

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДЕПОЛЯРИЗАЦИИ СПИНА МЮОНА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЕ ${}^3\text{He}$

Ю. М. Белоусов*

Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 3 октября 2006 г.

Представлено теоретическое описание поведения положительного мюона, остановившегося в мишени из твердого гелия, позволяющее объяснить результаты экспериментов, проведенных для кристаллической фазы ${}^3\text{He}$. Показано, что образующийся линейный молекулярный ион $(\text{He}_2\mu)^+$ успевает термализоваться за время жизни мюона и находится в состоянии с вращательным квантовым числом $K = 1$ для иона с суммарным спином ядер гелия $I = 1$ и с $K = 0$ для иона с $I = 0$. Механизм термализации обусловлен взаимодействием электрического квадрупольного момента иона с решеткой гелия. Благодаря этому взаимодействию снимается трехкратное вырождение по проекции вращательного момента и взаимодействие типа спин–вращение отсутствует. Получен гамильтониан спин-фононного взаимодействия ядер гелия иона с решеткой. Деполяризация наблюдается только для иона с $I = 1$ и обусловлена спин-обменным взаимодействием ядер решетки и связанных с мюоном ядер ${}^3\text{He}$ с испусканием фононов в решетке, деформированной сильным кулоновским полем положительно заряженного иона.

PACS: 76.75.+i, 67.80.Cx, 67.90.+z

1. ВВЕДЕНИЕ

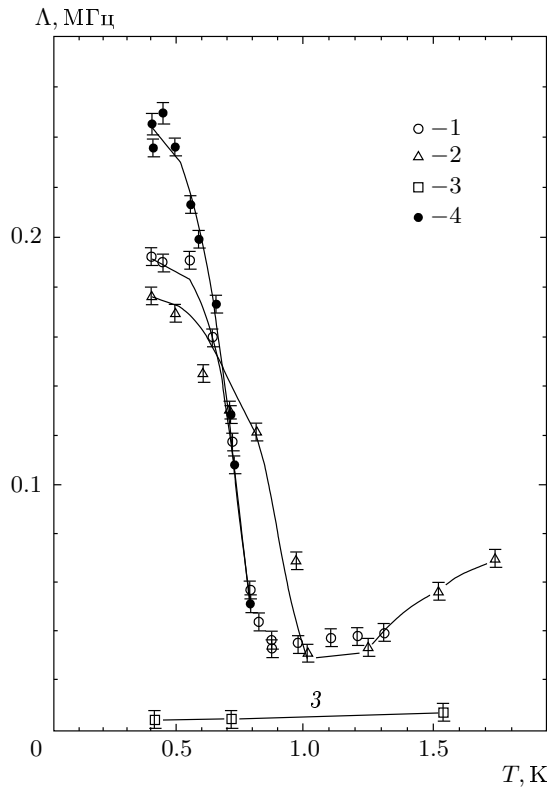
Эксперименты по изучению деполяризации спина положительных мюонов в конденсированных фазах изотопов гелия, проведенные уже более десяти лет назад [1–3], дали интересные и неожиданные результаты, которые до сих пор полностью не объяснены теоретически. Более ранние эксперименты с жидким ${}^4\text{He}$ (см., например, работы [4, 5]) показали, что положительный мюон образует связанное состояние μ^+e^- — атом мюония (Mu). В твердом гелии, в отличие от жидкой фазы, мюоний не наблюдался. Эксперименты в жидком гелии в электрических полях показали, что атом Mu образуется в результате захвата электронов трека, образовавшегося в результате торможения положительного мюона до боровских скоростей. В кристаллической фазе, по-видимому, взаимодействие мюона с треком мало. Также мало взаимодействие его с треком и в газообразной фазе, где мюоний не образуется [6, 7]. Таким образом, оказалось, что μSR -метод открывает дополнительные возможности изучения поведения легких поло-

жительно заряженных примесей в кристаллической фазе гелия.

В μSR -экспериментах изучается прецессия и релаксация поляризации спина мюона во внешних магнитных полях, поэтому получаемая информация аналогична той, которая извлекается с помощью ЯМР. Релаксация поляризации обусловлена взаимодействием с локальными магнитными полями, которые в ${}^4\text{He}$ отсутствуют. Поэтому эксперименты проводились с обоими изотопами, ${}^4\text{He}$ и ${}^3\text{He}$, и с их смесями. На рисунке показаны экспериментальные данные по измерению скорости деполяризации поперечной компоненты, прецессирующей с мюонной частотой в полях $B \sim 100$ Gs, полученные в работе [2]. Как видно, в образце, состоящем только из изотопа ${}^4\text{He}$, деполяризация отсутствует во всем диапазоне температур ниже точки плавления. Поведение поляризации в чистом ${}^3\text{He}$ и в смеси различается радикально: скорость деполяризации везде отлична от нуля, а при понижении температуры ниже 1 К резко возрастает почти на порядок и при $T < 0.4$ К имеет тенденцию к насыщению. К сожалению, при более низких температурах эксперимент не проводился.

Наличие деполяризации в ${}^3\text{He}$ обусловлено преж-

*E-mail: bel@theor.op.mipt.ru



Экспериментально наблюдаемая температурная зависимость скорости деполяризации спина мюона в кристаллической фазе ^3He при различных молярных объемах: 1 — $v = 22.4 \text{ см}^3$ (53 атм); 2 — $v = 21.3 \text{ см}^3$ (71 атм). Нижняя кривая 3 относится к эксперименту в кристаллической фазе ^4He ($v = 20.5 \text{ см}^3$, 33 атм). Кривая 4 относится к эксперименту [2] в электрическом поле $\mathcal{E} = 1.7 \text{ кВ/см}$ при $v = 22.4 \text{ см}^3$

де всего локальными магнитными полями, создаваемыми на мюоне магнитными моментами ядер. Такое взаимодействие, приводящее к неоднородному уширению линии в решетке спинов $I = 1/2$, описывается вторым моментом [7], который для поликристаллического образца равен

$$\langle \sigma^2 \rangle = \frac{2}{15} (\hbar \gamma_\mu \gamma_I)^2 I(I+1) \sum_a r_a^{-6}, \quad (1)$$

где γ_μ и γ_I — гиромагнитные отношения соответственно для мюона и ядра, r_a — координата ядра a .

Для оценки величины второго момента нельзя использовать параметры недеформированной решетки, поскольку заряженный мюон, поляризуя атомы решетки, сильно ее деформирует. Величину радиуса R_1 первой координационной сферы деформированной решетки можно оценить, используя мо-

дельный потенциал Леннарда-Джонса, хотя он не очень хорошо описывает взаимодействия между атомами гелия (см., например, [8]):

$$V_{LJ}(R) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma_0}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_0}{R} \right)^6 \right],$$

где R — расстояние между ядрами, а для ^3He параметры равны $\epsilon \approx 10.2 \text{ К}$, $\sigma_0 \approx 2.56 \text{ \AA}$.

Полагая, что в первой координационной сфере находится N_1 атомов гелия, и пренебрегая взаимодействием между ними, получим оценку R_1 , минимизируя энергию взаимодействия

$$V_1 = -N_1 \frac{\alpha e^2}{2R_1^4} + N_1 V_{LJ}(R_1), \quad (2)$$

где первое слагаемое — энергия взаимодействия положительно заряженного мюона с поляризованными атомами гелия. Поляризуемость свободного атома гелия равна $\alpha = 1.383 a_0^3$ (a_0 — боровский радиус). Подставляя численные значения параметров, получаем $R_1 \geq 3 \text{ \AA}$.

С учетом взаимодействий только с первой координационной сферой из формулы (1) получаем

$$\sqrt{\langle \sigma^2 \rangle} \approx 0.9 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1},$$

что существенно меньше максимального значения скорости деполяризации, наблюдаемого в эксперименте, однако превышает минимальную величину измеренной скорости деполяризации при $T \geq 1 \text{ К}$ (см. рисунок). Уменьшение скорости деполяризации по сравнению с полученной величиной второго момента может быть обусловлено динамическим сужением линии. Действительно, в традиционных экспериментах по изучению поведения положительно заряженных примесей в гелии, как правило, исследуется поведение ионов He^+ или He_2^+ [9], которые могут диффундировать в решетке или дрейфовать во внешнем электрическом поле [10]. Диффузия носит существенно квантовый, вакансионный характер [11, 12]. Если положительный мюон также диффундирует в решетке, скорость деполяризации спина должна понизиться и, следовательно, в любом случае будет меньше величины, определяемой вторым моментом (1). Таким образом, наблюдаемую скорость деполяризации в случае $T > 1 \text{ К}$ можно в принципе объяснить прямым взаимодействием магнитного момента мюона с магнитными моментами ядер решетки, в отличие от случая $T < 1 \text{ К}$.

Для объяснения наблюдаемой максимальной величины скорости деполяризации спина мюона необходимо предположить, что он образует какое-либо

связанное состояние с атомами He. Хорошо известно, что μ^+ , как и протон, может образовывать молекулярные ионы $(\text{He}\mu)^+$ и $(\text{He}_2\mu)^+$ с энергиями связи соответственно около 1.9 и 0.47 эВ [13, 14]. На основе этих ионов начинается рост кластеров, который уже определяется слабым взаимодействием Ван дер Ваальса. Для определенности рассмотрим молекулярный ион $(\text{He}_2\mu)^+$, который имеет линейную структуру с расстоянием между ядрами $R_0 \approx 0.93 \text{ \AA}$. В такой системе характерная величина магнитного диполь-дипольного (сверхтонкого) взаимодействия составляет

$$\Omega = \hbar\gamma_\mu\gamma_{\text{He}}/R_0^3 \approx 3 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1} \quad (3)$$

(где γ_{He} — гиромагнитное отношение для ядра атома ^3He), что в несколько раз превышает экспериментально наблюдаемую максимальную скорость деполяризации. Однако сильная зависимость от температуры указывает на определяющую роль спиновой динамики решетки, которая связана с обменным взаимодействием ядер ^3He

$$V_{ex} = -J(R_{12})\hat{\mathbf{i}}_1 \cdot \hat{\mathbf{i}}_2, \quad (4)$$

где $J(R_{12})$ — обменный интеграл, $\hat{\mathbf{i}}_1$ и $\hat{\mathbf{i}}_2$ — спиновые операторы двух соседних атомов ^3He , находящихся на равновесном расстоянии R_{12} . Обменный интеграл сильно зависит от межатомного расстояния (и, соответственно, давления) и для ОЦК-решетки $J \approx 1 \text{ мК}$ [8], поэтому в кристаллах ^3He будет весьма значительным спин-фононное взаимодействие, которое приводит к температурной зависимости скорости деполяризации спина мюона и уменьшению ее максимального значения.

Действительно, ядро ^3He , связанное в молекулярном ионе $(\text{He}\mu)^+$ или $(\text{He}_2\mu)^+$, испытывает спин-обменное взаимодействие с ядрами решетки, в результате чего возникает флуктуирующее магнитное поле на мюоне, зависящее от частоты спиновых обменов, что приводит к уменьшению максимальной величины сверхтонкого взаимодействия (3) в ионе.

В настоящей работе нас интересует прежде всего температурная зависимость скорости деполяризации спина мюона при $T < 1 \text{ К}$. Предварительные результаты были опубликованы в работах [15–17], в которых температурная зависимость скорости деполяризации объясняется спин-фононным взаимодействием ядер He, связанных в молекулярный ион, с решеткой.

2. ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ, ПРИВОДЯЩИЕ К ТЕРМАЛИЗАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ

Рассмотрим поведение молекулярных ионов $(\text{He}\mu)^+$ и $(\text{He}_2\mu)^+$ в решетке гелия сразу после их образования. В одной из первых работ [18] было высказано предположение, что в кристаллах благородных газов молекулярный ион не успевает термализоваться за время жизни мюона и должен находиться на возбужденных уровнях колебательно-вращательного спектра. В этом случае к магнитному диполь-дипольному взаимодействию в ионе добавляется взаимодействие спин-вращение. Магнитное диполь-дипольное взаимодействие во вращающемся ионе усредняется и остается только взаимодействие спин-вращение, которое должно быть отлично от нуля и иметь примерно одинаковую величину как для ^3He , так и для ^4He . Именно взаимодействие спин-вращение в нетермализованном ионе $(\text{He}_2\mu)^+$ позволило объяснить деполяризацию, наблюдавшуюся в кристаллах параводорода [19–21]. Однако в более поздних экспериментах с твердым гелием [1, 2] релаксация спина мюона в ^4He не наблюдалась (см. рисунок). Это указывает на то, что молекулярный ион, если он образовался, либо находится в замороженном состоянии, либо не может свободно вращаться, поскольку в термализованном ионе в ^3He диполь-дипольное взаимодействие должно отсутствовать.

В работах [15–17] предполагалось, что молекулярный ион не может термализоваться и находится в замороженном состоянии. Однако это предположение, дававшее принципиальное объяснение наблюдаемой температурной скорости деполяризации при $T < 1 \text{ К}$, не позволяет объяснить некоторые экспериментальные результаты. Поэтому необходимо рассмотреть состояние иона в решетке и, в частности, процесс его термализации более внимательно. Предварительные результаты расчета процесса термализации опубликованы в работе [22].

Заметим, что на начальной стадии образования связанного состояния $(\text{He}\mu)^+$ или $(\text{He}_2\mu)^+$ ион должен находиться на высоких колебательно-вращательных уровнях с энергией возбуждения, соответствующей энергии связи иона $\epsilon \approx 1 \text{ эВ}$, что определяет большие значения как колебательного ν , так и вращательного K квантовых чисел¹⁾. В решетке квантового кристалла нет взаимодействий,

¹⁾ Будем считать, что для линейных ионов колебательно-вращательными взаимодействиями можно пренебречь.

энергия которых превышала бы данную величину и, следовательно, обеспечивала бы замораживание иона в решетке.

Термализация ионов возможна благодаря передаче энергии колебательных и вращательных степеней свободы решетке, при этом испускается фотон, уносящий колебательный или вращательный квант энергии иона.

Взаимодействие иона с решеткой определяется энергией взаимодействия его электрических мультипольных моментов с неоднородным электрическим полем, которое создают поляризованные атомы гелия на ионе. Будем считать, что взаимодействия иона с решеткой можно представить в виде разложения по мультипольным моментам, иными словами, отношение линейных размеров R_0 иона к расстоянию до ближайших соседей (радиус R_1 первой координационной сферы) мало: $R_0/R_1 \ll 1$. На самом деле это приближение оказывается не очень хорошим, поскольку $R_0/R_1 \approx 1/3$, однако оно все же позволяет провести оценки порядка величин и дает правильное представление о процессе термализации.

Рассмотрим сначала ион $(\text{He}\mu)^+$, который обладает как электрическим квадрупольным, так и дипольным моментом относительно центра масс, величина которого, однако, весьма мала: $d \approx 0.3 \cdot 10^{-2} eR_0$. Компоненты квадрупольного момента равны соответственно $Q_{\parallel} = -2Q_{\perp} = Q = eR_0^2$. Ион $(\text{He}_2\mu)^+$ не обладает дипольным моментом относительно центра масс, а его квадрупольный момент в два раза больше²⁾, чем для иона $(\text{He}\mu)^+$. Легко видеть, что энергия взаимодействия квадрупольного момента с полем решетки превосходит энергию взаимодействия дипольного момента иона $(\text{He}\mu)^+$, поэтому последней можно пренебречь. Различие в поведении ионов $(\text{He}\mu)^+$ и $(\text{He}_2\mu)^+$ определяется только различием их энергетических спектров и состояний. Взаимодействие квадрупольного момента с полем, создаваемым поляризованными атомами гелия,

$$V_Q \approx \frac{6\alpha e Q}{R_1^6} \approx 3 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}, \quad (5)$$

что меньше порядка величины вращательного кванта энергии иона $(\text{He}\mu)^+$ и более чем на два порядка величины меньше его колебательного кванта. Для иона $(\text{He}_2\mu)^+$ энергия взаимодействия больше величины вращательного кванта энергии (но имеет тот же порядок) и также почти на два порядка меньше

его колебательного кванта. Учитывая тот факт, что на первой стадии после образования связанного состояния ионы находятся на высоких возбужденных уровнях энергии, взаимодействие (5) не может заморозить не только ион $(\text{He}\mu)^+$, но и $(\text{He}_2\mu)^+$. Вместе с тем нельзя однозначно утверждать, что вращение иона $(\text{He}_2\mu)^+$ не может быть заморожено для нижнего вращательного уровня с $K = 1$.

Энергия взаимодействия квадрупольного момента иона с полем, создаваемым поляризованным атомом гелия, зависит от ориентации иона и равна

$$V_Q = \frac{2\alpha e}{r^6} Q_{\alpha\beta} (3n_{\alpha}n_{\beta} - \delta_{\alpha\beta}), \quad (6)$$

где $n_{\alpha,\beta}$ — компоненты единичного вектора, направленного от иона к ядру. Здесь учтено, что поляризованные атомы решетки выстроены по направлению радиуса-вектора и что $Q_{\alpha\alpha} = 0$. Легко видеть, что полная (классическая) энергия взаимодействия определяется суммой по всем атомам и в положении с кубической симметрией равна нулю.

Энергии взаимодействия (6) соответствует оператор взаимодействия вращательного момента иона с полем кристалла,

$$\hat{V}_Q = -\frac{1}{(2K-1)(2K+3)} \frac{2\alpha e}{r^6} \times \\ \times Q_{\alpha\beta} \left[\frac{3}{2} (\hat{K}_{\alpha} \hat{K}_{\beta} + \hat{K}_{\beta} \hat{K}_{\alpha}) - \delta_{\alpha\beta} K(K+1) \right], \quad (7)$$

который приводит к диссипации вращательной энергии иона только в случае передачи ее фононам. Здесь $\hat{K}_{\alpha,\beta}$ — операторы проекций вращательного момента, K — вращательное квантовое число. Энергия акустических фононов существенно меньше колебательного кванта энергии иона, поэтому при многофононном процессе ион не успеет термализоваться за время жизни мюона. Однако положительно заряженный ион сильно деформирует кристалл и, соответственно, искажает его фононный спектр, что приводит к появлению локальной фононной моды, описывающей радиальные колебания решетки относительно заряженного центра. В Приложении А получен спектр этих колебаний (см. формулу (А.9)), из которого следует, что локальная фононная мода может обеспечить передачу энергии возбуждения иона однофононным процессом. Поэтому искомым оператор взаимодействия с колебаниями решетки получается дифференцированием оператора (7) только по радиальной переменной:

²⁾ Считаем, что линейные размеры иона $(\text{He}_2\mu)^+$ в два раза больше линейных размеров иона $(\text{He}\mu)^+$.

$$\widehat{V}_{Q-ph} = \frac{1}{(2K-1)(2K+3)} \frac{12\alpha e}{r^7} \times \\ \times Q_{\alpha\beta} \left(\frac{3}{2} (\widehat{K}_\alpha \widehat{K}_\beta + \widehat{K}_\beta \widehat{K}_\alpha) - \delta_{\alpha\beta} K(K+1) \right) \hat{u}, \quad (8)$$

где оператор радиального смещения атомов решетки определяется формулой, вытекающей из результатов Приложения Б:

$$\hat{u} = \frac{1}{r} \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega(k)R_B}} e^{-ikr} (\hat{b}_k^\dagger + \hat{b}_k). \quad (9)$$

Здесь ρ — удельная масса кристалла, $\omega(k)$ — частота фонона, R_B — характерный радиус области кристалла, деформированной положительным зарядом

Операторы рождения \hat{b}_k^\dagger и уничтожения \hat{b}_k фононов удовлетворяют коммутационному соотношению $[\hat{b}_{k'}, \hat{b}_k^\dagger] = \delta_{k',k}$.

3. РЕЛАКСАЦИЯ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ

В результате взаимодействия (9) ион может изменить вращательный момент и испустить один радиальный фонон. Заметим, что в силу принципа Паули вращательный момент линейного иона и полный спин ядер гелия связаны между собой. Поэтому для иона $(\text{He}_2\mu)^+$ возможно изменение вращательного момента, только если $\Delta K = 2$, тогда как для иона $(\text{He}\mu)^+$ таких запретов нет и возможно $\Delta K = 1, 2$.

Вероятность перехода из начального состояния иона $|i\rangle = |K, M\rangle$ в конечное состояние $|f\rangle = |K', M'\rangle$ определяется золотым правилом Ферми:

$$dw_{if} = \\ = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{M'} \left| \langle n_{ph} + 1 | \langle K', M' | \widehat{V}_{Q-ph} | K, M \rangle | n_{ph} \rangle \right|^2 \times \\ \times \delta(E_i - E_f) dv_f, \quad (10)$$

где учтено испускание одного фонона, dv_f — число состояний радиальных фононов с волновым вектором k , $|n_{ph}\rangle$ — состояние фононной подсистемы,

$$E_i - E_f = \hbar\omega_r K(K+1) - \hbar\omega_r K'(K'+1) - \hbar\omega(k) = \\ = 2\hbar\omega_r(2K-1) - \hbar\omega(k),$$

$\omega(k)$ — частота испущенного фонона с волновым вектором k , $\hbar\omega_r = B_r$ — вращательный квант энергии молекулярного иона. Для ионов $({}^3\text{He}_2\mu)^+$ и $({}^4\text{He}_2\mu)^+$ вращательный квант энергии равен соответственно 4.64 К и 3.48 К. Здесь положено изменение вращательного квантового числа $K' = K - 2$.

Вычисление матричных элементов в общем виде приводит к весьма громоздким выражениям, что представляется избыточным для проведения подобного рода оценок. Поэтому рассмотрим случай, когда выражения имеют наиболее простой вид, а именно, оставим только диагональную по проекции вращательного момента часть оператора взаимодействия (7), тогда оператор взаимодействия определяется только проекцией вращательного момента на ось иона z . Вычисление матричного элемента по вращательным состояниям иона сводится к интегралу:

$$\langle K', M | \widehat{V}_{Q-ph} | K, M \rangle \sim \langle K', M | (3n_z^2 - 1) | K, M \rangle = \\ = -\sqrt{\frac{16\pi}{5}} \int Y_{K'M}^* Y_{20} Y_{KM} dO = \\ = (-1)^{M_i K - K'} 2\sqrt{(2K+1)(2K'+1)} \times \\ \times \begin{pmatrix} K' & 2 & K \\ -M & 0 & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K' & 2 & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Здесь учтена связь функции $3n_z^2 - 1$ и сферической функции $Y_{20}(\theta, \varphi)$:

$$3n_z^2 - 1 = -\sqrt{\frac{16\pi}{5}} Y_{20}(\theta, \varphi),$$

а также известное выражение для интеграла от трех сферических функций (см., например, [23]).

Выполняя интегрирование формулы (10) и суммирование по N_1 ближайшим соседям (первой координационной сферы) для $K' = K - 2$, получаем

$$w_{K \rightarrow K-2} = \frac{N_1}{R_1^{16}} \frac{C^2 B(K)}{2B_r \rho} \left[n(2B_r(2K-1)) + 1 \right] \times \\ \times \left(\frac{d\omega(k)}{dk} \right)^{-1} \Big|_{\omega=2\omega_r(2K-1)}, \quad (12)$$

где $C = 12\alpha e Q$, а R_1 , как и выше, обозначает радиус первой координационной сферы,

$$B(K) = \frac{9K(K-1)^2}{(2K+1)(2K-1)^2(2K-3)} \times \\ \times \left[K^2 - \frac{14}{15}(K-2) + \frac{5K}{2K-3} \right],$$

$n(2B_r(2K-1))$ и $d\omega/dk$ — соответственно функция распределения и плотность спектра радиальных фононов.

Для оценки величины скорости термализации по вращательным состояниям положим, что

$$B(K) \approx \frac{9}{16} K, \quad K \gg 1,$$

закон дисперсии для радиальных фононов оставим квадратичным, $\omega(k) = \omega_0 + Bk^2$ (см. формулу (А.9)), хотя это приближение справедливо только в длинноволновом пределе. Несмотря на то что $\omega_r \approx \omega_0$, для больших значений вращательного квантового числа можно считать при $T \leq 1$ К значение бозевской функции распределения $n(2B_r(2K-1)) \ll 1$. Таким образом, скорость переходов с верхних возбужденных вращательных уровней энергии не зависит от температуры и после подстановки известных численных значений параметров может быть представлена в виде

$$w_{K \rightarrow K-2} \Big|_{K \gg 1} \sim 10^9 \sqrt{K}. \quad (13)$$

Полагая, что $K \lesssim 10$ для верхнего возбужденного вращательного уровня, получаем оценку времени перехода с верхних возбужденных вращательных уровней энергии на нижние с $K = 1$ для ортоиона и $K = 0$ для параиона: $\tau_{rot} \sim 10^{-9} - 10^{-8}$ с.

4. РЕЛАКСАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ

Оценим теперь скорость переходов между уровнями энергии колебательного спектра. Заметим, что для иона $(\text{He}_2\mu)^+$ возможны два типа колебаний: симметричное и антисимметричное. При этом антисимметричные колебания имеют частоту почти на порядок больше частоты симметричных колебаний. Поэтому будем рассматривать только переходы между состояниями симметричных колебаний. Взаимодействие с решеткой также будет осуществляться через квадрупольное взаимодействие. Направим ось z по оси иона и оставим в операторе квадрупольного момента только линейные по смещениям ядер члены, тогда оператор колебательно-фононного взаимодействия имеет вид

$$\hat{V}_{v-ph} = \frac{12\alpha e}{r^7} Q_0 \frac{a_0}{R_0} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \hat{a} (3n_z^2 - 1), \quad (14)$$

где \hat{a}^\dagger и \hat{a} — соответственно повышающий и понижающий операторы в осцилляторной составляющей гамильтониана иона, $a_0 = \sqrt{\hbar/M_{\text{He}}\omega_A}$ — характерная единица длины для колебаний иона, ω_A — частота симметричных колебаний.

Оператор (14) понижает колебательное число v на единицу. Вероятность перехода в единицу време-

ни между уровнями колебательного спектра также определяется с помощью золотого правила Ферми:

$$dw_{v \rightarrow v-1} = \frac{2\pi}{\hbar} N_1 C^2 \left(\frac{a_0}{R_0} \right)^2 \frac{1}{R_1^{16}} \frac{v}{2\rho\omega(k)} \times \\ \times \left[n(\omega(k)) + 1 \right] (3n_z^2 - 1)^2 \delta(\omega_A - \omega(k)) \frac{dk}{2\pi} \frac{dO}{4\pi}, \quad (15)$$

где ρ — удельная плотность кристалла. После выполнения интегрирования по состояниям фононов и усреднения по углам получаем

$$w_{v \rightarrow v-1} = N_1 C^2 \left(\frac{a_0}{R_0} \right)^2 \frac{v}{5\rho\omega(k)R_1^{16}} \times \\ \times \left[n(\omega_A) + 1 \right] \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{\omega=\omega_A}^{-1}. \quad (16)$$

Формулы (12) и (16) позволяют установить связь скоростей переходов между колебательными и вращательными состояниями:

$$\frac{w_{v \rightarrow v-1}}{w_{K \rightarrow K-2}} = \frac{2}{5} \left(\frac{a_0}{R_0} \right)^2 \frac{v\omega_r}{B(K)\omega_A} \times \\ \times \sqrt{\frac{2\omega_r(2K-1) - \omega_0}{\omega_A - \omega_0}} \frac{n(\omega(k)) + 1}{n(2\omega_r(2K-1)) + 1}. \quad (17)$$

Подставляя известные значения параметров для больших K , получаем

$$\frac{w_{vibr}}{w_{rot}} \sim \frac{v}{\sqrt{K}} \left(\frac{\omega_r}{\omega_A} \right)^{3/2}. \quad (18)$$

Как видим, скорости одного порядка, и для нижних уровней энергии они сравниваются.

Таким образом, проведенные оценки показывают, что молекулярный ион $(\text{He}_2\mu)^+$ термализуется за время $\tau \sim 10^{-9} - 10^{-8}$ с. Для иона $(\text{He}\mu)^+$ время термализации примерно на порядок меньше. Действительно, согласно формулам (12) и (16), получаем

$$\left(\frac{\omega_r}{\omega_A} \right)^{3/2} \sim \left(\frac{M_{\text{He}}}{m_\mu} \right)^{3/4} \approx 10.$$

Если предположить, что в момент образования молекулярного иона все спиновые состояния ядер ^3He равновероятны, в результате термализации ион $(\text{He}_2\mu)^+$ будет находиться с вероятностью $1/4$ в парасостоянии с $K = 0$ и с вероятностью $3/4$ в ортосостоянии с $K = 1$. Молекулярный ион $(\text{He}\mu)^+$ термализуется полностью и находится в основном колебательно-вращательном состоянии с $K = 0$ и $v = 0$.

5. СНЯТИЕ ВЫРОЖДЕНИЯ ПО M

Несмотря на то что в результате процесса термализации ортоион остается с отличным от нуля вращательным моментом $K = 1$, вращения иона в обычном смысле не будет в силу значительного взаимодействия его квадрупольного момента с неоднородным полем кристалла (6). Это взаимодействие приведет к эффекту, который можно интерпретировать как «заторможенное» вращение. Рассмотрим, как проявляется этот эффект. Легко видеть, что оператор взаимодействия (7) снимает вырождение вращательных уровней энергии по проекции момента, поэтому теперь уровни энергии будут зависеть не только от L , но и от модуля его проекции, $E_{K,|M|}$. Вообще говоря, величина взаимодействия (6) имеет порядок вращательного кванта, поэтому применение теории возмущений может, на первый взгляд, показаться не совсем правомерным. Однако, поскольку до следующего возбужденного уровня энергии с $K = 3$ интервал энергии $\Delta E = E_3 - E_1 = 10B_r \gg \hbar\omega_0$, применение теории возмущений вполне оправдано.

Итак, оператор взаимодействия (7) приведет к расщеплению трехкратно вырожденного уровня на уровень с $M = 0$ и двукратно вырожденный уровень с симметричной и антисимметричной линейными комбинациями состояний для $M = \pm 1$. Поэтому поправки определяются диагональными матричными элементами:

$$\varepsilon^{(1)} = \langle K, M | \hat{V}_Q | K, M \rangle. \quad (19)$$

Подставляя выражение взаимодействия в виде (6) и используя известную формулу теории углового момента (см., например, [23]), получаем

$$\begin{aligned} \langle K, M | \hat{V}_Q | K, M \rangle &= -\frac{2\alpha e Q}{R_1^6} \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \times \\ &\times \int Y_{KM}^* Y_{20} Y_{KM} dO = \\ &= \frac{2\alpha e Q}{R_1^6} (-1)^M (2K+1) \times \\ &\times \begin{pmatrix} K & 2 & K \\ -M & 0 & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K & 2 & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= (-1)^{M+1} \frac{3M^2 - K(K+1)}{(4K^2 - 1)(2K+3)}. \end{aligned} \quad (20)$$

Для вращательного уровня энергии с $K = 1$ получаем величину расщепления

$$\Delta\varepsilon = \frac{4}{5} \frac{\alpha e Q}{R_1^6}.$$

Этот результат оказывается весьма существенным для определения спинового гамильтониана молекулярного иона.

6. СПИНОВЫЙ ГАМИЛЬТониАН ТЕРМАЛИЗОВАННОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ИОНА (${}^3\text{He}_2\mu$) $^+$

Заметим сразу, что, поскольку ион ($\text{He}\mu$) $^+$ успевает термализоваться за время жизни мюона, никаких сверхтонких взаимодействий в нем не будет, т. е. его спиновый гамильтониан определяется только энергией во внешнем магнитном поле не взаимодействующих между собой магнитных моментов мюона и ядра гелия. Таким образом, деполяризация спина мюона должна определяться только прямым магнитным диполь-дипольным взаимодействием с ядрами решетки, что, как отмечалось выше, не описывает экспериментально наблюдаемую картину. Поэтому можно утверждать, что экспериментальные данные указывают на образование именно молекулярного иона ($\text{He}_2\mu$) $^+$.

В самом общем случае гамильтониан сверхтонкого взаимодействия молекулярного иона (${}^3\text{He}_2\mu$) $^+$ во внешнем магнитном поле \mathbf{B} может быть записан в виде

$$\begin{aligned} H_{hfs} &= -2\mu_\mu \mathbf{B} \cdot (\hat{\mathbf{s}} + \zeta \hat{\mathbf{I}}) + (\Omega_1 \hat{\mathbf{s}} + \Omega_2 \hat{\mathbf{I}}) \cdot \hat{\mathbf{K}} + \\ &+ \Omega_N (\hat{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{B}) + \Omega g_K \left\{ K(K+1) \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{I}} - \right. \\ &\left. - \frac{3}{2} [(\hat{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{I}})(\hat{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{s}}) + (\hat{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{s}})(\hat{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{I}})] \right\}, \end{aligned} \quad (21)$$

где $\hat{\mathbf{s}}$ и $\hat{\mathbf{I}}$ — соответственно операторы спина мюона и суммарного спина ядер ${}^3\text{He}$,

$$g_K = -\frac{2}{(2K-1)(2K+3)}$$

— приведенный матричный элемент, $\zeta \approx 0.24$ — отношение магнитных моментов ${}^3\text{He}$ и μ^+ , Ω_1 и Ω_2 — константы, описывающие взаимодействие спин-вращение соответственно магнитных моментов мюона и ядер, Ω_N — частота прецессии вращательного момента иона, а константа Ω определяется формулой (3). Напомним, что в нашей задаче суммарный спин ядер $I = 1$.

Спиновый гамильтониан, по определению, есть диагональный матричный элемент оператора (21) по трем орбитальным состояниям

$$|0\rangle = |K = 1, M = 0\rangle, \quad (22)$$

$$|1, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|K=1, M=+1\rangle \pm |K=1, M=-1\rangle \right), \quad (23)$$

в которых он будет иметь различный вид. При этом для состояния (22) взаимодействие спин-вращение равно нулю в силу $M=0$, а для состояний (23) — из-за равного вклада состояний с противоположными знаками проекций момента. Таким образом, сверхтонкие взаимодействия в ионе (${}^3\text{He}_2\mu$)⁺ определяются только магнитным диполь-дипольным взаимодействием³⁾.

Направим ось z по внешнему магнитному полю \mathbf{B} , тогда спиновый гамильтониан для состояний (22), (23) можно записать в виде [24]

$$H_{|0\rangle} = -\omega(\hat{s}_z + \zeta\hat{I}_z) - \frac{4}{5}\Omega \times \left[\hat{s}_z\hat{I}_z - \frac{1}{4}(\hat{s}_+\hat{I}_- + \hat{s}_-\hat{I}_+) \right], \quad (24)$$

$$H_{|1,\pm\rangle} = -\omega(\hat{s}_z + \zeta\hat{I}_z) + \frac{2}{5}\Omega \times \left[\hat{s}_z\hat{I}_z - \frac{1}{4}(\hat{s}_+\hat{I}_- + \hat{s}_-\hat{I}_+) \right] \pm \frac{3}{10}\Omega(\hat{s}_+\hat{I}_+ + \hat{s}_-\hat{I}_-). \quad (25)$$

Здесь $\omega = \gamma_\mu B$ — частота прецессии спина мюона во внешнем магнитном поле B , $\hat{s}_\pm = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y$, $\hat{I}_\pm = \hat{I}_x \pm i\hat{I}_y$.

Как видно из приведенных выражений (24) и (25), спиновый гамильтониан имеет сильно анизотропный характер, а константы сверхтонкого взаимодействия для различных состояний различаются не только по величине, но и имеют разные знаки. Это, в частности, означает, что скорости деполяризации в различных состояниях также будут отличаться. Различные гамильтонианы определяют различную сверхтонкую структуру. Если для состояния (22) с $M=0$ уровни энергии могут быть представлены в аналитическом виде, то для состояний (23) простого аналитического решения для отличного от нуля магнитного поля нет.

В нулевом внешнем поле $\mathbf{B}=0$ все три гамильтониана (24), (25) имеют одинаковый спектр: три

двукратно вырожденных уровня энергии:

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{1 + \sqrt{3}}{5}\Omega, \quad \varepsilon_{3,4} = \frac{1 - \sqrt{3}}{5}\Omega, \quad (26)$$

$$\varepsilon_{5,6} = -\frac{2}{5}\Omega.$$

Для гамильтониана (24) приведем аналитические выражения для уровней энергии в отличном от нуля внешнем магнитном поле:

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{1}{5}\Omega \mp \zeta\omega + \sqrt{3\left(\frac{\Omega}{5}\right)^2 \pm \frac{2}{5}\Omega(1-\zeta)\omega + (1-\zeta)^2\omega^2},$$

$$\varepsilon_{3,4} = \frac{1}{5}\Omega \pm \zeta\omega - \sqrt{3\left(\frac{\Omega}{5}\right)^2 \mp \frac{2}{5}\Omega(1-\zeta)\omega + (1-\zeta)^2\omega^2},$$

$$\varepsilon_{5,6} = -\frac{2}{5}\Omega \pm (1+2\zeta)\omega. \quad (27)$$

7. ЧАСТОТА ПЕРЕВОРОТА СПИНА ЯДРА АТОМА ${}^3\text{He}$ В МОЛЕКУЛЯРНОМ ИОНЕ

Температурная зависимость скорости деполяризации спина мюона может быть объяснена механизмом спин-фононного взаимодействия. Действительно, ядро атома ${}^3\text{He}$, связанное в ионе, испытывает обменное взаимодействие с атомами первой координационной сферы, а проекции спинов ядер первой координационной сферы могут изменяться благодаря спин-фононному взаимодействию в решетке. Оператор спин-фононного взаимодействия можно записать, разложив обменный интеграл в операторе спин-обменного взаимодействия (4) в ряд по относительному смещению ξ ядер:

$$V_{s-ph} = -\left(\frac{\partial J(\mathbf{R}_{12})}{\partial \mathbf{R}_{12}} \xi \right) \hat{\mathbf{i}}_1 \cdot \hat{\mathbf{i}}_2. \quad (28)$$

Запишем гамильтониан, описывающий спин-фононное взаимодействие иона ($\text{He}_2\mu$)⁺ с колебаниями решетки:

$$H = H_0 + H_{ph} + V_1 + V_2. \quad (29)$$

Здесь \hat{H}_0 — гамильтониан сверхтонкого взаимодействия в ионе, вид которого зависит от состояния самого иона в кристалле и определяется формулами (24), (25); H_{ph} — гамильтониан подсистемы фононов, \hat{V}_1 и \hat{V}_2 — операторы спин-фононного взаимодействия (28) соответственно между ионом и первой

³⁾ Заметим, что, поскольку для ${}^4\text{He}$ возможны состояния только с четным значением K , в основном состоянии взаимодействие спин-вращение отсутствует. Поэтому в кристаллической фазе ${}^4\text{He}$ отсутствует механизм деполяризации, реализующийся в твердом водороде [15, 16, 21].

координационной сферой и между первой и второй координационными сферами.

Для нахождения частоты переверотов спина ядра атома ${}^3\text{He}$, связанного в ионе, воспользуемся известной формулой второго порядка теории возмущений для вероятности переходов в непрерывном спектре (см., например, [23]):

$$dw_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_n \frac{\langle i|V_1|n\rangle\langle n|V_2|f\rangle}{E_i - E_n} \right|^2 \times \delta(E_i - E_f) d\nu_f. \quad (30)$$

В начальном состоянии $|i\rangle$ ион находится на некотором уровне энергии сверхтонкой структуры, характерная величина которого $\hbar\Omega$ определяется магнитным диполь-дипольным взаимодействием в ионе. В промежуточном состоянии изменяется спиновое состояние иона и возбуждается один фонон с энергией $\hbar\omega_1$. В конечном состоянии поглощается фонон с энергией $\hbar\omega_2$ и изменяются спиновые состояния ядер первой и второй координационной сфер. Состояние системы «ион + ${}^3\text{He}$ первой координационной сферы + ${}^3\text{He}$ второй координационной сферы» задается вектором

$$|i\rangle = |m_s\rangle|I, M_I\rangle|n_{ph}\rangle|i_{1z}\rangle|i_{2z}\rangle, \quad (31)$$

где $|m_s\rangle$ — проекция спина мюона, $|I, M_I\rangle$ — спиновое состояние ядер ${}^3\text{He}$ в ионе ($M_I = 0, \pm 1$), $|n_{ph}\rangle$ — состояние фононной подсистемы; $|i_{1z}\rangle$ и $|i_{2z}\rangle$ — проекции спинов ядер атомов ${}^3\text{He}$ соответственно в первой и второй координационных сферах.

Относительные смещения ядер решетки, обусловленные акустическими фононами, малы. Поэтому оценка скорости переверота спина мюона из формулы (30), обусловленная спин-фононным взаимодействием с акустическими фононами, дает пренебрежимо малую величину. Однако ситуация существенно изменяется, если учесть спин-фононное взаимодействие с радиальными фононами локальной моды. Оператор спин-фононного взаимодействия в этом случае в соответствии с результатами Приложения Б имеет вид

$$\hat{V}_{s-ph} = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial J(R_{\alpha\beta})}{\partial R_{\alpha\beta}} \times \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega(k)R_B}} e^{-ikr} (b_k^\dagger + b_k) (\hat{\mathbf{i}}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{i}}_\beta), \quad (32)$$

где производная от обменного интеграла берется по относительному расстоянию $R_{\alpha\beta}$ между ядрами гелия в ионе и в первой координационной сфере или

между ядрами первой и второй координационных сфер.

Спин ядра ${}^3\text{He}$ в ионе может изменить проекцию (перевернуться) только при условии сохранения полного спина I . Поскольку обменное взаимодействие (4) сохраняет суммарный спин взаимодействующих ядер, такой переход возможен только для состояний с $M_I = 0$. Суммирование по всем равновероятным спиновым состояниям в формуле (30) для вероятности перехода дает множитель $1/2$.

Спин ядра ${}^3\text{He}$ в ионе может эффективно обмениваться с N_1 спинами ядер первой координационной сферы, а спин ядра ${}^3\text{He}$ первой координационной сферы — с N_2 спинами второй координационной сферы.

Поскольку в конечном состоянии $|f\rangle$ остается один фонон с энергией $\hbar\omega_1$ и поглощается фонон с энергией $\hbar\omega_2$, число таких состояний равно

$$d\nu_f = \frac{R_B^2 dk_1 dk_2}{\pi^2}.$$

После некоторых преобразований получаем формулу для вычисления частоты переверотов спина ядра ${}^3\text{He}$ в ионе

$$\nu = \frac{\pi A}{\rho^2 \hbar^2} \iint \frac{[n(\omega_1) + 1]n(\omega_2)}{(\omega_1 - \Delta)^2 \omega_1 \omega_2} \times \delta(\omega_1 - \Delta - \omega_2) \frac{dk_1 dk_2}{\pi^2}, \quad (33)$$

где $n(\omega)$ — функция распределения радиальных фононов, $\Delta \sim \Omega$ — частота перехода между состояниями сверхтонкой структуры иона,

$$A = \frac{1}{4} N_1 N_2 \left(\frac{1}{R_1^2} \frac{\partial J_1}{\partial R_{i1}} \right)^2 \left(\frac{1}{R_2^2} \frac{\partial J_2}{\partial R_{12}} \right)^2,$$

где J_1 — интеграл обменного взаимодействия между ядром иона и ядром первой координационной сферы, расстояние между которыми R_{i1} , а J_2 — интеграл обменного взаимодействия между ядрами первой и второй координационных сфер, расстояние между которыми R_{12} ; R_1 и R_2 — соответственно радиусы первой и второй координационных сфер.

Мы здесь учли также, что $E_n \geq \hbar\omega_1 \gg E_i$ при взаимодействии с радиальными фононами (E_i — энергия сверхтонкого взаимодействия в ионе). Таким образом, для знаменателя в формуле (30) можно считать, что $|E_i - E_n| \approx E_n \approx \hbar\omega_1$.

При дальнейшем преобразовании формулы (33) следует учесть закон дисперсии (А.9) радиальных фононов, тогда

$$dk = \frac{d\omega}{2\sqrt{B(\omega - \omega_0)}}.$$

После интегрирования по переменной ω_2 получаем

$$\nu = \frac{A}{4\pi\mathcal{B}(\rho\hbar)^2} \int_{\omega_0+\Delta}^{\infty} \frac{[n(\omega_1) + 1]n(\omega_1 + \Delta)}{(\omega_1 - \Delta)^3\omega_1} \times \\ \times \frac{d\omega_1}{\sqrt{(\omega_1 - \omega_0)(\omega_1 - \Delta - \omega_0)}}. \quad (34)$$

Вводя новую переменную интегрирования $x = \omega_1 - \omega_0$, учитывая, что $\omega_1 \gg \Delta$, и считая функции распределения радиальных фононов равновесными, получаем выражение для частоты переворотов спина ядра ${}^3\text{He}$ в ионе:

$$\nu = \frac{A}{4\pi\mathcal{B}(\rho\hbar)^2} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{T}\right) \times \\ \times \int_{\Delta}^{\infty} \frac{\exp(-\hbar x/T)}{\{1 - \exp[-\hbar(\omega_0 + x)/T]\}^2} \times \\ \times \frac{dx}{(\omega_0 + x)^4 \sqrt{x(x - \Delta)}}. \quad (35)$$

Дальнейшие аналитические выкладки можно провести в предельных случаях низкой ($T \ll \hbar\omega_0$) и высокой ($T \gg \hbar\omega_0$) температуры. Рассмотрим сначала случай низкой температуры, когда основной вклад в интеграл будут вносить значения $\Delta \leq x \ll \omega_0$. Поскольку $\hbar\Delta \ll T$, интеграл сильно упрощается и мы получаем простое выражение:

$$\nu \approx \frac{A}{4\pi\mathcal{B}(\rho\hbar)^2\omega_0^4} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{T}\right) \int_{\Delta}^{\omega_0} \frac{dx}{\sqrt{x(x - \Delta)}} \approx \\ \approx \frac{A \ln(4\omega_0/\Delta)}{4\pi\mathcal{B}(\rho\hbar)^2\omega_0^4} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{T}\right). \quad (36)$$

В предельном случае высокой температуры все показатели экспонент малы, поэтому в числителе подынтегрального выражения экспоненты можно заменить на единицы, а в знаменателе — разложить по малому показателю экспоненты, при этом верхний предел интегрирования заменяется на частоту Дебая ω_D радиальных фононов. В результате имеем

$$\nu \approx \frac{A}{4\pi\mathcal{B}(\rho\hbar)^2} \frac{T^2}{\hbar^2\omega_0^6} \ln \frac{4\omega_D}{\Delta}. \quad (37)$$

Получим теперь численную оценку частоты переворотов.

Нахождение обменных интегралов для гелия — особая задача, и мы не будем здесь пытаться вычис-

лить $J_1(R_{i1})$. Для оценки достаточно воспользоваться представлением $J(R)$ в виде гауссовой экспоненты (см., например, [8]):

$$J(R) = J_0 \exp\left(-\frac{\alpha_0^2}{2}(R^2 + \lambda^2)\right),$$

где α_0^{-1} — амплитуда нулевых колебаний ядер решетки, параметр λ — «жесткий» радиус атома. Константа J_0 определяется температурой Дебая Θ и интегралом перекрытия и в данной примитивной модели равна

$$J_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \Theta \alpha_0 \lambda.$$

Для ${}^3\text{He}$ имеем $J_0 \approx 1$ мК. Тогда

$$\frac{\partial J_2}{\partial R_{12}} \approx -\alpha_0^2 R_{12} J_0, \quad (38)$$

где $\alpha_0^2 \approx 1.3 \cdot 10^{16} \text{ см}^2$, $R_{12} \approx a \approx 3.7 \text{ \AA}$. Положим также

$$\frac{\partial J_1}{\partial R_{i1}} = \varkappa \frac{\partial J_2}{\partial R_{12}}.$$

Для ядра ${}^3\text{He}$ в молекулярном ионе $(\text{He}_2\mu)^+$ обмен с ядрами решетки происходит не так эффективно, поскольку амплитуда нулевых колебаний в ионе существенно меньше, поэтому следует ожидать, что $\varkappa \ll 1$. Получаем также для координационных чисел ГЦК-решетки $N_1 N_2 = 16$ и $\ln(4\omega_0/\Omega) \geq 10$.

Нас будет интересовать область низких температур $T \leq 1$ К. В этом случае, как видно из формулы (35), частота переворотов сильно зависит от параметра ω_0 . Оставляя этот параметр неопределенным в показателе экспоненты и оценивая предэкспоненциальный множитель, для наиболее интересной области низких температур получаем

$$\nu \sim \varkappa^2 v_0^2 10^{10} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{T}\right), \quad (39)$$

где v_0 — удельный объем кристалла. Видно, что в зависимости от соотношения между величинами параметров \varkappa , ω_0 и T могут выполняться соотношения либо $\nu \leq \Omega$, либо $\nu \geq \Omega$, и, таким образом, появляется сильная зависимость скорости деполяризации спина мюона от температуры.

8. ДЕПОЛЯРИЗАЦИЯ СПИНА МЮОНА В МОЛЕКУЛЯРНОМ ИОНЕ (${}^3\text{He}_2\mu$) $^+$

Поскольку частота переворотов спина ядра атома ${}^3\text{He}$ может изменяться в широком диапазоне в зависимости от температуры и других параметров, для описания процессов деполяризации спина мюона необходимо рассмотреть релаксационное уравнение. Для описания релаксации поляризации спина мюона, обусловленной взаимодействием с флуктуирующими полями, создаваемыми магнитными моментами ядер, воспользуемся уравнением Вангснесса–Блоха (см., например, [7]), которое хорошо описывает в этом случае процессы деполяризации. Для молекулярного иона ($\text{He}_2\mu$) $^+$ уравнение имеет вид

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H_0, \hat{\rho}] = 2\nu \left(\hat{\mathbf{i}}_1 \hat{\rho} \hat{\mathbf{i}}_1 + \hat{\mathbf{i}}_2 \hat{\rho} \hat{\mathbf{i}}_2 - \frac{3}{2} \hat{\rho} \right). \quad (40)$$

Здесь $\hat{\rho}$ — спиновая матрица плотности иона, H_0 — спиновый гамильтониан иона вида (24) или (25), $\hat{\mathbf{i}}_{1,2}$ — спиновые операторы ядер гелия в ионе, а ν — частота переворотов, которая в случае низких температур определяется формулой (36). Прямым механизмом деполяризации спина мюона пренебрегаем.

В общем случае произвольного соотношения между внешним магнитным полем \mathbf{B} , энергией магнитного диполь-дипольного взаимодействия и частотой ν переворотов аналитическое решение уравнения (40) не существует. В случае, когда частота переворотов мала (меньше частот переходов между уровнями сверхтонкой структуры), скорость релаксации спина мюона просто равна частоте ν , а поведение поляризации определяется сложной многочастотной картиной, которая может проявляться как эффективная быстрая деполяризация [18]. Как уже отмечалось выше, получаемая при этом эффективная скорость деполяризации не зависит от температуры и существенно превышает экспериментально

наблюдаемую. Однако оценки показывают, что такой предельный случай может наблюдаться только при весьма низких температурах, которые, возможно, не были достигнуты в экспериментах.

Рассмотрим случай сильного внешнего поля, $\omega \gg \Omega$, когда могут быть получены простые аналитические формулы, описывающие релаксацию поперечной компоненты поляризации спина мюона. В гамильтониане (24), (25) следует оставить только секулярную часть магнитного диполь-дипольного взаимодействия, которая имеет одинаковый вид во всех трех случаях:

$$H_0 = -\omega(\hat{s}_z + \zeta \hat{I}_z) - \tilde{\Omega} \hat{s}_z \hat{I}_z, \quad (41)$$

где

$$\tilde{\Omega} = \begin{cases} -4\Omega/5 & \text{для состояния (22),} \\ 2\Omega/5 & \text{для состояний (23).} \end{cases} \quad (42)$$

Уравнение (40) в секулярном приближении с гамильтонианом (41) приводит к сохранению продольной поляризации спина мюона и релаксации со скоростью 2ν суммарной продольной поляризации спинов ядер гелия в ионе. Поляризацию суммарного спина ядер гелия определим как

$$\mathbf{P}^I = \text{Tr} \hat{\mathbf{I}} \hat{\rho} \quad \text{или} \quad P_z^I = \text{Tr} \hat{I}_z \hat{\rho}, \quad P_{\pm}^I = \text{Tr} \hat{I}_{\pm} \hat{\rho}. \quad (43)$$

Окончательно получаем систему пяти связанных уравнений для поперечных компонент поляризации спина мюона и суммарного спина ядер гелия, а также для трех компонент корреляционного тензора:

$$\begin{aligned} Q_1 \equiv Q_{+z} &= \text{Tr} \hat{s}_+ \hat{I}_z \hat{\rho}, & Q_2 \equiv Q_{z+} &= \text{Tr} \hat{s}_z \hat{I}_+ \hat{\rho}, \\ T \equiv T_{+z} &= \text{Tr} \hat{s}_+ \hat{I}_z^2 \hat{\rho}, \end{aligned} \quad (44)$$

которую удобно записать в матричном виде [24]:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} P_+ \\ P_+^I \\ Q_1 \\ Q_2 \\ T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\omega & 0 & i2\tilde{\Omega} & 0 & 0 \\ 0 & -i\zeta\omega - 2\nu & 0 & i\tilde{\Omega} & 0 \\ 0 & 0 & -i\omega - 2\nu & 0 & i\tilde{\Omega} \\ 0 & i\tilde{\Omega}/4 & 0 & -i\zeta\omega - 2\nu & 0 \\ 2\nu & 0 & i\omega & 0 & -i\omega - 2\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_+ \\ P_+^I \\ Q_1 \\ Q_2 \\ T \end{pmatrix}. \quad (45)$$

Решение системы уравнений (45) дает четыре быстрозатухающих решения с малыми амплитудами (корни характеристического уравнения равны $\lambda_{1,2} = -2\nu - i(\zeta\omega \pm \tilde{\Omega}/2)$, $\lambda_3 = 2\lambda_4 \approx -2\nu$) и одно

медленнозатухающее решение с амплитудой, равной единице, с точностью до $\tilde{\Omega}/\nu$. Таким образом, временная зависимость поперечной поляризации спина мюона в сильном магнитном поле определяется

простой формулой:

$$P_+(t) = e^{-\Lambda t - i\omega t} P_+(0), \quad (46)$$

где

$$\Lambda = \frac{4\nu\tilde{\Omega}^2}{8\nu^2 + \omega\tilde{\Omega}}. \quad (47)$$

Из полученных формул (46), (47) следует, что в состоянии (22) деполаризация поперечной поляризации спина мюона происходит примерно в четыре раза быстрее, чем в состояниях (23).

Считая все три состояния (22) и (23) равновероятными, для временной зависимости поперечной поляризации ансамбля мюонов можем записать формулу

$$P_{\perp}(t) = \frac{1}{3}P_+^{(0)}(t) + \frac{2}{3}P_+^{(\pm 1)}(t), \quad (48)$$

где первое слагаемое описывает поляризацию в состоянии (22), а второе — в состояниях (23). Таким образом, обработка экспериментальных результатов с помощью одной экспоненты (46) оказывается некорректной.

9. ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Внешнее электрическое поле в экспериментах существенно меньше поля, создаваемого ионом на ближайших соседях, однако оно нарушает сферическую симметрию, что может привести к изменению спинового гамильтониана и, соответственно, скорости деполаризации. Действительно, во внешнем электрическом поле \mathcal{E} появляется составляющая наведенного дипольного момента атомов гелия решетки, параллельная внешнему полю, и дополнительное слагаемое

$$\delta\varphi = \frac{\alpha(\mathcal{E} \cdot \mathbf{r})}{r^3} \quad (49)$$

в скалярном потенциале. В соответствии с этим добавка (49) к скалярному потенциалу приведет к дополнительному вкладу в энергию взаимодействия квадрупольного момента иона с неоднородным полем, создаваемым наведенными дипольными моментами:

$$\delta U [\text{эрг}] \sim \frac{1}{R^4} \alpha e R_0^2 \mathcal{E} \approx 0.4 \cdot 10^{-20} \mathcal{E}.$$

В отсутствие внешнего магнитного поля у иона появляется выделенное направление для оси квантования вращательного момента, совпадающее с направлением внешнего электрического поля. Для поля $\mathcal{E} = 1$ кВ/см эта энергия того же порядка, что и

энергия магнитного диполь-дипольного взаимодействия в ионе и, соответственно, энергия магнитного момента мюона в магнитном поле $B \approx 50$ Гс. Возникает ситуация, аналогичная влиянию квадрупольного момента ядер на поведение поляризации спина мюона в μSR -экспериментах в нормальных металлах со спинами ядер $I > 1/2$ (см., например, [7]). Таким образом, если $\delta U > \hbar\omega$, в спиновом гамильтониане (21) оси квантования для спинов и вращательного момента не совпадают и он зависит от угла ϑ между внешним электрическим полем \mathcal{E} и магнитным полем \mathbf{B} . В интересующей нас области значений внешнего магнитного поля секулярное приближение несправедливо, поэтому невозможно представить простое аналитическое решение. Однако, если выбрать в качестве невозмущенного гамильтониана только взаимодействие магнитных моментов с внешним магнитным полем, в секулярной части гамильтониана (41) появится эффективная зависимость параметра $\tilde{\Omega}$ от угла ϑ :

$$\tilde{\Omega}(\vartheta) = \tilde{\Omega}(0) \left(1 - \frac{3}{2} \sin^2 \vartheta\right). \quad (50)$$

Подчеркнем, что в этом случае формулы (47) и (48) становятся неприменимыми.

Таким образом, в слабом магнитном поле должен проявиться интересный эффект зависимости скорости деполаризации от взаимной ориентации полей \mathcal{E} и \mathbf{B} . В имеющихся экспериментах [2, 3] поля были параллельны и магнитное поле было сильным ($\delta U < \hbar\omega$), поэтому данный эффект не мог наблюдаться.

10. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описанный механизм деполаризации позволяет объяснить природу роста скорости деполаризации при $T < 1$ К. Плато при $T > 1$ К определяется прямым диполь-дипольным взаимодействием магнитных моментов мюона и ядер гелия решетки, ослабленным за счет обменного взаимодействия между ядрами решетки. Имеющийся экспериментальный материал в виде графиков, представленных на рисунке, позволяет провести только качественное сравнение с теоретическими результатами. Выберем кривую для удельного объема $v_0 = 21.3$ см³, из которой следует, что $\Lambda = 0.5 \cdot 10^5$ с⁻¹ при $T_1 = 0.75$ К, $\Lambda = 1.8 \cdot 10^5$ с⁻¹ при $T_2 = 0.6$ К. Положим для

дальнейших оценок $\Omega = 3 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ и пренебрежем $\omega\Omega \ll \nu$. В результате имеем

$$\frac{\nu(T_1)}{\nu(T_2)} = \exp \left[-\hbar\omega_0 \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \right] \approx 3.6,$$

откуда следует

$$\hbar\omega_0 = 3k_B \ln 3.6 \approx 5 \cdot 10^{-16} \text{ эрг}$$

или

$$\omega_0 \approx 5 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1},$$

где k_B — постоянная Больцмана. Полученная величина параметра ω_0 находится в хорошем согласии с теоретической оценкой (А.9), приведенной в Приложении А.

Далее можно получить оценку значения параметра \varkappa , стоящего в предэкспоненциальном множителе в выражении (39):

$$\varkappa \approx 3 \cdot 10^{-5}, \quad (51)$$

которое также согласуется с теоретическими оценками. Действительно, энергия нулевых колебаний в ионе равна $\hbar\omega_A/2 \approx 1.7 \cdot 10^{-2}$ эВ. Принимая обменный интеграл в форме гауссовой экспоненты, имеем

$$\left(\frac{\alpha_i}{\alpha_0} \right)^2 = \frac{2\hbar\omega_A}{3\Theta} \approx 16,$$

где α_i — параметр обменного интеграла для ядер гелия в ионе и первой координационной сфере.

Обменное взаимодействие ядер ${}^3\text{He}$ в ионе и в решетке можно качественно оценить, используя колебательные волновые функции ядер для несимметричной потенциальной ямы с двумя минимумами. Однако, скорее всего, модельный потенциал Леннарда-Джонса не может удовлетворительно описывать взаимодействие ядер гелия и в ионе, находящемся в возбужденном вращательном состоянии, и в решетке, поэтому в такой простой модели претендовать на какие-либо количественные оценки изменения величины обменного интеграла вряд ли уместно. Приведенная выше оценка тем не менее показывает, что, поскольку параметры, характеризующие нулевые колебания, находятся в показателе экспоненты, можно ожидать, что соотношение $J_1/J_2 \sim 10^{-7}-10^{-5}$.

К сожалению, результаты расчетов пока не позволяют объяснить количественно зависимость скорости деполяризации от внешнего электрического поля, показанную на рисунке. Зависимость скорости деполяризации от электрического поля означает зависимость от него частоты ν переворота спина.

В представленной модели от электрического поля может зависеть только параметр ω_0 спектра фононов, который в случае низкой температуры входит в показатель экспоненты и в предэкспоненциальный множитель в выражении (36). Поскольку скорость деполяризации не зависит от направления приложенного поля, можно записать

$$\omega(\mathcal{E}) = \omega_0 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial \mathcal{E}^2} \mathcal{E}^2 = \omega_0 (1 + \gamma \mathcal{E}^2).$$

Зависимость частоты переворотов (36) от электрического поля имеет вид

$$\nu(\mathcal{E}) = \nu \left[1 - 2 \left(1 + \frac{\hbar\omega_0}{4T} \right) \gamma \mathcal{E}^2 \right].$$

Для оценки параметра γ сравним скорости деполяризации при $T = 0.75 \text{ К}$ в отсутствие электрического поля и в поле $\mathcal{E} = 1.5 \text{ кВ/см}$:

$$\frac{\Lambda(\mathcal{E})}{\Lambda(0)} \approx \frac{\nu(0)}{\nu(\mathcal{E})} \approx 1.1.$$

Экспериментальные результаты могут быть объяснены при большом значении параметра, $\gamma \sim 10^{-4}$, почти на три порядка превышающем теоретические оценки, приведенные в разд. 9. Более того, эксперимент дает линейную зависимость скорости деполяризации от электрического поля. Возможно, зависимость скорости деполяризации объясняется дрейфом зарядов. Дрейф зарядов относительно молекулярного иона в область первой координационной сферы приведет к уменьшению частоты переворотов ν и, соответственно, к увеличению скорости деполяризации. С другой стороны, эксперименты по изучению дрейфа положительных зарядов в гелии [10] и теоретические расчеты [12] показывают линейную зависимость скорости дрейфа в интересующей области значений электрического поля, что может говорить также о вкладе вакансий в величину наблюдаемой скорости деполяризации, несмотря на значительную деформацию в окрестности иона.

Увеличение скорости деполяризации при приближении температуры к точке плавления ($T > 1.5 \text{ К}$), может быть связано с образованием большого количества дефектов и, скорее всего, носит характер неоднородного уширения линии, однако это требует более детального экспериментального исследования.

Работа выполнена при совместной поддержке CRDF и Министерства образования и науки РФ по программе «Фундаментальные исследования и высшее образование» (BRHE) (грант № МО-011-0).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

В кристалле гелия кулоновское поле заряженно-го иона создает макроскопические деформации, что приводит к изменению фононного спектра и появлению локальной оптической моды. Спектр фононов можно найти в приближении непрерывной упругой среды [15, 16]. Рассмотрим колебания упругой изотропной среды в поле центральной силы:

$$\mathbf{F} = -2\alpha e^2 n \frac{\mathbf{r}}{r^6}, \quad (\text{A.1})$$

где α — поляризуемость атома He, n — плотность кристалла. Диэлектрическую проницаемость кристалла полагаем $\epsilon = 1$.

Поскольку сила (A.1) центральная, будем рассматривать только радиальные колебания, которые описываются вектором смещения

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = u(r) \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (\text{A.2})$$

Тогда для радиальных смещений имеем уравнение движения

$$\ddot{u} = c_{\parallel}^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2A}{r^6} u \right), \quad (\text{A.3})$$

где c_{\parallel} — продольная скорость звука, $A = 5\alpha e^2 n / c_{\parallel}^2 \rho$, ρ — удельная масса кристалла.

Для радиальных колебаний решение удобно искать в виде

$$u(r, t) = \frac{\chi(r, t)}{r}, \quad (\text{A.4})$$

где функция $\chi(r, t)$ слабо зависит от r и для нее выполняется «одномерное» преобразование Фурье:

$$\chi(r, t) = \iint_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega dk}{(2\pi)^2} e^{-i(kr - \omega t)} \chi_{\omega, k}, \quad (\text{A.5})$$

$$\chi_{\omega, k} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \int_0^{\infty} dr \sin(kr) \chi(r, t). \quad (\text{A.6})$$

Для фурье-амплитуд (A.6) можно получить интегральное уравнение:

$$(k_0^2 - k^2) \chi_k = 2 \int_0^k \chi_{k'} k' dk' - 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} \chi_{k'} \int_{R_1}^{\infty} \frac{dr}{r^2} \left(1 + \frac{A}{r^4} \right) \cos[(k - k')r]. \quad (\text{A.7})$$

Здесь $k_0 = \omega / c_{\parallel}$ и при интегрировании по r учтено, что $r \geq R_1$, где R_1 — радиус первой координационной сферы.

Уравнение (A.7) определяет спектр и амплитуды колебаний, однако оно не имеет аналитического решения в общем случае. В длинноволновой части спектра $kR_1 \ll 1$, поэтому уравнение (A.7) можно преобразовать в простое дисперсионное соотношение

$$\left(k_0^2 - k^2 - \frac{A}{3\pi R_1^6} \right) \chi_k = 0, \quad (\text{A.8})$$

откуда получается искомый спектр радиальных (оптических) фононов:

$$\omega = \omega_0 \sqrt{1 + \frac{c_{\parallel}^2}{\omega_0^2} k^2} \approx \omega_0 + \mathcal{B} k^2, \quad (\text{A.9})$$

где $\omega_0 = c_{\parallel} \sqrt{A/3\pi R_1^6} \sim 10^{12} \text{ c}^{-1}$, $\mathcal{B} = c_{\parallel}^2 / 2\omega_0 \sim 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$.

Как видно, фононный спектр (A.9) имеет щель $\omega_0 \gg \Omega$ (Ω — характерная частота сверхтонкого расщепления в ионе), поэтому спин ядра ^3He в первом порядке теории возмущений не может перевернуться с одновременным возбуждением радиального фонона. Однако переверт может произойти во втором порядке, если при этом одновременно перевернется спин ядра ^3He в следующей координационной сфере.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Для определения оператора смещения $\hat{\mathbf{u}}$ следует определить гамильтониан подсистемы радиальных фононов, который запишем исходя из лагранжиана этой подсистемы. Для распределенных систем удобнее вместо лагранжиана L вводить его плотность \mathcal{L} :

$$S = \int_a^b L dt = \iint \mathcal{L} dt dV. \quad (\text{B.1})$$

Уравнение движения для функции плотности лагранжиана будет иметь вид

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_{\alpha, k}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_{\alpha}} = 0, \quad (\text{B.2})$$

где $x_k = (t, x, y, z)$ — параметры «траектории», q_{α} — обобщенные координаты, $q_{\alpha, k} = \partial q_{\alpha} / \partial x_k$.

В нашем случае есть всего одна обобщенная полевая координата — радиальное смещение u , соответственно $x_k = (t, r)$ состоит из двух переменных. Таким образом, уравнение движения (B.2) принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_r} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} = 0. \quad (\text{B.3})$$

Согласно уравнению (А.3), для плотности лагранжиана имеем

$$\mathcal{L}(r, t; \dot{u}, u_r, u) = \frac{1}{2}\rho\dot{u}^2 - \frac{1}{2}\sigma_{rr}u_r^2 + \frac{1}{r^6}Au^2\rho c_{\parallel}^2. \quad (\text{Б.4})$$

Теперь, по определению, получаем функцию плотности гамильтониана:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \dot{u}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{u}} + u_r\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial u_r} - \mathcal{L} = \\ &= \frac{1}{2}\rho\dot{u}^2 - \frac{1}{2}\sigma_{rr}u_r^2 - \frac{1}{r^6}Au\rho c_{\parallel}^2. \end{aligned} \quad (\text{Б.5})$$

В дальнейшем в качестве обобщенного импульса удобно рассматривать только одну компоненту $\mathcal{P} = \rho\dot{u}$. Соответственно гамильтониан системы есть

$$\begin{aligned} H &= \int \mathcal{H}dV = \\ &= 4\pi \int_0^{\infty} dr r^2 \left(\frac{\mathcal{P}^2}{2\rho} - \frac{c_{\parallel}^2\rho u_r^2}{2} - Ac_{\parallel}^2\rho u^2 \right). \end{aligned} \quad (\text{Б.6})$$

Подставляя представление смещения через радиальную функцию (А.4), получаем

$$\begin{aligned} H &= 2\pi \int_0^{\infty} dr \left\{ \rho\dot{\chi}^2 - \rho c_{\parallel}^2 \left(\frac{\partial\chi}{\partial r} \right)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \rho c_{\parallel}^2 \frac{\partial\chi^2}{\partial r} - \frac{\rho c_{\parallel}^2}{r^2} \left(1 + \frac{A}{r^4} \right) \chi^2 \right\}. \end{aligned} \quad (\text{Б.7})$$

Подставляя компоненты Фурье (А.6) и делая преобразования, аналогичные проведенным выше при выводе дисперсионного уравнения (А.8), получаем гамильтониан (Б.7) в виде

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \left\{ \rho\dot{\chi}_k^2 + \rho c_{\parallel}^2 k^2 \chi_k^2 + \right. \\ &\quad \left. + 2\chi_k \left[\int_0^k \chi_{k'} k' dk' - 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} \chi_{k'} \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \int_0^{\infty} \frac{dr}{r^2} \left(1 + \frac{A}{r^4} \right) \cos((k-k')r) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{Б.8})$$

В длинноволновом пределе получаем обычную квадратичную форму, в которой зависимость $\omega(k)$ определяется из уравнения (А.9):

$$H = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dk [\rho\dot{\chi}_k^2 + \rho\omega^2(k)\chi_k^2]. \quad (\text{Б.9})$$

Для определения вида гамильтониана спин-фононного взаимодействия сформулируем полученные выше результаты для случая дискретного спектра, что позволит корректно ввести операторы, описывающие радиальные фононы. Переход к дискретному спектру осуществляется стандартным для полевой теории способом. Рассмотрим радиальные колебания в сфере радиуса R_B с граничными условиями $u(R_B) = 0$, поскольку на границе сферы никаких деформаций нет. Перепишем соотношения (А.5) и (А.6), определяющие преобразование Фурье радиальных функций для дискретного спектра:

$$\chi(r, t) = \sum_n e(-ik_n r)\chi_n, \quad (\text{Б.10})$$

$$\chi_n = 2 \int_0^{R_B} dr \sin(k_n r)\chi(r, t), \quad (\text{Б.11})$$

где $k_n = \pi n/R_B$.

Определения (Б.10) и (Б.11), очевидно, приводят везде в предыдущих соотношениях к простым заменам

$$\int \frac{dk}{2\pi} \rightarrow \sum \frac{1}{2R_B}, \quad \chi_k \rightarrow R_B\chi_n$$

и замене верхнего предела интегрирования по r на R_B . При этом основное уравнение (А.7) и гамильтониан (Б.8) остаются в неизменной форме. Запишем теперь гамильтониан для дискретного спектра в длинноволновом пределе:

$$\begin{aligned} H_{ph} &= \sum_n \left\{ \frac{(\rho\dot{\chi}_n)^2}{2\rho} + \frac{\rho\omega^2(k_n)}{2}\chi_n^2 \right\} = \\ &= \sum_n \frac{1}{2}\hbar\omega_n (\mathcal{P}_n^2 + \mathcal{Q}_n^2). \end{aligned} \quad (\text{Б.12})$$

Безразмерные обобщенный импульс и координата определены как обычно:

$$p_n = \rho\dot{\chi}_n = p_0\mathcal{P}_n, \quad q_n = \chi_n = q_0\mathcal{Q}_n, \quad (\text{Б.13})$$

где единицы обобщенного импульса и координаты соответственно равны

$$p_0 = \sqrt{\frac{\hbar\omega\rho}{R_B}}, \quad q_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega\rho R_B}}.$$

Дальнейшая процедура совершенно стандартна: вместо операторов обобщенных импульса и координаты, \mathcal{P}_n и \mathcal{Q}_n , вводим новые операторы

$$b = \frac{\hat{\mathcal{Q}} + i\hat{\mathcal{P}}}{\sqrt{2}}, \quad b^\dagger = \frac{\hat{\mathcal{Q}} - i\hat{\mathcal{P}}}{\sqrt{2}}. \quad (\text{Б.14})$$

Тогда гамильтониан (Б.12) принимает вид системы независимых осцилляторов.

Соответствующий оператор деформации (радиального смещения) имеет вид

$$\hat{u} = \frac{1}{r} \sum_n \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega(k_n)R_B}} \exp(-ik_n r)(b_n^\dagger + b_n). \quad (\text{Б.15})$$

Операторы рождения \hat{b}_n^\dagger и уничтожения \hat{b}_n фононов удовлетворяют коммутационному соотношению $[\hat{b}_{n'}, \hat{b}_n^\dagger] = \delta_{n',n}$. Переходя в формуле (Б.15) от суммирования по дискретной переменной n к суммированию по радиальному волновому вектору k , получаем формулу (9).

Оператор относительной деформации $\hat{\xi}$ определяется простым дифференцированием оператора (9) по r . Поскольку мы рассматриваем длинноволновый предел ($k_n R_{1,2} \ll 1$), в операторе (28) спин-фононного взаимодействия следует оставить только основные члены, наиболее медленно убывающие с ростом r на расстояниях, соответствующих радиусу второй координационной сферы, поэтому

$$\hat{\xi} \equiv \frac{\partial}{\partial r} \hat{u} \approx -\frac{\hat{u}}{r}.$$

Подставляя выражение для оператора относительной деформации в формулу (28), получаем окончательное выражение для оператора спин-фононного взаимодействия (32).

ЛИТЕРАТУРА

1. Е. Р. Красноперов, Е. Е. Меилихов, D. G. Eschenko et al., *Нур. Int.* **87**, 1011 (1994).
2. Е. П. Красноперов, Е. Е. Меилихов, Д. Герлах и др., *Письма в ЖЭТФ* **61**, 9647 (1995).
3. Е. Красноперов, Е. Е. Меилихов, С. Vaines et al., *Нур. Int.* **97/98**, 347 (1996).
4. Е. П. Красноперов, В. Г. Сторчак, С. Г. Барсов и др., *Письма в ЖЭТФ* **42**, 263 (1985).
5. Д. Г. Ещенко, Е. П. Красноперов, С. Г. Барсов и др., *Письма в ЖЭТФ* **48**, 568 (1988).
6. D. C. Walker, *Muon and Muonium Chemistry*, Cambridge University Press (1983).
7. В. П. Смилга, Ю. М. Белоусов, *Муонный метод исследования вещества*, Наука, Москва (1991).
8. R. Guyer, *Sol. St. Phys.* **23**, 413 (1969).
9. A. J. Dahm, in *Progress in Low Temp. Phys.*, Vol. IX, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1985), p. 9.
10. К. О. Кешишев, *ЖЭТФ* **72**, 521 (1977).
11. А. Ф. Андреев, А. Э. Мейерович, *ЖЭТФ* **67**, 1559 (1974).
12. А. Ф. Андреев, А. Д. Савищев, *ЖЭТФ* **96**, 1109 (1989).
13. P. G. Fournier and B. Lassier-Groves, *J. Phys. Lett.* **43**, L483 (1982).
14. С. Г. Потапов, Л. П. Суханов, *ФНТ* **16**, 1363 (1990).
15. Yu. M. Belousov and V. P. Smilga, *Нур. Int.* **106**, 63 (1997).
16. Ю. М. Белоусов, в сб. *Физика атомного ядра и элементарных частиц*, Санкт-Петербург, ПИЯФ (1998), с. 360.
17. Yu. M. Belousov and V. P. Smilga, *Physica B* **289–290**, 499 (2000).
18. Yu. M. Belousov, V. N. Gorbunov, and V. P. Smilga, *Нур. Int.* **65**, 829 (1990).
19. С. Г. Барсов, А. Л. Геталов, В. А. Гордеев и др., *Письма в ЖЭТФ* **41**, 275 (1985).
20. Ю. М. Белоусов, А. Л. Геталов, Е. П. Красноперов и др., *ЖЭТФ* **91**, 715 (1986).
21. Ю. М. Белоусов, В. П. Смилга, *ЖЭТФ* **106**, 1500 (1994).
22. Yu. M. Belousov, *Physica B* **374–375**, 321 (2006).
23. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Физматлит, Москва (1974).
24. Yu. M. Belousov, *Physica B* **374–375**, 336 (2006).