i^z + \sum_{\mathbf{nm}i} B_{\mathbf{nm}i} \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} S_i^x, \\ V_3 &= \sum_{ij\alpha\beta} C_{ij}^{\alpha\beta} S_i^{\alpha} S_j^{\beta}. \end{aligned}$$

В операторе H_0 первый член описывает гамильтониан примесонов, $E_{\mathbf{m}}$ – энергия примесона, $\alpha_{\mathbf{m}}^+$ и $\alpha_{\mathbf{m}}$ – операторы рождения и уничтожения примесной частицы в $\mathbf{m}$ -м узле, соответственно, второй член – гамильтониан системы ДУС, V_1 – туннельный оператор, $J_{\mathbf{nm}}$ – туннельная энергия. Оператор V_2 описывает взаимодействие примесонов с туннельными ДУС, причем те члены из V_2 , в которых $\mathbf{n} = \mathbf{m}$, соответствуют процессам внутриузельных флуктуаций состояний примесонов, а члены с $\mathbf{n} \neq \mathbf{m}$ дают вклад в некогерентную диффузию. Как известно из работ [2–4], коэффициент некогерентной диффузии меньше, чем коэффициент когерентной диффузии, поэтому в V_2 члены с $\mathbf{n} \neq \mathbf{m}$ рассматривать не будем. Оператор V_3 описывает взаимодействие между ДУС [7], которое при достаточно высокой концентрации ДУС определяет время корреляции псевдоспиновой корреляционной функции, которое в конечном счете формирует ширину уровней энергии примесонов;

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{nm}i} &= - \int \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{n}) A(\mathbf{r}) \frac{(\varepsilon_i^2 - \Delta_{0i}^2)^{1/2}}{\varepsilon_i} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{m}) d\mathbf{r}, \\ B_{\mathbf{nm}i} &= - \int \psi^*(\mathbf{r} - \mathbf{n}) A(\mathbf{r}) \frac{\Delta_{0i}}{\varepsilon_i} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{m}) d\mathbf{r}, \quad A(\mathbf{r}) = U(\mathbf{n}) \frac{ld^3}{r^4}, \end{aligned}$$

где $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{n})$ – волновая функция примесона в n -м узле.

2. ВЫВОД УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ

Для получения уравнений диффузии и локального коэффициента диффузии можно воспользоваться методом неравновесного статистического оператора Д. Н. Зубарева [8], который для ансамбля диффундирующих частиц имеет вид

$$\begin{aligned} \rho &= Q^{-1} \exp \left\{ -\beta \left(H_0 - \int \mu(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{-\infty}^0 e^{\xi t} dt \int \mu(\mathbf{x}) \dot{n}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \right) \right\}, \\ Q &= \text{Sp} \exp \left\{ -\beta \left(H_0 - \int \mu(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{-\infty}^0 e^{\xi t} dt \int \mu(\mathbf{x}) \dot{n}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \right) \right\}, \quad \xi \rightarrow 0, \end{aligned}$$

$n(\mathbf{x})$ – локальная плотность примесонов – определяется как

$$n(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{g}} \alpha_{\mathbf{g}}^+ \alpha_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{g}).$$

Уравнение движения для оператора $n(\mathbf{x})$ имеет вид

$$\dot{n}(\mathbf{x}) = \frac{1}{i} \sum_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{nm}} \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{n}) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{m}) \},$$

$\mu(\mathbf{x})$ – химический потенциал диффундирующих частиц, β – обратная температура решетки, $\dot{n}(\mathbf{x}, t)$ – оператор $\dot{n}(\mathbf{x})$ в представлении Гайзенберга.

Для усреднения операторного уравнения движения для $n(\mathbf{x})$ разложим неравновесный статистический оператора ρ по степеням $\int_{-\infty}^0 e^{\xi t} dt \int \mu(\mathbf{x}) \dot{n}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$ и, ограничиваясь линейным приближением по этой величине, получим

$$\rho \approx \left\{ 1 - \int_0^1 (e^{-R\tau} F e^{R\tau} - \langle e^{-R\tau} F e^{R\tau} \rangle_e) d\tau \right\} \rho_e,$$

где

$$R = \beta \left(H_0 - \int \mu(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right), \quad F = -\beta \int_{-\infty}^0 e^{\xi t} dt \int \mu(\mathbf{x}) \dot{n}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x},$$

$\rho_e = e^{-R} / \text{Sp } e^{-R}$ – локально равновесное распределение. Учитывая, что

$$e^{-R\tau} \alpha_{\mathbf{n}}^+ e^{R\tau} = \alpha_{\mathbf{n}}^+ e^{-\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu(\mathbf{n}))\tau}, \quad e^{-R\tau} \alpha_{\mathbf{n}} e^{R\tau} = \alpha_{\mathbf{n}} e^{\beta(E_{\mathbf{n}} - \mu(\mathbf{n}))\tau},$$

для среднего значения $\dot{n}(\mathbf{x})$ получим

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}(\mathbf{x}) \rangle &= -\beta \sum_{\mathbf{nm}} \sum_{\mathbf{ij}} \int_{-\infty}^0 e^{\xi t} dt \left\langle J_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{ij}} \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{i}}^+(t) \alpha_{\mathbf{j}}(t) \times \right. \\ &\quad \times \{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{n}) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{m}) \} \left\{ \int \mu(\mathbf{x}) \{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{i}) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{j}) \} d\mathbf{x} \right\} \Bigg\rangle_e \times \\ &\quad \times \int_0^1 \exp \left(\beta (E_{\mathbf{j}} - E_{\mathbf{i}} + \mu(\mathbf{i}) - \mu(\mathbf{j})) \right) \tau d\tau. \end{aligned}$$

После интегрирования по $d\mathbf{x}$ и $d\tau$ получим

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}(\mathbf{x}) \rangle &= - \sum_{\mathbf{nm}} \sum_{\mathbf{ij}} \int_{-\infty}^0 e^{\xi t} dt \left\langle J_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{ij}} \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{i}}^+(t) \alpha_{\mathbf{j}}(t) \times \right. \\ &\quad \times \{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{n}) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{m}) \} \{ \mu(\mathbf{i}) - \mu(\mathbf{j}) \} \Bigg\rangle_e \times \\ &\quad \times \frac{\exp \{ \beta (E_{\mathbf{j}} - E_{\mathbf{i}} - \mu(\mathbf{j}) + \mu(\mathbf{i})) \} - 1}{E_{\mathbf{j}} - E_{\mathbf{i}} + \mu(\mathbf{i}) - \mu(\mathbf{j})}, \end{aligned} \quad (2)$$

$\langle \dots \rangle_e$ означает усреднение по локально равновесному распределению. Принимая во внимание, что

$$\langle \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{i}}^+(t) \alpha_{\mathbf{j}}(t) \rangle_e = \langle \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+(t) \alpha_{\mathbf{n}}(t) \rangle_e \delta_{\mathbf{im}} \delta_{\mathbf{jn}},$$

из (2) будем иметь

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}(\mathbf{x}) \rangle = & - \int_{-\infty}^0 e^{\xi t} dt \sum_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{mn}} \langle \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+(t) \alpha_{\mathbf{n}}(t) \rangle_e \times \\ & \times \{ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{n}) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{m}) \} \{ \mu(\mathbf{m}) - \mu(\mathbf{n}) \} \frac{\exp(\beta \Omega_{\mathbf{nm}}) - 1}{\Omega_{\mathbf{nm}}}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\Omega_{\mathbf{nm}} = E_{\mathbf{n}} - E_{\mathbf{m}} - \mu(\mathbf{n}) + \mu(\mathbf{m})$. В уравнении (3) можно формально разложить δ -функцию в ряд Тейлора и ограничиться первым порядком разложения [8]:

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{n}) - \delta(\mathbf{x} - \mathbf{m}) = (\mathbf{n} - \mathbf{m}) \nabla_{\mathbf{m}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{m}). \quad (4)$$

Разложим также и локальные химические потенциалы диффундирующих частиц:

$$\mu(\mathbf{n}) - \mu(\mathbf{m}) = (\mathbf{n} - \mathbf{m}) \nabla_{\mathbf{m}} \mu(\mathbf{m}). \quad (5)$$

Подставляя (4) и (5) в (3), получим

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}(\mathbf{x}) \rangle = & \int_{-\infty}^0 e^{\xi t} dt \sum_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{mn}} \langle \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+(t) \alpha_{\mathbf{n}}(t) \rangle_e \times \\ & \times (\mathbf{n} - \mathbf{m}) \nabla_{\mathbf{m}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{m}) (\mathbf{n} - \mathbf{m}) \nabla_{\mathbf{m}} \mu(\mathbf{m}) \frac{\exp(\beta \Omega_{\mathbf{nm}}) - 1}{\Omega_{\mathbf{nm}}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Введем примесонную корреляционную функцию $f(t)$ следующим образом:

$$\langle \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+(t) \alpha_{\mathbf{n}}(t) \rangle_e = \langle \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+ \alpha_{\mathbf{n}} \rangle_e e^{i(E_{\mathbf{m}} - E_{\mathbf{n}})t} f(t).$$

Тогда (6) примет вид

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}(\mathbf{x}) \rangle = & \sum_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{mn}} \langle \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+ \alpha_{\mathbf{n}} \rangle_e \times \\ & \times (\mathbf{n} - \mathbf{m}) \nabla_{\mathbf{m}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{m}) (\mathbf{n} - \mathbf{m}) \nabla_{\mathbf{m}} \mu(\mathbf{m}) \frac{\exp(\beta \Omega_{\mathbf{nm}}) - 1}{\Omega_{\mathbf{nm}}} \times \\ & \times \int_{-\infty}^0 e^{\xi t} f(t) \exp\{i(E_{\mathbf{m}} - E_{\mathbf{n}})t\} dt. \end{aligned} \quad (7)$$

Ниже мы покажем, что $f(t)$ имеет лоренцев вид, поэтому

$$\int_{-\infty}^0 e^{\xi t} f(t) \exp\{i(E_{\mathbf{m}} - E_{\mathbf{n}})t\} dt = \frac{1}{2} \varphi(\omega_{\mathbf{mn}}), \quad (8)$$

здесь $\varphi(\omega_{\mathbf{mn}})$ — фурье-образ примесонной корреляционной функции, $\omega_{\mathbf{mn}} = E_{\mathbf{m}} - E_{\mathbf{n}}$. Подставляя (8) в (7), будем иметь

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}(\mathbf{x}) \rangle = & \sum_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{nm}} J_{\mathbf{mn}} \langle \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+ \alpha_{\mathbf{n}} \rangle_e \frac{1}{2} \varphi(\omega_{\mathbf{mn}}) \times \\ & \times (\mathbf{n} - \mathbf{m}) \nabla_{\mathbf{m}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{m}) (\mathbf{n} - \mathbf{m}) \nabla_{\mathbf{m}} \mu(\mathbf{m}) \frac{\exp(\beta \Omega_{\mathbf{nm}}) - 1}{\Omega_{\mathbf{nm}}}. \end{aligned} \quad (9)$$

Ограничиваясь туннелированием между соседними узлами решетки (для чего будем полагать $\mathbf{n} = \mathbf{m} + \mathbf{d}$) и предполагая, что $\beta\Omega_{\mathbf{nm}} < 1$, из (9) получим

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}(\mathbf{x}) \rangle &= \frac{1}{2} \beta \sum_{\mathbf{m}} J_{\mathbf{m}+\mathbf{d}, \mathbf{m}} J_{\mathbf{m}, \mathbf{m}+\mathbf{d}} \varphi(\omega_{\mathbf{m}+\mathbf{d}, \mathbf{m}}) \times \\ &\times \mathbf{d} \langle \alpha_{\mathbf{m}+\mathbf{d}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+ \alpha_{\mathbf{m}+\mathbf{d}} \rangle_e \cdot \nabla_{\mathbf{m}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{m}) \mathbf{d} \nabla_{\mathbf{m}} \mu(\mathbf{m}). \end{aligned}$$

Проведя суммирование по $\mathbf{m}$, будем иметь

$$\langle \dot{n}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{2} \beta Z \mathbf{d} \nabla J_{\mathbf{x}+\mathbf{d}, \mathbf{x}} J_{\mathbf{x}, \mathbf{x}+\mathbf{d}} \langle \alpha_{\mathbf{x}+\mathbf{d}}^+ \alpha_{\mathbf{x}} \alpha_{\mathbf{x}}^+ \alpha_{\mathbf{x}+\mathbf{d}} \rangle_e \cdot \varphi(\omega_{\mathbf{x}+\mathbf{d}, \mathbf{x}}) \mathbf{d} \nabla \mu(\mathbf{x}), \quad (10)$$

здесь Z – число ближайших соседей.

Для химического потенциала используем выражение $\mu = T \ln C$ [9] (C – относительная концентрация примесей), поэтому для локального химического потенциала имеем выражение

$$\mu(\mathbf{x}) = T \ln \frac{\langle n(\mathbf{x}) \rangle_e}{N}. \quad (11)$$

С учетом (11) уравнение (10) примет вид

$$\begin{aligned} \langle \dot{n}(\mathbf{x}) \rangle &= \frac{1}{2} Z \mathbf{d} \nabla J_{\mathbf{x}+\mathbf{d}, \mathbf{x}} J_{\mathbf{x}, \mathbf{x}+\mathbf{d}} \varphi(\omega_{\mathbf{x}+\mathbf{d}, \mathbf{x}}) \cdot \mathbf{d} \langle \alpha_{\mathbf{x}+\mathbf{d}}^+ \alpha_{\mathbf{x}} \alpha_{\mathbf{x}}^+ \alpha_{\mathbf{x}+\mathbf{d}} \rangle_e \frac{1}{\langle n(\mathbf{x}) \rangle_e} \nabla \langle n(\mathbf{x}) \rangle_e = \\ &= \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} D^{ij} \frac{\partial \langle n(\mathbf{x}) \rangle_e}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$D^{ij} = \frac{1}{2} Z d^i d^j J_{\mathbf{x}+\mathbf{d}, \mathbf{x}} J_{\mathbf{x}, \mathbf{x}+\mathbf{d}} \frac{\langle \alpha_{\mathbf{x}+\mathbf{d}}^+ \alpha_{\mathbf{x}} \alpha_{\mathbf{x}}^+ \alpha_{\mathbf{x}+\mathbf{d}} \rangle_e}{\langle n(\mathbf{x}) \rangle_e} \varphi(\omega_{\mathbf{x}+\mathbf{d}, \mathbf{x}}). \quad (13)$$

Введем среднее значение разности энергий примесей в соседних узлах решетки ω_0 и среднее значение энергии туннелирования между соседними узлами решетки J_0 . Учитывая, что

$$\langle \alpha_{\mathbf{x}+\mathbf{d}}^+ \alpha_{\mathbf{x}} \alpha_{\mathbf{x}}^+ \alpha_{\mathbf{x}+\mathbf{d}} \rangle_e = \langle n(\mathbf{x} + \mathbf{d}) \rangle_e (1 + \langle n(\mathbf{x}) \rangle_e),$$

проводя разложение по градиентам локальной концентрации примесей и принимая во внимание, что $\langle n(\mathbf{x}) \rangle_e < 1$ и $\mathbf{d} \frac{\partial \langle n(\mathbf{x}) \rangle_e}{\partial \mathbf{x}} < 1$, выражение (13) перепишем в виде

$$D^{ij} = \frac{1}{2} Z d^i d^j J_0^2 \varphi(\omega_0). \quad (14)$$

(Формулы написаны в системе единиц $\hbar = 1$, $k_B = 1$.) Здесь d^i – компоненты вектора $\mathbf{d}$. Коэффициент диффузии D^{ij} определяется туннельным гамильтонианом V_1 и той частью взаимодействия V_2 , в которой взяты члены с $\mathbf{n} = \mathbf{m}$. Пользуясь терминологией работ [2–4], можно назвать D^{ij} коэффициентом когерентной диффузии.

3. АНАЛИЗ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ

Время корреляции примесной корреляционной функции, определяемое первым членом взаимодействия V_2 с $\mathbf{n} = \mathbf{m}$, можно вычислить методом, используемым в стохастической теории магнитного резонанса (см. [10]).

Примесонная корреляционная функция определяется следующим образом:

$$\langle \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+(t) \alpha_{\mathbf{n}}(t) \rangle_e = \langle \alpha_{\mathbf{n}}^+ \alpha_{\mathbf{m}} \alpha_{\mathbf{m}}^+ \alpha_{\mathbf{n}} \rangle_e f(t) \exp\{i(E_{\mathbf{m}} - E_{\mathbf{n}})t\}.$$

Временная зависимость операторов определяется как

$$\alpha_{\mathbf{m}}^+(t) \alpha_{\mathbf{n}}(t) = \exp(iH't) \alpha_{\mathbf{m}}^+ \alpha_{\mathbf{n}} \exp(-iH't),$$

где

$$H' = \sum_{\mathbf{k}} \left(E_{\mathbf{k}} + \sum_i A_{\mathbf{k}\mathbf{k}i} S_i^z(t) \right) \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}.$$

Мы учитываем тот факт, что из-за взаимодействия между ДУС, а также между ДУС и фононами S_i^z зависит от времени.

Уравнение движения для $\alpha_{\mathbf{m}}^+(t) \alpha_{\mathbf{n}}(t)$ имеет вид

$$\frac{d}{dt} \alpha_{\mathbf{m}}^+(t) \alpha_{\mathbf{n}}(t) = \alpha_{\mathbf{m}}^+(t) \alpha_{\mathbf{n}}(t) \left\{ i(E_{\mathbf{m}} - E_{\mathbf{n}}) + i \sum_k (A_{\mathbf{m}\mathbf{m}k} - A_{\mathbf{n}\mathbf{n}k}) S_k^z(t) \right\}.$$

Решая это уравнение, для $f(t)$ получим

$$f(t) = \left\langle \exp \left\{ i \int_0^t (A_{\mathbf{m}\mathbf{m}k} - A_{\mathbf{n}\mathbf{n}k}) S_k^z(t') dt' \right\} \right\rangle_e.$$

Заменим $S_k^z(t)$ на соответствующую флуктуационную часть и учтем, что $\langle \delta S_k^z(t) \rangle_e = 0$. Определим величину

$$\sigma^2 = \left\langle \left(\sum_k (A_{\mathbf{m}\mathbf{m}k} - A_{\mathbf{n}\mathbf{n}k}) \delta S_k^z \right)^2 \right\rangle_e = \frac{\overline{P}V}{2} (A_{\mathbf{m}\mathbf{m}} - A_{\mathbf{n}\mathbf{n}})^2 T \ln \frac{\varepsilon_{\max}}{l\Delta_0}.$$

Поскольку мы ограничиваемся туннелированием между соседними узлами, то для σ^2 получим

$$\sigma^2 = \frac{\overline{P}V}{2} (A_{\mathbf{m}\mathbf{m}} - A_{\mathbf{m}+\mathbf{d},\mathbf{m}+\mathbf{d}})^2 T \ln \frac{\varepsilon_{\max}}{l\Delta_0},$$

здесь V — объем, приходящийся на одну ДУС, T — температура решетки, $\varepsilon_{\max}$ — максимальная энергия ДУС, Δ_0 — минимальная энергия туннелирования между двумя равновесными положениями в ДУС.

В условиях $\sigma^{-1} > \tau_D$ [10] (где τ_D — время корреляции корреляционной функции $\langle \delta S_k^z \delta S_k^z(t) \rangle_e$) $f(t)$ имеет лоренцев вид, а время корреляции примесонной корреляционной функции выражается по формуле

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(1)}} = \sigma^2 \tau_D.$$

τ_D определяется взаимодействием ДУС друг с другом и имеет вид [11]

$$\frac{1}{\tau_D} = \frac{\overline{P}N_D \gamma^4 B^{-1/2}}{1, 8\hbar(64\pi\rho v^2)^2},$$

где ρ – плотность образца, v – средняя скорость звука, N_D – концентрация ДУС, B – численный коэффициент порядка 10^{-2} . Соотношение $\tau_D < \sigma^{-1}$ при температурах $T \sim 1\text{К}$ выполняется в том случае, когда концентрация ДУС удовлетворяет неравенству $N_D > 10^{24}\text{м}^{-3}$ (считаем, что $U \sim 0,1\text{эВ}$ [12]).

С понижением температуры все большую роль в определении времени корреляции корреляционной функции играет второй член из V_2 с $\mathbf{n} = \mathbf{m}$. С помощью теории возмущений легко получить, что время корреляции, даваемое вторым членом из V_2 , выражается по формуле

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(2)}} = \frac{1}{4} \bar{P} V \pi (A_{\mathbf{m}\mathbf{m}} - A_{\mathbf{m}+\mathbf{d},\mathbf{m}+\mathbf{d}})^2.$$

Сравнение $\tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(1)}$ с $\tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(2)}$ показывает, что при концентрации ДУС $N_D \sim 10^{27}\text{м}^{-3}$ и при $T > 10^{-2}\text{К}$ имеем $\tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(1)} < \tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(2)}$. Противоположный предельный случай находится вне области применимости выведенного уравнения диффузии ($T > \omega_0 \sim 0,1\text{К}$).

В вышеприведенных формулах мы не учитывали фононного вклада в ширину уровней, полагая его малым. При наличии фононов очевидно, что время корреляции $\tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(1)}$ следует заменить на τ_{eff} :

$$\frac{1}{\tau_{\text{eff}}} = \frac{1}{\tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(1)}} + \frac{1}{\tau_{\text{ph}}},$$

τ_{ph} определяется взаимодействием примесонов с фононами. Величина τ_{ph} была рассчитана в работе [3], где исследовался вклад одно- и двухфононных процессов. Сравнение $\tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(1)}$ с вкладом однофононных процессов показывает, что при $N_D \gtrsim 10^{27}\text{м}^{-3}$ и $U \sim 0,1\text{эВ}$ связь примесонов с ДУС является определяющей.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, окончательно для коэффициента диффузии получим выражение

$$D^{ij} = \frac{1}{2} Z d^i d^j J_0^2 \frac{1}{\omega_0^2 \tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(1)}} = \frac{1}{2} Z d^i d^j J_0^2 \frac{\sigma^2 \tau_D}{\omega_0}, \quad (15)$$

здесь учтено, что $\omega_0 \tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(1)} > 1$.

Заметим, что если в формулах (14) и (15) время корреляции $\tau_{\mathbf{m},\mathbf{m}+\mathbf{d}}^{(1)}$ заменить на τ_{ph} , то полученные результаты будут совпадать с результатами работ [2–4].

В заключение отметим, что взаимодействие примесонов с ДУС не меняет линейного характера температурной зависимости коэффициента квантовой диффузии при низких температурах. Наряду с этим переход к сильной температурной зависимости ($D \sim T^9$), обусловленной вкладом двухфононных процессов, осуществляется при более высоких температурах ($T \sim 10\text{К}$), чем это происходит в отсутствие ДУС.

Настоящая работа была поддержана Международным научным фондом (грант № МХ К000).

Список литературы

- [1] Андреев А. Ф. // УФН. 1976. Т. 118. Вып. 2. С. 251–271.

- [2] Каган Ю., Максимов Л. А. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 622–632.
- [3] Каган Ю., Максимов Л. А. // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. Вып. 2. С. 792.
- [4] Каган Ю., Максимов Л. А. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. С. 1363.
- [5] Блэк Дж. // Металлические стекла / Eds. Г. Гюнтеродт, Г. Бек. М.: Мир, 1983.
- [6] Давыдов А. С. Теория твердого тела. М.: Наука, 1976.
- [7] Смоляков Б. П., Хаймович Е. П. // УФН. 1982. Т. 136. Вып. 2. С. 317.
- [8] Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.
- [9] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1975.
- [10] Кубо Р. // Термодинамика необратимых процессов / Ред. Д. Н. Зубарев. М.: ИЛ, 1962.
- [11] Szeftel J., Alloul H. // J. Non-Cryst. Solids. 1978. V. 29. P. 253–281.
- [12] Qi Zh., Volkl J., Lasser R., Wenzl H. // J. Phys. F. 1983. V. 13. P. 2053–2062.

Институт физики
АН Грузии

Поступила в редакцию
24.IV.1995 г.

L. L. Buishvili, L. J. Zakharov, A. I. Tugushi
QUANTUM DIFFUSION IN IRREGULAR CRYSTALS
HAVING TUNNEL TWO-LEVEL SYSTEMS

The quantum diffusion of admixture particles interacting with tunnel two-level systems is studied. It is shown that in the temperature region $\omega_0 < T \lesssim 1\text{K}$, where ω_0 is an average value of the energy disturbance of admixture particles in the neighbouring pits, and under the concentration $N_D \gtrsim 10^{27}\text{m}^{-3}$ of two-level systems the quantum diffusion coefficient of admixture particles is determined by their interaction with two-level systems.