

THE ATTENUATED TOTAL INTERNAL REFLECTION FROM LAMINARLY INHOMOGENEOUS MEDIUM AT THE EXCITATION OF P-POLARIZED SURFACE PLASMONS

L. S. ASILANYAN, N. N. BADALYAN, A. G. GRIGORYAN,
A. A. PETROSYAN, Yu. S. CHILINGARYAN

Conditions of the excitation of a surface electromagnetic wave on the boundary between a metal and an inhomogeneous dielectric are discussed. The presence of inhomogeneity is shown to lead to the displacement of the resonance curve of surface-electromagnetic wave excitation.

Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 23, вып. 5, 269—274 (1988)

УДК 548.35;530.145

О ВАКАНСИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ ДЕФЕКТОНА В 2D-КВАНТОВЫХ КРИСТАЛЛАХ

М. Э. АРУТЮНЯН, Г. А. ВАРДАНЫН

Ереванский государственный университет

А. С. СААКЯН

Ереванский политехнический институт им. К. Маркса

(Поступила в редакцию 10 октября 1987 г.)

На основе уравнения Лифшица построена теория неупругого рассеяния вакансиона на дефектоне (примесь He^3 в твердом He^4 , перевернутый спин в спин-поляризованном твердом He^3) в квантовых кристаллах. С помощью этой теории исследована температурная зависимость коэффициента диффузии дефектонов в двумерных квантовых кристаллах. Рассмотрен случай термоактивированных вакансий.

1. Введение

Известно, что сильная ангармоничность квантовых кристаллов обуславливает их уникальные свойства, в частности, возможность принципиально нового вида движения в них атомных частиц и дефектов—квантовую диффузию [1,2].

Наличие в квантовых кристаллах делокализованных вакансий-вакансионов—обуславливает существование весьма своеобразного канала диффузии, механизмом которого служит неупругое рассеяние вакансиона на дефектоне (вакансионная диффузия) [2, 3]. Ширина энергетической зоны вакансиона значительно превосходит ширину энергетической зоны других дефектонов (например, для примесона He^3 в твердом He^4 $\Delta_p \sim 10^{-4}$ К, в то время как для вакансиона $\Delta_v \sim 1$ К). Вследствие этого за время взаимодействия дефектон успевает переместиться лишь на расстояние порядка решетки. Таким образом, рассеяние вакансиона на дефек-

тоне является неупругим, в процессе его происходит туннельный обмен местами между вакансионом и дефектоном, как только они оказываются ближайшими соседями. Индуцируемая вакансиями диффузия определяется вероятностью неупругого рассеяния, а коэффициент диффузии (КД) $D \sim a^2 \nu$, где a — постоянная решетки, ν — частота актов неупругого рассеяния, причем $\nu \sim N_v \nu \sigma$, N_v — число вакансий в единице объема, ν — их скорость, σ — сечение неупругого процесса.

Тот факт, что коэффициент диффузии прямо пропорционален числу вакансий N_v , говорит о том, что с экспериментальной точки зрения наиболее перспективными объектами для исследования вакансионной диффузии являются двумерные (2D) квантовые кристаллы, образующиеся при адсорбции изотопов гелия на графитовой подложке. Экспериментально показано, что в области температур $T \sim 1\text{ К}$ и плотности покрытия $x \approx 0,58$ в системе адатомов происходит фазовый переход в состояние 2D-квантового кристалла [4], причем эта фаза простирается вплоть до плотности покрытия $x \approx 0,98$. Таким образом, концентрация вакансий в 2D-квантовых кристаллах чрезвычайно высока ($x \lesssim 10^{-1}$).

В дальнейшем под дефектоном мы будем подразумевать либо примесь He^3 в 2D-квантокристаллическом He^4 , либо перевернутый спин в спин-поляризованном 2D-твердом He^3 .

С другой стороны из вышеприведенных оценок следует, что КД, индуцируемой вакансиями, содержит сечение рассеяния. Таким образом, возникает необходимость построения теории вакансион-дефектного рассеяния. Эта задача рассматривалась в работе [3], где построена теория рассеяния для модели Хаббарда с почти наполовину заполненной зоной.

В настоящей работе эта задача решена с помощью метода И. М. Лифшица [5]. Важной чертой этого подхода является учет решеточного характера движения квазичастиц, обладающего рядом специфических особенностей, которые находят свое отражение в поведении как кинетических коэффициентов, так и термодинамических величин. В частности, этот метод позволяет объяснить ряд результатов как ЯМР, так и тепловых измерений в 2D-квантовых кристаллах [6].

2. Вакансион-дефектное рассеяние в квантовых кристаллах

При построении уравнения Лифшица следует учесть, что вакансион свободно движется в решеточном пространстве кристалла, пока он не оказывается в ближайшем соседстве с дефектоном, затем происходит их обмен местами и вакансион продолжает свободное движение. Член, соответствующий свободному движению вакансиона, выберем в виде $\sum_a A_{R_l, R_v+a} \times \varphi(R_l, R_v+a)$, где a — векторы ближайших соседей дефектона, R_l , R_v — радиус-векторы соответственно дефектона и вакансиона. В дальнейшем для простоты будем считать, что дефектон находится в начале координат: $R_l=0$; A_{R_l, R_v} — вероятность туннельного движения вакансиона, для простоты считаем $A_{R_l, R_v}=t$ для ближайших соседей и $A_{R_l, R_v}=0$ — в остальных случаях.

Таким образом,

$$\hat{H}\varphi(0, \mathbf{R}_v) = -t \sum_a \varphi(0, \mathbf{R}_v + \mathbf{a}) (1 - \delta_{0, \mathbf{R}_v + \mathbf{a}}) (1 - \delta_{0, \mathbf{R}_v}) - \\ - t \sum_a \varphi(0, \mathbf{R}_v) \delta_{0, \mathbf{R}_v + \mathbf{a}}, \quad (1)$$

где первый член соответствует свободному движению вакансии; множители в скобках введены для учета того факта, что вакансия не может быть ближайшим соседом дефектона (первая скобка) и что вакансия и дефектон не могут одновременно находиться в одном узле решетки (вторая скобка). Второй член соответствует тому, что вакансия и дефектон являются ближайшими соседями.

Раскрывая скобки и комбинируя члены в правой части уравнения (1), уравнение Лифшица можем представить в виде

$$t \sum_a \varphi(0, \mathbf{R}_v + \mathbf{a}) - z \varphi(0, \mathbf{R}_v) = t \sum_a [\varphi(0, \mathbf{R}_v) - \varphi(0, \mathbf{R}_v + \mathbf{a})] \delta_{0, \mathbf{R}_v + \mathbf{a}}. \quad (2)$$

Учитывая, что ядро уравнения (2) вырождено, при его решении можно применить стандартные методы теории интегральных уравнений, в результате чего для волновой функции $\varphi(0, \mathbf{R}_v)$ получаем:

$$\varphi(0, \mathbf{R}_v) - t \varphi(-\mathbf{a}) \int \frac{e^{i\chi \mathbf{R}}}{\varepsilon(\chi) - z} d^d \chi = t \varphi(0) \int \frac{i\chi(\mathbf{R}_v - \mathbf{a})}{\varepsilon(\chi) - z} d^d \chi, \quad (3)$$

где $\varphi(-\mathbf{a})$ и $\varphi(0)$ определяются следующими выражениями:

$$\varphi(-\mathbf{a}) = \int \frac{e^{i\chi \mathbf{a}} d^d \chi}{\varepsilon(\chi) - z} / \int \frac{A_\chi d^d \chi}{\varepsilon(\chi) - z}, \quad (4)$$

$$\varphi(0) = \int \frac{d^d \chi}{\varepsilon(\chi) - z} / \int \frac{A_\chi d^d \chi}{\varepsilon(\chi) - z}.$$

В выражениях (2) и (4) $z = \varepsilon + i0$, ε — энергия рассеяния, $A_\chi = \sum \exp(i\chi \mathbf{a})$, d — размерность задачи; в дальнейшем подробно будет рассмотрен случай $d=2$.

В частности, в случае простой квадратной решетки, когда $A_\chi = 2(\cos a\chi_x + \cos a\chi_y)$, простой расчет приведет к следующему выражению для $\varphi(-\mathbf{a}) - \varphi(0)$ (ниже будет показано, что в амплитуду рассеяния входит именно эта комбинация величин $\varphi(-\mathbf{a})$ и $\varphi(0)$):

$$\varphi(-\mathbf{a}) - \varphi(0) = \frac{i}{2\pi} \left| 1 + \frac{K\left(\sqrt{1 - \frac{a^2}{4}}\right) - iK\left(\frac{a}{2}\right)}{1 - i\alpha K\left(\sqrt{1 - \frac{a^2}{4}}\right) + \alpha K\left(\frac{a}{2}\right)} \right|, \quad (5)$$

где $K(x)$ — полный эллиптический интеграл I рода, ε_0 — потенциал активации вакансии.

При вычислении КД нас будет интересовать область низких температур $T \ll \Delta_r$, когда возбуждены вакансионные состояния вблизи дна энергетической зоны, $\varepsilon \gtrsim \varepsilon_0$, $\alpha \ll 1$, а спектр вакансионных квадратичен, $\varepsilon(k) = \varepsilon_0 + \Delta_r(\alpha k)^2$. Тогда, применяя известные соотношения для эллиптических интегралов

$$K\left(\sqrt{1-\frac{a^2}{4}}\right) \approx \ln\left(\frac{2}{a}\right), \quad K\left(\frac{a}{2}\right) \approx \frac{\pi}{2}$$

при асимптотическом стремлении аргументов к единице и нулю, получим

$$\varphi(-a) - \varphi(0) \approx -\frac{i}{2\pi} \ln \frac{a - \varepsilon_0}{\Delta_v}. \quad (6)$$

Проведя в (3) интегрирование по χ , окончательно будем иметь

$$\varphi(0, R_v) = \frac{1}{8} it [\varphi(-a) - \varphi(0)] I_0(aR'), \quad R' = \frac{R_v}{a}, \quad (7)$$

где $J_0(x)$ — функция Бесселя нулевого порядка.

Перейдя в (7) к асимптотикам, получим для амплитуды рассеяния

$$f(\varepsilon) = e^{-i\pi/4} \frac{\sqrt{a} \Delta_v^{1/4}}{4(2\pi)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_0}} \ln \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\Delta_v}, \quad (8)$$

для сечения рассеяния

$$\sigma(\varepsilon) = 2\pi |f(\varepsilon)|^2 = \frac{a \Delta_v^{1/2}}{(8\pi)^2 \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_0}} \ln^2 \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{t} \quad (9)$$

или, перейдя к квазимпульсу и учитывая, что для простой квадратной решетки $\Delta_v = tZ$, $Z=4$, z — число ближайших соседей.

$$\sigma(k) = \frac{1}{(2\pi)^2 k} \ln^2(2ak). \quad (9a)$$

Отметим, что для квазиклассических вакансионных ($ak \gg 1$) из выражений (5) и (7) следует, что $\sigma(k) \sim k^{-1}$, что совпадает с результатом работы [3], однако с ростом длины волны вакансионного растет фактор $|\varphi(-a) - \varphi(0)|^2$, описывающий туннельный обмен местами вакансионного и дефектона из-за роста перекрытия соответствующих волновых функций.

3. Коэффициент диффузии

1.3

Среднюю скорость дефектона рассчитаем по известной формуле [2, 3]

$$u = \sum_a a \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sigma(k) v(k) [n(\varepsilon) - n(\varepsilon + Fa)], \quad (10)$$

где $v(k) = \hbar^{-1} \nabla \varepsilon(k)$ — скорость вакансионного, $n(\varepsilon)$ — равновесная функция распределения вакансионных, F — бесконечно малая сила, действующая на дефектон.

Рассмотрим сначала случай термически активированных вакансий, когда вакансионные подчиняются бoльцмановской статистике. Тогда

$$n(\varepsilon) - n(\varepsilon + Fa) \approx \frac{Fa}{T} e^{-\varepsilon/T}, \quad \frac{Fa}{T} \ll 1. \quad (11)$$

Подставляя разложение (11) в (10) и интегрируя по k , получим

$$u = \frac{1}{2^5 \pi^4} e^{-\varepsilon_0/T} \ln^2 \frac{T}{t} \sum_a a(Fa). \quad (12)$$

Введем тензор подвижности дефектона μ_{ik} с помощью следующего соотношения

$$u_{ik} = \sum \mu_{ik} F_k. \quad (13)$$

Сравнивая (13) с (12), а также учитывая, что для простой квадратной решетки

$$\sum_i a_i a_k = 4a^2 \delta_{ik}, \quad (14)$$

получим

$$\mu_{ik} = \frac{a^2}{8\pi\hbar} e^{-\epsilon_0/T} \ln \frac{T}{t} \delta_{ik}. \quad (15)$$

Исходя из соотношения Эйнштейна $D_{ik} = T\mu_{ik}$, для КД находим

$$D_{ik} = \frac{a^2}{8\pi\hbar} T \ln^2 \frac{T}{t} e^{-\epsilon_0/T} \delta_{ik}. \quad (16)$$

Как видим, температурная зависимость КД имеет термоактивационный характер.

Для сравнения приведем выражение для КД в трехмерном случае*:

$$D_{ik} = \frac{4.5}{\hbar} \sum \left[\frac{a^3}{(2\pi)^2 K_{1/2}^2 \Gamma(\chi_i)} \right] T^2 e^{-\epsilon_i/T} \delta_{ik}, \quad (17)$$

где K_i — гауссова кривизна изоэнергетической поверхности $\epsilon(k) = \epsilon$ в точках касания с опорными плоскостями [6].

Таким образом, и в трехмерном случае температурная зависимость имеет термоактивационный характер, в то время как температурная зависимость предэкспоненциального множителя зависит от размерности решеточного пространства и определяется видом амплитуды вакансион-дефектонного рассеяния.

ЛИТЕРАТУРА

1. Андреев А. Ф., Лифшиц И. М. ЖЭТФ, 56, 2057 (1969).
2. Андреев А. Ф. УФН, 118, 249 (1976).
3. Пирадашвили И. Н. ЖЭТФ, 84, 184 (1983).
4. Richards M. G. et al. Phys. Rev. Lett., 34, 1545 (1975).
5. Варданян Г. А. УФН, 144, 113 (1984).
6. Варданян Г. А., Саакян А. С. ЖЭТФ, 88, 1079 (1985).

2D-ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ԴԵՖԵԿՏՈՆԻ ՎԱԿԱՆՍԻՈՆԱՅԻՆ ՇԱՐԺՈՒՆԱԿՈՒԹՅԱՆ ՄԱՍԻՆ

Մ. Զ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Գ. Ա. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Ա. Ս. ՍԱՀԱԿՅԱՆ

Լիֆշիցի հավասարման միջոցով կառուցվել է ղեֆեկտոնի վրա վականսիոնի ոչ առանձնական ջրման տեսությունը (He^3 -ի խառնուրդը պինդ He^4 -ի մեջ, շրջված սպին՝ պինդ սպինային բևեռացված He^3 -ի մեջ) քվանտային բյուրեղներում: Այդ տեսության միջոցով հետազոտվել է ղեֆեկտոնների ղեֆուզիայի զործակցի ջերմաստիճանային կախումը քվանտային երկչափ բյուրեղներում: Դիտարկված է թերմաակտիվացված վականսիոնների դեպքը:

*Зависимость $D \sim T^2 e^{-\epsilon_0/T}$ впервые получена в работе [3].

ON THE VACANCION MOBILITY OF DEFECTONS IN 2D QUANTUM CRYSTALS

M. Z. HARUTYUNYAN, G. A. VARDANYAN, A. S. SAHAKYAN

The theory of inelastic scattering of a vacancy on a defecton (He^3 impurity in solid He^4 , an inverted spin in spin-polarized solid He^3) in quantum crystals is constructed on the basis of Lifshits equations. This theory was used for the investigation of temperature dependence of defecton diffusion coefficient. The case of thermally activated vacancies is considered.

Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 23, вып. 5, 274—279 (1988)

УДК 534.512

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА ФУРЬЕ-АНАЛИЗА МЁССБАУЭРОВСКИХ СПЕКТРОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А. Р. МКРТЧЯН, А. З. АЦАГОРЦЯН, Г. Н. НАДЖАРЯН, Н. М. ГАСПАРЯН

Институт прикладных проблем физики АН АрмССР

(Поступила в редакцию 10 ноября 1987 г.)

Методом численного моделирования экспериментальных спектров гамма-резонансного поглощения исследована временная зависимость средне-квадратичного смещения (СКС) мёссбауэровских ядер (МЯ) для двух типов диффузионного движения — неограниченной и ограниченной диффузии. На основе анализа временной зависимости относительной ошибки СКС определены оптимальные условия проведения соответствующего эксперимента и вычислены величины тех интервалов времени, в которых временные корреляционные функции движения МЯ могут быть определены с заранее заданной (в рассматриваемом случае — $\pm 10\%$) точностью.

Исследование молекулярной подвижности несомненно представляет актуальную проблему, лежащую в основе понимания физики различных процессов, протекающих в твердых телах, биомолекулах, жидкостях [1—4] и т. д. Возможность решения этой проблемы методом гамма-резонансной спектроскопии (ГРС) связана с тем обстоятельством, что форма линии спектра поглощения γ -квантов зависит от временной корреляционной функции (ВКФ) координаты мёссбауэровских ядер (МЯ) [1]. ВКФ, в принципе, содержит всю информацию о характере движения МЯ (амплитуда колебаний, времена корреляции, коэффициент диффузии и т. д.). Впервые на возможность непосредственного определения ВКФ из экспериментального спектра, без априорных предположений о характере движения, указали авторы работы [2], однако ими не была исследована зависимость погрешности полученной таким образом ВКФ от условий проведения соответствующего эксперимента. Экспериментальные ошибки, обусловленные конечным временем экспозиции (T_{sp}), ограниченным диапа-