

ДВИЖЕНИЕ ЗАРЯДОВ И ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРА ВАКАНСИЙ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ГЕЛИИ

A. Ф. Андреев*, А. Д. Савищев

*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
117334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 9 октября 2000 г.

Особенности Ван Хова в спектре вакансий в кристаллах ^4He проявляются как особенности полевой зависимости скорости дрейфа зарядов. В ^3He полевая зависимость скорости дрейфа определяется спектром вакансий в полностью спин-поляризованном состоянии кристалла.

PACS: 67.80.Mg

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовая природа кристаллов ^4He обуславливает возможность весьма общего теоретического описания движения зарядов в этих кристаллах [1, 2], не использующего каких-либо модельных представлений о структуре зарядовых комплексов. Описание основано по существу на единственном предположении о вакансационном механизме движения зарядов — предположении, имеющем убедительное экспериментальное подтверждение [3]. Благодаря квантовой делокализации вакансий в кристаллах ^4He и их превращению в свободно движущиеся квазичастицы вакансационный механизм движения заключается в последовательных актах неупругого рассеяния вакансационных квазичастиц на зарядовом комплексе, сопровождающихся смещением комплекса из одного локализованного состояния в другие, кристаллографически ему эквивалентные. Применение квантовой теории рассеяния позволяет выразить дрейфовую скорость зарядов через общие симметрийные характеристики комплексов, а также через энергетический спектр вакансий. Экспериментальное исследование движения зарядов представляет собой при этом, с одной стороны, своеобразную спектроскопию вакансационных квазичастиц, а с другой стороны, оно позволяет сделать вполне определенные заключения о структуре и, что особенно интересно, о симметрии зарядовых комплексов.

Проведенные в последние годы [4, 5] прямые из-

мерения анизотропии дрейфовой скорости зарядов в ^4He подтверждают квантовый подход [1, 2] к проблеме. Например, обнаруженную в экспериментах [4] большую анизотропию дрейфовой скорости трудно объяснить в рамках макроскопического описания движения зарядов [6] как вакансационного диффузно-вязкого течения кристалла [7, 8], но она, как мы увидим ниже, находит простое и естественное толкование с позиций квантового подхода. Для количественной интерпретации экспериментальных наблюдений [4] результаты предыдущей работы авторов [2] следует дополнить рядом новых положений. Их формулировка и сравнение результатов с экспериментом [4] — основная цель настоящей работы. Предварительные результаты были ранее опубликованы в [5].

В последнем разделе работы обсуждается своеобразная картина движения зарядов в кристаллах ^3He . Еще в ранних работах Кешишева [9] было показано, что кубическая полевая зависимость скорости вида $(E + E_0)^3$ (E_0 зависит от температуры и давления) справедлива как в ^4He (при не слишком низких давлениях, если речь идет о положительных зарядах), так и в ^3He . Наше объяснение [2] этой зависимости основывалось на существовании квазипульса вакансий как хорошего квантового числа, что справедливо для ^4He , но не имеет места в ^3He из-за его неупорядоченности по значениям ядерных спинов атомов. Ниже будет показано, что в широкой области значений электрического поля наблюдаемая скорость дрейфа зарядов в ^3He совпадает со ско-

*E-mail: andreev@kapitza.ras.ru

ростью дрейфа в полностью спин-поляризованном (спины ядер направлены в одну сторону) состоянии кристалла, в котором вакансии ведут себя аналогично вакансиям в ${}^4\text{He}$. Причиной этого любопытного факта является образование вокруг вакансий в кристаллах ${}^3\text{He}$ макроскопических ферромагнитных поляронов (см. [10]).

2. ОСОБЕННОСТИ ВАН ХОВА

Следуя предыдущим работам [1, 2], рассмотрим простейший случай, когда основную роль играют бесфононные одновакансационные процессы, в которых зарядовый комплекс смещается на вектор \mathbf{u} из своего первоначального локализованного состояния в результате неупругого рассеяния вакансии. Вероятность W смещения заряда в единицу времени равна

$$W = \int w(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{u}) n(\varepsilon) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3}, \quad (1)$$

где \mathbf{k} , \mathbf{k}' — значения квазимпульса вакансии соответственно в начальном и конечном состояниях, $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ — энергетический спектр вакансий, $n(\varepsilon) = \exp(-\varepsilon/T)$ — равновесная функция распределения вакансий. Дифференциальная вероятность $w(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{u})$ выражается обычной формулой через амплитуду $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{u})$ процесса:

$$w(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{u}) = 2\pi |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{u})|^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon - e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u}), \quad (2)$$

где $e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u}$ — изменение энергии зарядового комплекса с зарядом e при смещении на вектор \mathbf{u} в электрическом поле \mathbf{E} , $\varepsilon' = \varepsilon(\mathbf{k}')$.

При низких температурах $T \ll \Delta$ и $T \ll e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u}$, где $\Delta = \max(\varepsilon' - \varepsilon)$ — ширина энергетической зоны вакансий, основную роль играют вакансии с $\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_0$, где \mathbf{k}_0 — значение квазимпульса, соответствующее дну зоны $\varepsilon_0 \equiv \varepsilon(\mathbf{k}_0) = \min \varepsilon(\mathbf{k})$, и переходы с $e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u} > 0$. Вероятности обратных процессов, сопровождающихся уменьшением энергии вакансии ($\varepsilon' < \varepsilon$), экспоненциально малы. В выражении для w в формулах (1) и (2) можно положить $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ и $\varepsilon = \varepsilon_0$. В результате имеем

$$W = \frac{N}{(2\pi)^2} \int \frac{dS}{v} |f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}; \mathbf{u})|^2, \quad (3)$$

где $N = \int n(\varepsilon) d^3 k / (2\pi)^3 \propto \exp(-\varepsilon_0/T)$ — равновесное число вакансий в единице объема кристалла. Интегрирование в формуле (3) проводится по изоэнергетической поверхности в \mathbf{k} -пространстве (для

краткости импульс \mathbf{k}' конечных состояний обозначен здесь просто \mathbf{k}) с энергией

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u}, \quad (4)$$

dS — элемент поверхности, $v(\mathbf{k}) = |\partial\varepsilon/\partial\mathbf{k}|$ — абсолютная величина скорости вакансий.

Как функция абсолютной величины E электрического поля вероятность $W = W(E)$ имеет особенности Ван Хова (см. [11]) при значениях $E = E_s$, соответствующих обращению в нуль скорости вакансий в конечном состоянии $\mathbf{v}(\mathbf{k}') = \partial\varepsilon/\partial\mathbf{k}'$. Последнее имеет место при определенных значениях $\mathbf{k}' = \mathbf{k}_s$, соответствующих экстремумам (т. е. локальным минимумам, локальным максимумам, либо седловым точкам) энергетического спектра $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k}')$. Для каждого такого \mathbf{k}_s при $\varepsilon = \varepsilon_s \equiv \varepsilon(\mathbf{k}_s)$ имеет корневую особенность Ван Хова плотность состояний вакансий $g(\varepsilon) = \int dS/v(\mathbf{k})$, где интегрирование проводится по изоэнергетической поверхности $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ (см. [11]). Аналогичные корневые особенности имеют определяемая формулой (3) функция $W(E)$ при $E = E_s$, где величина E_s связана с ε_s соотношением

$$\varepsilon_s = \varepsilon_0 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u} \cos \theta. \quad (5)$$

Здесь θ — угол между направлениями \mathbf{u} и \mathbf{E} (выше отмечалось, что $\cos \theta > 0$). Особая часть $W_s(E)$ функции $W(E)$ при $E \approx E_s$ в силу (3) связана с особой частью $g_s(\varepsilon)$ плотности состояний $g(\varepsilon)$ при $\varepsilon \approx \varepsilon_s$ соотношением

$$W_s(E) = \frac{N}{(2\pi)^2} |f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_s; \mathbf{u})|^2 g_s(\varepsilon), \quad (6)$$

а E и ε — формулой (4).

Таким образом, характер особенностей функций $W(E)$ и $g(\varepsilon)$ по существу одинаков. Поскольку дрейфовая скорость \mathbf{V} зарядов равна (в простейшем случае) $\mathbf{u}W$, такого же типа особенности при $E = E_s$ должна иметь и полевая зависимость $V = V(E)$ дрейфовой скорости. Имеется всего четыре типа особенностей Ван Хова для дрейфовой скорости, которые в точности соответствуют известным (см. [11]) четырем типам особенностей плотности состояний:

1. Функция $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ имеет в точке $\mathbf{k} = \mathbf{k}_s$ локальный минимум. В этом случае

$$V(E) = V_R(E) + \\ + \begin{cases} 0 & \text{при } E < E_s, \\ \text{const} \cdot (E - E_s)^{1/2} & \text{при } E > E_s, \end{cases}$$

где $V_R(E)$ — некоторая функция, регулярная при $E = E_s$, const — положительная постоянная.

2. Если $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ имеет в точке $\mathbf{k} = \mathbf{k}_s$ локальный максимум, то

$$V(E) = V_R(E) + \\ + \begin{cases} \text{const} \cdot (E_s - E)^{1/2} & \text{при } E < E_s, \\ 0 & \text{при } E > E_s. \end{cases}$$

3. Если $\mathbf{k} = \mathbf{k}_s$ является седловой точкой функции $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$, то возможны два случая:

a) Поверхность $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ при $\varepsilon \approx \varepsilon_s$ является однополостным гиперболоидом. Тогда

$$V(E) = V_R(E) - \\ - \begin{cases} \text{const} \cdot (E_s - E)^{1/2} & \text{при } E < E_s, \\ 0 & \text{при } E > E_s. \end{cases}$$

б) Поверхность $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ при $\varepsilon \approx \varepsilon_s$ является двуполостным гиперболоидом. Тогда

$$V(E) = V_R(E) - \\ - \begin{cases} 0 & \text{при } E < E_s, \\ \text{const} \cdot (E - E_s)^{1/2} & \text{при } E > E_s. \end{cases}$$

Частным случаем особенности первого типа является найденная нами ранее (см. формулу (19) работы [2]) корневая зависимость $W(E)$ в слабых полях $e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u} \ll \Delta$ при низких температурах $T \ll e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u}$. В этом случае речь идет об абсолютном минимуме функции $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$. При этом $E_s = 0$ и $V_R(E) = 0$. Как было показано в [2], корневая зависимость в слабых полях подтверждается экспериментальными данными [9] в области низких давлений для положительных зарядов.

Особенность второго типа в случае, когда речь идет об абсолютном максимуме, также была рассмотрена ранее (см. формулу (21) работы [2]). В области $T \ll (\Delta - e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u}) \ll \Delta$ вероятность W одновакансационного бесфононного процесса обращается в нуль при приближении к энергетическому порогу процесса пропорционально $(\Delta - e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u})^{1/2}$ в полном согласии с общим результатом для особенности второго типа. В данном случае $V_R(E) = 0$, $E_s = \Delta/(euc \cos \theta)$.

На рис. 1 приведена типичная зависимость скорости дрейфа $V(E)$ положительных зарядов в ГПУ-решетке ${}^4\text{He}$ в направлении главной оси C_6 кристалла от величины поля E , полученная Андреевой с соавт. [4]. На рис. 2 эти же данные при $E < E_s$ представлены в координатах $[V(E_s) - V]^2$ и $E_s - E$. Видно, что экспериментальные данные полностью соответствуют характеру особенности

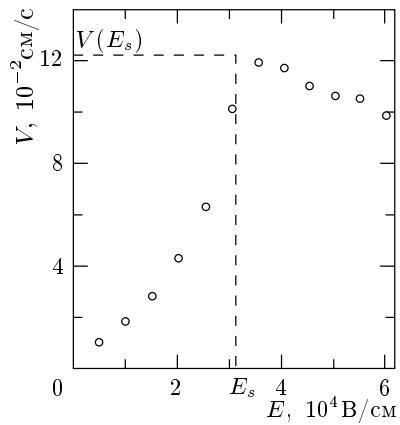


Рис. 1. Полевая зависимость скорости дрейфа положительных зарядов в ГПУ-кристаллах ${}^4\text{He}$ в направлении оси C_6

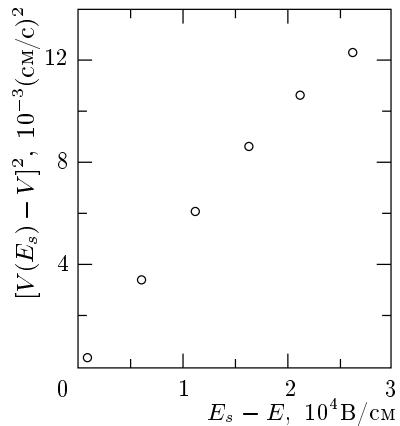


Рис. 2. Обработанные данные эксперимента [4]

Ван Хова в случае 3а. При этом $E_s \approx 3.1 \cdot 10^4 \text{ В/см}$. Согласно теореме Ван Хова (см. [11]), в спектре вакансий обязательно должна быть еще по крайней мере одна особая точка типа 3б и, соответственно, на зависимости $V(E)$ при дальнейшем увеличении поля должна наблюдаться еще одна особенность типа 3б. В еще больших полях должна наблюдаться упомянутая выше особенность типа 2, соответствующая порогу одновакансационных бесфононных процессов.

Изображенная на рис. 1 немонотонная полевая зависимость дрейфовой скорости с особенностью типа Ван Хова наблюдалась [4] для движения положительных зарядов в направлении главной оси C_6 кристалла. Для движения положительных зарядов в перпендикулярных осях C_6 направлениях и отрица-

тельных зарядов во всех направлениях дрейфовые скорости значительно меньше по абсолютной величине и их полевые зависимости имеют регулярный монотонный характер. Отсутствие особенностей свидетельствует о многочастичном характере соответствующих неупругих процессов. Для них в выражениях типа (1) для W появляются дополнительные интегрирования, что во всяком случае сильно ослабляет особенность.

Кроме одновакансационных процессов мы обсуждали в [2] также процессы рассеяния вакансий на зарядовом комплексе с излучением (или поглощением) фононов. Именно благодаря этим процессам в сильных полях может наблюдаться кубическая зависимость типа $(E + E_0)^3$. Здесь мы хотели бы отметить возможность (не рассматривавшуюся в [2] и отмечавшуюся в [5]) многовакансационных процессов.

Смещение зарядового комплекса при рассеянии на нем одновременно двух вакансий характеризуется, очевидно, значительно большей дифференциальной вероятностью w , чем соответствующий одновакансационный процесс. Именно поэтому двухвакансационный процесс может конкурировать с одновакансационным. Однако в выражении типа (1) для частоты W переходов появляется произведение двух функций распределения налетающих вакансий. Температурная зависимость дрейфовой скорости характеризуется множителем $\exp(-2\varepsilon_0/T)$, и в полевой зависимости, как отмечалось выше, особенностей Ван Хова не должно быть. В экспериментах [4] активационная энергия для движения положительных зарядов в направлениях перпендикулярных C_6 с хорошей точностью вдвое больше, чем для движения вдоль C_6 (11 К и 5.3 К), и полевые зависимости носят регулярный характер. Это является сильным аргументом в пользу двухвакансационного характера движения в перпендикулярных C_6 направлениях.

3. АНИЗОТРОПИЯ ПОДВИЖНОСТИ И СТРУКТУРА ЗАРЯДОВ

Наличие аномально большой анизотропии подвижности положительных зарядов в ГПУ-решетке

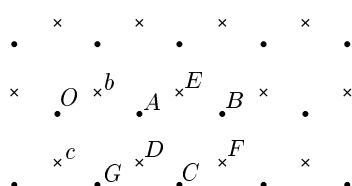


Рис. 3. Расположение атомов в ГПУ-кристаллах

^4He [4] (подвижности вдоль C_6 и поперек оси разли чаются в 200 (!) раз) означает (см. также конец работы [2]), что один из возможных векторов смещения заряда направлен строго вдоль оси C_6 кристалла и вероятность W смещения на этот вектор много больше вероятностей смещения на все прочие векторы. Большая разница в величинах этих вероятностей объясняется различным характером соответствующих процессов переноса заряда (одновакансационный или двухвакансационный), а направленность одного из векторов смещения по оси C_6 позволяет сделать вывод о пространственном положении «центра тяжести» положительного заряда в ГПУ-решетке ^4He . В самом деле, предположим, что «центр тяжести» положительного заряда в ГПУ-решетке совпадает с центром изображенного на рис. 3 октаэдра $ABCDEF$. Здесь точками показаны положения атомов ГПУ-решетки в базовой плоскости (совпадающей с плоскостью рисунка), перпендикулярной оси C_6 . Крестиками отмечены проекции на эту плоскость атомов, расположенных в плоскости, смещенной на половину периода решетки вдоль C_6 вверх от плоскости рисунка. Кристаллографически эквивалентными такому расположению иона являются, например, положения иона в центрах октаэдров $AOGcbD$ и $A^*B^*C^*DEF$, где узлы A^* , B^* , C^* получаются из A , B , C отражением в плоскости крестиков (их положение на рисунке совпадает с положением узлов A , B , C). Вектор трансляции из положения $ABCDEF$ в положение $AOGcbD$ лежит в плоскости перпендикулярной оси C_6 и равен по длине межатомному расстоянию a . Вектор трансляции из $ABCDEF$ в $A^*B^*C^*DEF$ направлен по оси C_6 и по длине равен $\sqrt{2/3}a$, т. е. заметно меньше, чем в перпендикулярном направлении. С другой стороны, легко видеть, что никакие другие положения иона в ГПУ-решетке, кроме октаэдров, о которых шла речь выше, не содержат среди набора векторов трансляции в соседние кристаллографически эквивалентные положения векторов, направленных вдоль оси C_6 и достаточных для смещения заряда на большие расстояния (см. пример 2 работы [2]). Зная плотность кристаллов гелия в экспериментах [4], длину вектора смещения вдоль оси C_6 ($\sqrt{2/3}a$) и значение E_s поля, при котором наблюдается особенность ($E_s \approx 3.1 \cdot 10^4$ В/см) на полевой зависимости, нетрудно по формуле (5) вычислить положение седловой точки в спектре вакансий относительно дна их зоны. Эта величина оказывается равной приблизительно 10 К. Полевая зависимость скорости дрейфа должна содержать еще, по крайней мере, одну особенность, но на экспериментальной кривой она не наблюдает-

ся вплоть до полей $6 \cdot 10^4$ В/см. Это может означать, что ширина зоны вакансий в ГПУ-кристаллах ${}^4\text{He}$ на кривой плавления превышает 18 К.

4. ДВИЖЕНИЕ ЗАРЯДОВ В ${}^3\text{He}$

Поведение вакансий в кристаллах ${}^3\text{He}$ зависит от конфигурации ядерных спинов атомов (см. [3]). Если спины полностью поляризованы, то кристалл периодичен и состояния вакансий, как и в кристаллах ${}^4\text{He}$, характеризуются определенными значениями квазимпульса. Все выводы относительно характера дрейфа зарядов, сделанные выше и в [2] для кристаллов ${}^4\text{He}$, полностью переносятся на этот случай с учетом, естественно, разницы в симметриях кристаллических решеток ${}^4\text{He}$ и ${}^3\text{He}$.

Как показано в [12], энергия вакансий, соответствующая дну зоны в полностью поляризованном состоянии, является абсолютным минимумом (для ОЦК-кристаллов) энергии вакансий по отношению к ее возможным значениям при любой другой конфигурации спинов. В этих условиях при температурах T , малых по сравнению с шириной зоны вакансий Δ в полностью поляризованном состоянии, вокруг вакансии должна спонтанно возникать (см. [3, 10]) ферромагнитная область полностью поляризованного кристалла. Радиус R такого спинового полярона при температурах, значительно превышающих температуру T_c антиферромагнитного упорядочения, по порядку величины определяется соотношением $R \sim a(\Delta/T)^{1/5}$, где a — период решетки. В антиферромагнитном состоянии имеем $R \sim a(\Delta/T_c)^{1/5}$. Сама вакансия при этом локализована и находится на нижнем энергетическом уровне внутри сферической потенциальной ямы радиусом R , образованной спиновым поляроном. Высоковозбужденные состояния вакансии внутри полярона будут практически тождественны состояниям вакансии в однородном полностью поляризованном состоянии кристалла, т. е. они характеризуются определенным квазимпульсом. Наглядно можно представлять себе вакансию как волновой пакет внутри некоего большого объема. Для справедливости такого представления нужно, чтобы за время пролета волнового пакета от края до края полярона пакет не успел расплзтись. За время t пакет расползается на величину $\sqrt{ta^2\Delta/\hbar}$. Подставив сюда в качестве t время пролета R/v (v — скорость вакансии) и потребовав, чтобы размер пакета не превысил размер полярона R , получим условие $v \gg \Delta a^2/R\hbar$. Это условие выполняется для всего интервала энергии вакансии, за исключением участков шириной порядка $\Delta a^2/R^2 \sim \Delta^{3/5}T^{2/5}$, непосредственно примыкающих к стационарным точкам (в том числе к дну и верху) зоны вакансий в полностью поляризованном кристалле. Ширина этих участков при $T \ll \Delta$ всегда значительно больше температуры, но значительно меньше ширины зоны Δ .

В процессе диффузационного движения вакансий вместе с окружающими их ферромагнитными поляронами локализованный зарядовый комплекс может оказаться внутри одного из поляронов. Тогда появляется возможность перехода заряда в результате взаимодействия с вакансиею в другое кристаллографически эквивалентное локализованное состояние. Высвобождающаяся при этом энергия $e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u}$ передается вакансии. Сказанное выше и в нашей предыдущей работе [2] по поводу полевой зависимости дрейфовой скорости зарядов в сильных полях очевидным образом переносится на этот случай. В данном случае, однако, ограничение на величину поля является более сильным: $e\mathbf{E} \cdot \mathbf{u} \gg \Delta^{3/5}T^{2/5}$. Уникальное свойство зарядов в этих условиях заключается в том, что их дрейф в неполяризованном кристалле оказывается таким, как если бы кристалл находился в полностью поляризованном состоянии. В частности, на зависимости скорости дрейфа от поля должны наблюдаться обсуждавшиеся выше особенности Ван Хова в спектре вакансий. Такая возможность исследования спектра вакансий в полностью поляризованном состоянии кристаллов ${}^3\text{He}$ представляется особенно интересной в связи с обсуждавшейся ранее (см. [3]) проблемой существования нулевых вакансий в поляризованном ${}^3\text{He}$.

Выражаем благодарность К. О. Кешишеву и О. А. Андреевой за полезное обсуждение работы и ценные замечания. Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, INTAS и NWO.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Ф. Андреев, А. Э. Мейерович, ЖЭТФ **67**, 1559 (1974).
2. А. Ф. Андреев, А. Д. Савищев, ЖЭТФ **96**, 1109 (1989).
3. A. F. Andreev, in *Progress in Low Temperature Physics*, Vol. VIII, ed. by D. F. Brewer, North-Holland, Amsterdam (1982).

4. O. Andreeva, K. Keshishev, D. Kholin, and P. Kossyrev, J. Low Temp. Phys. **110**, 89 (1998).
5. O. A. Andreeva, K. O. Keshishev, and A. D. Savischev, Physica B **284–288**, 343 (2000).
6. В. Б. Шикин, Письма в ЖЭТФ **13**, 65 (1971); ЖЭТФ **61**, 2053 (1971).
7. C. Herring, J. Appl. Phys. **21**, 437 (1950).
8. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **44**, 1349 (1963).
9. К. О. Кешишев, ЖЭТФ **72**, 521 (1977).
10. А. Ф. Андреев, Письма в ЖЭТФ **24**, 608 (1976).
11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика. Часть 1*, Наука, Москва (1976), § 70.
12. Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).