

©1993

РЕЛАКСАЦИЯ СПИНА МЮОНА В КРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ

А.А.Берзин, А.И.Морозов, А.С.Сигов

Проведено численное моделирование процесса релаксации спина положительного мюона в кристалле со случайно распределенными примесями. Исследована зависимость скорости релаксации от температуры и концентрации примесей и дано ее теоретическое обоснование.

Известно, что метод мюонной спиновой релаксации (μSR) позволяет получить уникальную информацию о величинах, распределении и характере временной зависимости локальных магнитных полей в кристалле. Вместе с тем скорость релаксации спина мюона весьма существенным образом зависит от характера движения мюона в кристалле. В немагнитном металле релаксация спина положительного мюона обусловлена действием случайного магнитного поля, созданного магнитными моментами ядер матрицы. При этом магнитные поля в соседних междоузлиях, которые может занимать мюон, практически нескоррелированы.

В идеально чистом металле мюон перемещался бы по кристаллу столь быстро, что вследствие усреднения случайных локальных магнитных полей не происходило бы заметной релаксации спина мюона за время эксперимента (10 мкс). Поэтому наблюдаемая в эксперименте релаксация спина мюона обусловлена неидеальностью кристалла, т.е. захватом мюона ловушками [1].

В работе [2] показано, что роль ловушки может играть любой точечный дефект. Действительно, дальнедействующая часть взаимодействия между мюоном и дефектом кристаллической решетки металла складывается из упругого взаимодействия и взаимодействия через фриделевские осцилляции электронной плотности. Знакопеременный характер обоих типов взаимодействия приводит к возникновению большого числа связанных состояний мюона с дефектом в междоузлиях кристаллической решетки. Ловушкой можно считать междоузлие с энергией связи между мюоном и примесью $W_i > T$ (T — температура).

Поскольку аналитическое описание процесса релаксации в системе, содержащей большое число типов ловушек разной глубины, представляется затруднительным, нами проведено численное моделирование этого процесса.

В качестве объекта исследования выбран кристалл с ГПК решеткой — алюминий. Мюон может занимать в нем тетраэдрические междуузлия [3], которые образуют простую кубическую решетку с периодом d (постоянная кубической решетки алюминия — $2d$).

Захват мюона осуществляется примесями замещения, взаимодействие которых с мюоном можно описать потенциалом

$$U(\mathbf{r}) = \left\{ A \left[3/5 - \left(\frac{X}{r} \right)^4 - \left(\frac{Y}{r} \right)^4 - \left(\frac{Z}{r} \right)^4 \right] + B \cos(2k_F r) \right\} d^3/r^3, \quad (1)$$

где первое слагаемое в фигурных скобках соответствует упругому взаимодействию, а второе — взаимодействию через фриделевские осцилляции электронной плотности; $\mathbf{r} = (X, Y, Z)$ — радиус-вектор, соединяющий примесь с мюоном; величина $A \sim B \sim 10^2 \div 10^3$ К.

Для моделирования выбиралась простая кубическая решетка междуузлий $33 \times 33 \times 33$. В нее случайным образом вводилось 10, 30 и 100 дефектов, что соответствует их концентрации $x = 5.57 \cdot 10^{-4}$, $1.67 \cdot 10^{-3}$, $5.57 \cdot 10^{-3}$ в расчете на один атом матрицы металла. Мюон мог занимать дискретные положения в узлах этой решетки и переходить из междуузлия i в соседнее междуузлие j с вероятностью, равной [2]

$$W_{ij} = \frac{2\gamma\epsilon_0^2\xi_{ij}}{\xi_{ij}^2 + \gamma^2 T^2} \frac{1}{\exp(\xi_{ij}/T) - 1}. \quad (2)$$

Здесь ϵ_0 — туннельный матричный элемент перехода мюона между соседними междуузлиями, а перекося уровней энергии ξ_{ij} равен

$$\xi_{ij} = \sum_m [U(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_m) - U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_m)]. \quad (3)$$

Суммирование происходит по всем дефектам решетки, а константа γ характеризует взаимодействие мюона с электронами проводимости и равна [2]

$$\gamma = 4\pi N^2(0)V_0^2[1 - \cos(k_F d)], \quad (4)$$

$N(0)$ — плотность электронных состояний на поверхности Ферми, V_0 — потенциал взаимодействия мюона с электронами проводимости.

Формула (2) хорошо аппроксимирует вероятность перехода в широком диапазоне температур и энергий ξ_{ij} . В нашем случае направление туннелирования каждый раз выбиралось случайным образом, что при зонном движении мюона, когда $\epsilon_0 > \xi_{ij}$, γT и имеется преимущественное направление перемещения, могло привести к некоторой переоценке времени попадания мюона в ловушку и небольшому занижению скорости релаксации его спина.

Примесь замещения расположена в центре куба, образованного ближайшими к ней тетраэдрическими междуузлиями. Поэтому энергии мюона в этих междуузлиях в отсутствие влияния других дефектов кристаллической решетки оказываются одинаковыми. При выборе фермиевского

импульса электронов равным $k_F = 2.0/d$ этим ближайшим междоузлиям отвечают самые глубокие минимумы энергии мюона. Попад в один из этих минимумов, мюон в исследуемом диапазоне температур практически не имеет возможности покинуть ловушку (вероятность высвобождения пренебрежимо мала), но может туннелировать между этими восемью междоузлиями. При этом происходит эффективное усреднение случайного поля, действующего на мюон. В случае полной эквивалентности этих минимумов энергии скорость релаксации спина мюона в ловушке падает в $8^{1/2}$ раз [4].

Влияние других примесей вызывает снятие вырождения минимумов энергий и увеличение скорости релаксации. Поскольку потенциал взаимодействия мюона с дефектом (1) спадает с расстоянием как r^{-3} , взаимодействие с другими примесями приводит к случайному сбою уровня энергии, который описывается лоренцевским распределением с характерной шириной $\delta = x(|A| + |B|)$ [5].

Наличие нескольких эквивалентных минимумов в ловушке не является спецификой алюминия. Так, эксперименты в случае слабо разбавленных гидридов ниобия показали, что при захвате водорода примесями кислорода, азота или углерода образуется двухуровневая система [6,7]. Поскольку положительный мюон является как бы более легким изотопом водорода, то аналогичная ситуация должна возникнуть и при захвате этими дефектами мюона в ниобии.

Поскольку поля, действующие на мюон в различных междоузлиях, нескоррелированы, то за время пребывания в данном междоузлии поляризация мюона $P(t)$ уменьшается в случае эксперимента в поперечном магнитном поле по закону

$$P(t_i) = P(t_{i-1}) \exp[-\sigma^2(t_i - t_{i-1})^2], \quad (5)$$

где $P(0) = 1$, t_{i-1} и t_i — моменты попадания и ухода из междоузлия i , а величина σ равна

$$\sigma^2 = 0.5\gamma_\mu^2 \langle \delta H^2 \rangle, \quad (6)$$

$\langle \delta H^2 \rangle$ — средний квадрат магнитного поля, действующего на мюон; $\gamma_\mu = 8.85 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1} \text{ Тл}^{-1}$ — гиромангнитное отношение для мюона.

Скорость релаксации мюона в глубокой восьмиминимумной ловушке σ_{tr} вблизи примеси i замещения определялась по формуле

$$\sigma_{\text{tr},i}^2 = \sigma^2 \frac{\sum_{\alpha=1}^8 \exp^2(W_{i\alpha}/T)}{\left[\sum_{\alpha=1}^8 \exp(W_{i\alpha}/T) \right]^2}, \quad (7)$$

где $W_{i\alpha}$ — энергия связи мюона в одном из восьми минимумов. При равенстве всех $W_{i\alpha}$ имеем $\sigma_{\text{tr},i}^2 = \sigma^2/8$. Выражение (7) применимо, если $\xi_{\alpha\beta}, T \geq \varepsilon_0$. Мы пренебрегаем изменением величины σ вследствие замещения примесным атомом одного из окружающих атомов матрицы, создающих магнитное поле на мюоне.

При каждом моделировании процесса релаксации спина мюона создавалась новая конфигурация случайно расположенных примесей. Положение мюона в момент времени $t = 0$ выбиралось в центре куба междуузлий $33 \times 33 \times 33$. Далее случайным образом определялось направление прыжка и методом Монте-Карло разыгрывался скачок в выбранном направлении. Шаг t_0 по времени задавался так, чтобы выполнялось условие $t_0 w_{\max} \ll 1$, где w_{\max} — максимальная из шести вероятностей перехода за единицу времени в ближайшие междуузлия.

Если переход не происходил, то попытка повторялась. В случае прыжка находилось новое значение поляризации мюона и начинался розыгрыш нового скачка. Если мюон в процессе своего движения по кристаллу доходил до границы куба междуузлий, то его возвращали в произвольное положение внутри куба. При этом исключалось случайное попадание в ловушку. Итерационный процесс продолжался либо вплоть до попадания мюона в глубокую ловушку и быстрой его деполяризации вследствие этого, либо вплоть до истечения времени $t_{\max} = 10/\sigma$.

Найденная зависимость $P(t)$ запоминалась в виде массива $P(0.1i/\sigma)$, $i = 1 \div 100$. По мере накопления статистики данные массивов усреднялись и находилась среднестатистическая зависимость $P(t)$, которая затем аппроксимировалась как лоренцевской функцией $\exp(-\lambda t)$, так и функцией Гаусса $\exp(-\lambda^2 t^2)$ с определением отклонения от нее по методу наименьших квадратов. Затем выбиралось значение λ , соответствующее функции с наименьшим отклонением.

2. Обсуждение результатов моделирования

Моделирование проводилось для следующего набора констант: $A = B = 2 \cdot 10^8 \hbar \sigma$, $\varepsilon_0 = 5 \cdot 10^5 \hbar \sigma$, $\gamma = 0.5$. Для $\sigma \sim 10^5 \text{с}^{-1}$ это дает $\varepsilon_0 \sim 1 \text{К}$, $A \sim B \sim 10^2 \text{К}$. Величины W_i , δ , T и ξ_{ij} , измеренные в единицах $\hbar \sigma$, в дальнейшей обозначаются соответственно W_i^* , δ^* , T^* и ξ_{ij}^* .

Температурная зависимость $\lambda(T^*)$ для трех различных концентраций дефектов изображена на рисунке. Кривые 1, 2 качественно совпадают с экспериментальной зависимостью $\lambda(T)$ в Al с примесями различных металлов [3,8].

Если бы мюон практически мгновенно попадал в ловушку с восемью эквивалентными минимумами ($W_i^* \sim 2 \cdot 10^8$), то величина $\lambda^* = \lambda/\sigma$ равнялась бы $\lambda_0^* = 0.3536$. Этот уровень изображен на рисунке горизонтальной прямой. Для $T^* = 10^7$ величина $\delta \leq T$ ($\delta^* = 2.2 \cdot 10^5, 6.7 \cdot 10^5, 2.2 \cdot 10^6$ для концентраций $x = 5.57 \cdot 10^{-4}, 1.67 \cdot 10^{-3}, 5.57 \cdot 10^{-3}$). Это неравенство особенно хорошо выполняется для двух первых значений концентрации, и перекосом минимумов в ловушке можно пренебречь. Поэтому отличие λ^* от λ_0^* объясняется тем, что для попадания в ловушку мюону требуется время τ , сравнимое с σ^{-1} . Как показано в работе [9], в этом случае

$$\lambda = [\tau + \sigma_{\text{tr}}^{-1}]^{-1}. \quad (8)$$

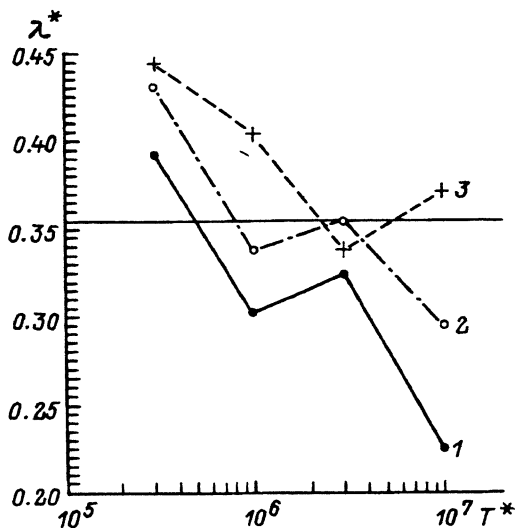
При $T^* = 10^7$ на всем пути мюона до ловушки $\xi^* \leq T$, так что, согласно (2), вероятность прыжка из междуузлия в междуузлие $W_{ij} \sim T^{-1}$. Поэтому с понижением T^* до $3 \cdot 10^6$ происходит уменьшение времени прыжка, что ведет к уменьшению τ и росту скорости релаксации λ .

Однако дальнейшее понижение температуры до $T^* = 3 \cdot 10^5$ связано с вкладом менее глубоких минимумов ($W_i \sim 10^7$), которые при такой температуре начинают играть роль ловушек. Об этом свидетельствует изменение характера временной зависимости $P(t)$ от гауссовской в области высоких T^* , когда релаксация обусловлена попаданием в глубокую ловушку, к лоренцевской при низких T^* , где релаксация связана с менее глубокими ловушками, вероятность высвобождения из которых отлична от нуля. Поэтому за время релаксации мюон успевает побывать в большом числе ловушек, что и приводит к лоренцевской зависимости $P(t)$.

Кроме того, при концентрациях, отвечающих кривым 2, 3 (см. рисунок), имеет место неравенство $\delta^* > T^*$, что вызывает возрастание величины σ_{tr} для глубокой ловушки. Этот эффект, однако, не является основным, поскольку вероятность попадания в глубокую ловушку при низкой температуре мала.

Для большой концентрации дефектов время попадания в ловушку $\tau \ll \sigma_{tr}$, поэтому при высоких T^* величина λ^* близка к значению λ_0^0 . Дальнейший быстрый рост λ^* с понижением T^* связан как с вкладом новых, достаточно глубоких ловушек, появляющихся вследствие влияния нескольких дефектов, так и с быстрым ростом σ_{tr} в глубокой ловушке, который в данном случае большой концентрации примесей наиболее сильно выражен. (Для $\delta \gg \varepsilon_0$ в области температур $T \ll \delta$ величина σ_{tr} практически равна σ).

Итак, скорость релаксации спина мюона, обусловленной попаданием мюона в ловушку, во многом определяется структурой ловушки: коли-



Температурная зависимость скорости релаксации спина мюона в ГЦК кристалле с примесями замещения.
 x : 1 — $5.57 \cdot 10^{-4}$, 2 — $1.67 \cdot 10^{-3}$, 3 — $5.57 \cdot 10^{-3}$.

чеством эквивалентных (для уединенной ловушки) минимумов энергии, между которыми может туннелировать мюон.

Перекося эквивалентных уровней энергии, вызванный действием других дефектов кристаллической решетки, растет пропорционально их концентрации и может вызвать существенное возрастание скорости релаксации мюона при понижении температуры.

В случае, когда время попадания мюона в ловушку сравнимо с временем релаксации спина в ней, температурная зависимость скорости релаксации спина определяется также температурной зависимостью вероятности перехода мюона из междоузлия в междоузлие.

Наличие потенциального барьера перед глубокой ловушкой приводит к уменьшению вероятности попадания мюона в нее с понижением температуры и как бы «выключению» этого типа ловушек. В таком случае релаксация спина обусловлена наличием ряда менее глубоких минимумов энергии. Поскольку они могут стать эффективными ловушками при температуре T_1 , более низкой, чем температура «выключения» глубоких ловушек T_2 , то на зависимости скорости релаксации от температуры может иметь место провал в области $T_1 < T < T_2$.

Список литературы

- [1] Morosov A.I., Sigov A.S. // J. Phys. Cond. Matter. 1990. V. 2. N 3. P. 505–512.
- [2] Морозов А.И., Сигов А.С. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 1. С. 170–177.
- [3] Kehr K.W., Richter D., Welter J.M. et al. // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. N 2. P. 567–589.
- [4] Каган Ю., Прокофьев Н.В. // ЖЭТФ. 1986. Т. 90. № 6. С. 2176–2195.
- [5] Морозов А.И., Сигов А.С. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 6. С. 1772–1776.
- [6] Morr H., Muller A., Weiss G. et al. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. N 19. P. 2084–2087.
- [7] Neumaier K., Steinbinder D., Wipf H. et al. // Z. Phys. B. 1989. V. 76. N 3. P. 359–365.
- [8] Hartmann O., Karlsson E., Wackelgard E. et al. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 9. P. 4425–4440.
- [9] Берзин А.А., Морозов А.И., Сигов А.С. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 4. С. 1161–1165.

Московский институт радиотехники,
электроники и автоматики

Поступило в Редакцию
10 июня 1993 г.