

Туннельно-термоактивационный механизм диффузии вакансий в квантовом кристалле

В.Д. Нацик^{1,2}, С.Н. Смирнов¹

¹Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Науки, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: smirnov@ilt.kharkov.ua

²Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61077, Украина
E-mail: natsik@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 27 апреля 2017 г., опубликована онлайн 27 августа 2017 г.

Рассмотрена модель вакансии в квантовом кристалле как псевдочастицы, которая имеет метастабильные квантовые состояния, локализованные на узлах решетки в потенциальных ямах кристаллического поля. Предполагается, что квантовую динамику такой вакансии можно описать в квазиклассическом приближении, а ее спектр состоит из широкой зоны и отщепленных от нее вниз одного или двух дискретных уровней. Диффузионное перемещение вакансии в объеме кристалла сводится к последовательности случайных туннельных и термически активированных скачков между узлами решетки. Показано, что температурная зависимость коэффициента диффузии вакансий имеет специфическую особенность: монотонное уменьшение при охлаждении с резким переходом от экспоненциального закона, характерного для высокотемпературной термически активированной диффузии, к атермическому туннельному процессу в области предельно низких температур. Аналогичная особенность недавно зарегистрирована при экспериментальном изучении массопереноса в кристаллах ^4He и ^3He (*ФНТ* **41**, 223 (2015); *ФНТ* **42**, 1372 (2016)). Данный механизм диффузии вакансий и его анализ дополняют предложенную ранее А.Ф. Андреевым и И.М. Лифшицем концепцию диффузионного течения квантового газа дефектонов-квазичастиц с зонным энергетическим спектром (*ЖЭТФ* **56**, 2057 (1969); *УФН* **118**, 251 (1976)).

Розглянуто модель вакансії у квантовому кристалі як псевдочастинку, яка має метастабільні квантові стани, локалізовані на вузлах ґратки у потенціальних ямах кристалічного поля. Припускається, що квантову динаміку такої вакансії можна описати у квазікласичному наближенні, а її енергетичний спектр складається з широкої зони та відщеплених від неї униз одного чи двох дискретних рівнів. Дифузійне переміщення вакансії в об'ємі кристала є наслідком послідовності випадкових тунельних та термічно активованих стрибків між вузлами ґратки. Показано, що температурна залежність коефіцієнта дифузії цих вакансій має специфічну особливість: монотонне зменшення при охолодженні з різким переходом від експоненціального закону, що характерний для високотемпературної термоактивованої дифузії, до атермічного тунельного процесу в області гранично низьких температур. Аналогічну особливість нещодавно зареєстровано при експериментальному вивченні масопереносу у кристалах ^4He та ^3He (*ФНТ* **41**, 223 (2015); *ФНТ* **42**, 1372 (2016)). Цей механізм дифузії та його аналіз доповнює запропоновану раніше О.Ф. Андреевим та І.М. Ліфшицом концепцію дифузійної плинності квантового газу дефектонов-квазічастинок з зонним енергетичним спектром (*ЖЭТФ* **56**, 2057 (1969); *УФН* **118**, 251 (1976)).

PACS: 62.20.F– Деформация и пластичность;
67.80.–s Квантовые кристаллы;
67.80.D– Твердый ^3He ;
67.80.dj Дефекты, примеси и диффузия.

Ключевые слова: твердый гелий, пластическое течение, энергия активации, квантовая диффузия, вакансии, дислокации.

Введение

Основные положения концепции квантовой диффузии точечных дефектов (вакансий, межузельных или примесных атомов и т.п.) в кристаллах с высокой интенсивностью нулевых колебаний сформулированы А.Ф. Андреевым и И.М. Лифшицем [1,2]. Если структура кристалла близка к идеальной, то при температуре $T = 0$ любой дефект, в принципе, должен быть делокализован вследствие туннельной связи между эквивалентными положениями его центра в кристаллической решетке. Благодаря пространственной периодичности потенциала, в котором движется дефект, для стационарных состояний движения хорошим квантовым числом является квазиимпульс, а энергетический спектр состоит из одной или нескольких зон $\Delta_0, \Delta_1, \dots$. Такие дефекты приобретают свойства квазичастиц — дефектонов: они способны перемещаться в кристалле в отсутствие теплового возбуждения при изменениях квазиимпульса и энергии в пределах основной зоны Δ_0 , а скорость течения газа дефектонов лимитируется их взаимными столкновениями. Этот предельно квантовый режим диффузии дефектов описывается стандартными газокинетическими уравнениями, а коэффициент диффузии определяется соотношением $D \approx vl$, где v — скорость движения в зоне, l — длина свободного пробега. При отличной от нуля температуре свободный пробег дефектонов ограничен их столкновениями между собой и с фононами, поэтому l уменьшается при увеличении концентрации дефектонов c_d и температуры T . Коэффициент диффузии также уменьшается при увеличении этих параметров, при этом зависимость $D(c_d, T)$ описывается степенной функцией.

Увеличение частоты столкновений нарушает квантовую когерентность движения дефектонов и создает предпосылки для их локализации. При температуре порядка $T_0 = T_D (\Delta_0 / T_D)^{1/7}$ [2], где Δ_0 — ширина основной зоны, T_D — температура Дебая, длина пробега и линейный размер области локализации достигают величины порядка межатомных расстояний $l \approx a$. За время, проводимое дефектом на отдельном узле решетки, дефект успевает прийти в состояние равновесия с кристаллической матрицей, его перемещения приобретают характер прыжков по узлам, а коэффициент диффузии достигает минимальной величины $D \approx a^2 \Delta_0 / \hbar$.

При дальнейшем увеличении температуры возможен также экспоненциальный рост коэффициента диффузии, если в энергетическом спектре дефекта существует зона возбужденных состояний Δ_1 отделенная от основной зоны Δ_0 щелью E_0 : $D(T) \sim \exp(-E_0/T)$. Эта зависимость аналогична закону Аррениуса для обычной термоактивированной прыжковой диффузии дефектов в классическом кристалле, а роль энергии активации играет величина щели E_0 . Существенная

зависимость от концентрации дефектов при этих температурах исчезает.

Основные положения и выводы теории квантовой диффузии нашли достаточно убедительное экспериментальное подтверждение при исследовании диффузионного перемещения атомов ^3He в кристаллах ^4He [2,3]. Установлено, что примеси замещения ^3He в ГПУ кристаллах ^4He обладают свойствами квазичастиц-примесонов, спектр которых имеет довольно узкую основную зону $\Delta_0 \approx 10^{-4}$ К.

Кристаллы изотопов гелия ^3He и ^4He считаются в настоящее время наиболее яркими примерами квантовых кристаллов с максимальной интенсивностью нулевых колебаний атомов, потому были серьезные основания предполагать, что установленные в [1,2] закономерности квантовой диффузии описывают перемещения в них не только примесных атомов, но и вакансий [1–3]. К тому же теоретический анализ квантовой динамики вакансий в ОЦК кристаллах ^3He и ГПУ кристаллах ^4He привел к заключению [4–6], что в системах этого типа они также могут иметь свойства квазичастиц-вакансионов, для которых ширина основной энергетической зоны $\Delta_0 \approx 1–10$ К, т.е. значительно превосходит ширину зоны примесона.

Однако полученные к настоящему времени результаты экспериментального изучения закономерностей массопереноса по вакансионному механизму в этих кристаллах [3,7–9] не нашли достаточно убедительного и непротиворечивого объяснения в рамках газокинетических представлений о диффузии квазичастиц-вакансионов. В экспериментах удалось зарегистрировать атермический массоперенос с признаками квантовой диффузии в области температур 0,5–0,2 К и переход к хорошо выраженной термоактивированной диффузии в области более высоких температур. Но в промежуточной области наблюдалась монотонная температурная зависимость и специфические особенности, которые на графике функции $\ln D(T)$ имеют вид резких изломов [7,8]. Такая зависимость кардинально отличается от описанной в [1,2] немонотонной степенной зависимости, характерной для квазичастиц-дефектонов в области перехода от термоактивированной к квантовой диффузии.

Нам представляется, что устранить отмеченные выше противоречия между экспериментом и теорией можно, если дополнить полученные в [1,2,5,6] результаты более детальным описанием квантовых свойств локализованных вакансий в квазиклассическом приближении. Причиной сильной локализации подвижных дефектов в квантовых кристаллах могут быть искажения зонного спектра и квантовой когерентности как тепловым движением атомов (фононами), так и присутствием в них большого числа мелкомасштабных структурных искажений, обусловленных статическими дефектами.

Рассматривая вакансию как псевдочастицу, локализованную в отдельной потенциальной яме на фиксированном узле решетки, необходимо учитывать возможность наличия в ее энергетическом спектре одного или нескольких дискретных уровней $\epsilon_0, \epsilon_1, \dots$. Тогда при $T \rightarrow 0$ подвижность вакансии будет определяться туннельными переходами в соседние ямы из основного состояния ϵ_0 , а при $T \neq 0$ необходимо также учитывать термоактивированные переходы в возбужденные состояния $\epsilon_1, \epsilon_2, \dots$ и туннельные переходы из них. В данном исследовании будет показано, что такие уточнения квантовой динамики локализованных вакансий адекватно отражают основные особенности температурной зависимости скорости массопереноса в кристаллах гелия, зарегистрированные в недавно выполненных экспериментальных работах [7–9].

1. Вакансии в классическом и квантовом кристалле

Вакансия — собственный дефект атомно-решеточной структуры кристалла, который появляется при удалении атома из отдельного решеточного узла $\mathbf{R} = \mathbf{R}^v$. Символом \mathbf{R} будем обозначать совокупность радиус-векторов точек локализации атомов в идеальном кристалле (рис. 1): если рассматривать атомы как физические точки \mathbf{r}^a , то в классическом кристалле их локализация означает буквальное совпадение \mathbf{r}^a с \mathbf{R} , а в квантовом кристалле под этим подразумевается наличие на решеточных узлах \mathbf{R} локальных максимумов функции плотности — квадрата модуля многочастичной волновой функции*.

Появление вакансии в результате удаления одного атома сопровождается также значительной трансформацией атомной структуры вокруг пустого узла: например, в квантовых кристаллах гелия такая трансформация охватывает несколько координационных сфер [4]. Элементарный акт вакансионного массопереноса — коллективная перестройка атомной структуры вокруг пустого узла, в результате которой свободным от атома оказывается один из соседних узлов (рис. 1(б)).

С точки зрения современной нелинейной механики [10] вакансия в кристалле имеет свойства топологического солитона — статического или динамического нелинейного уединенного возбуждения поля атомных смещений из узлов идеальной решетки [11–14]. Топологическая устойчивость этого возбуждения определяется ячеистой структурой и трансляционной симметрией кристалла, а роль его топологического заряда, как базовой геометрической характеристики, играет объем примитивной элементарной ячейки $\omega_v = (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])$, где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ — тройка базисных векторов. Такой солитон-вакансия имеет кинематические и динамические свойства материальной частицы: этой псевдочастице

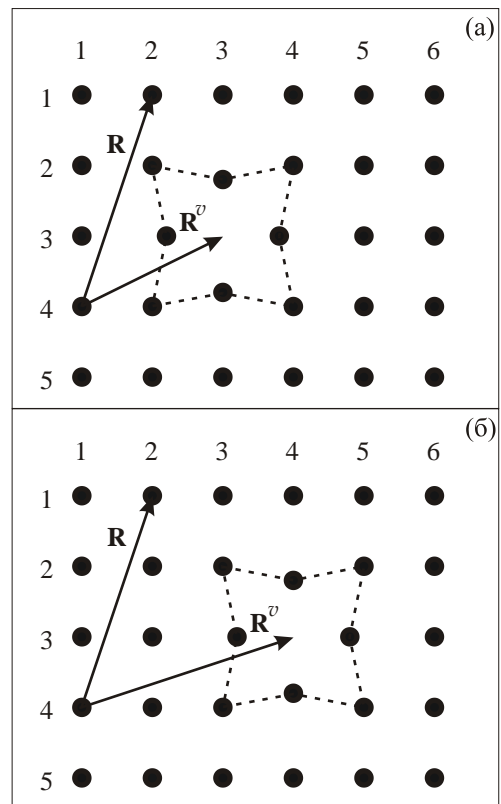


Рис. 1. Двумерная схема атомно-решеточной структуры кристалла с вакансией: (а) — начальное положение вакансии в узле $\mathbf{R}^v(3,3)$; (б) — перемещение вакансии $\mathbf{R}^v(3,3) \rightarrow \mathbf{R}^v(4,3)$ как результат перемещения атома (4,3) в пустой узел (3,3).

можно приписать собственную энергию покоя ϵ_v и эффективную массу m_v , а в качестве ее динамических переменных рассматривать составляющие радиус-вектора центра солитона $\mathbf{r}^v(t) = (x_1^v, x_2^v, x_3^v) \equiv (x_i^v)$ и вектора скорости $\dot{\mathbf{r}}^v(t) = \frac{d}{dt} \mathbf{r}^v(t) = (\dot{x}_1^v, \dot{x}_2^v, \dot{x}_3^v) \equiv (\dot{x}_i^v)$, $i = 1, 2, 3$. Энергия ϵ_v характеризует изменение потенциальной энергии межатомного взаимодействия в результате смещений атомов вокруг вакансии. Вакансия, как пустой узел, собственной массы не имеет, а эффективная (полевая) масса m_v является мерой инертности коллективных перемещений атомов, сопровождающих перемещение ее центра. Эта масса, естественно, должна быть пропорциональной массе отдельного атома m_a , а коэффициент пропорциональности между ними будет учитывать специфику коллективного движения атомов в солитонной волне смещений; он может оказаться как порядка единицы, так и намного больше или меньше единицы.

Представления о вакансии как солитоне-псевдочастице основаны на возможности при анализе коллек-

* Мы не обсуждаем здесь модель гипотетического кристалла [1], в котором число узлов решетки не совпадает с числом атомов, т.е. в основном квантовомеханическом состоянии он уже содержит конечное число «нулевых вакансионных».

тивной динамики атомов в кристалле выделить в многочастичной функции Лагранжа отдельное слагаемое, которое зависит только от координат центра солитона \mathbf{r}^v и скорости его перемещения $\dot{\mathbf{r}}^v$ (обобщенных динамических переменных), что позволяет, в конечном итоге, сформулировать уравнение движения в форме Ньютона для этих динамических переменных, а также определить массу m_v и обобщенный импульс \mathbf{p}^v , соответствующий координате \mathbf{r}^v . Общий метод вывода уравнений движения для топологических дефектов кристаллической структуры в рамках классической механики разработан А.М. Косевичем и использован им для получения уравнения движения дислокации [15]. На его основе в работе [13] получено уравнение движения для вакансии и межузельного атома в плотноупакованных атомных рядах — так называемых вакансионного и межузельного краудионов: сформулирован алгоритм вычисления собственной энергии ε_v , эффективной массы m_v и описания взаимодействия этих псевдочастиц с полями внутренних напряжений. Нет серьезных оснований сомневаться в том, что изложенные выше представления о классической механике вакансий можно распространить на вакансии произвольного типа. Отметим, только, что предложенный в [13,15] вывод уравнения движения дефекта кристаллической структуры (дислокации, краудиона, вакансии и т.п.) ограничен предположением о достаточно малых скоростях движения: например, $|\dot{\mathbf{r}}^v| \ll c$, где c — характерная величина скорости звуковых волн в кристалле.

Квантовое описание движения вакансий можно выполнить, базируясь на классическом уравнении движения и используя принцип дополнительности [16]: для этого обобщенные координату \mathbf{r}^v и импульс \mathbf{p}^v нужно заменить соответствующими операторами и с их помощью получить стандартное уравнение для волновой функции псевдочастицы $\Psi_v(\mathbf{r}, t)$. При этом наиболее важной задачей является выбор модели для потенциальной энергии вакансии, которая должна адекватно отражать главные особенности атомной структуры реального кристалла.

Во первых, в тех областях кристалла, где его структура не искажена дефектами, следствием локальной симметрии и трансляционного порядка является периодическое изменение собственной энергии вакансии ε_v при перемещениях ее центра на макроскопические расстояния

$$\varepsilon_v = \varepsilon_{v0} + U_p(\mathbf{r}^v), \quad U_p(\mathbf{r}^v + \mathbf{R}) = U_p(\mathbf{r}^v). \quad (1)$$

Периодическая функция $U_p(\mathbf{r}^v)$ — аналог решеточного потенциального рельефа Пайерлса для дислокационных линий в кристаллах [11–13,15,17]. Будем считать решеточные узлы \mathbf{R} точками абсолютного минимума функции $U_p(\mathbf{r}^v)$ ($U_p(\mathbf{R}) \equiv 0$), а ее угловая за-

висимость в окрестности отдельного узла должна отражать локальную симметрию кристалла.

Во вторых, различные локальные и протяженные нарушения кристаллической структуры, а также действие на кристалл внешних сил создают в нем некоторое сложное распределение внутренних напряжений $\sigma_{ik}(\mathbf{r}, t)$ и определяют еще две составляющие в потенциальной энергии псевдочастицы, обусловленные дефектами и внешними силами соответственно:

$$\varepsilon_v = \varepsilon_{v0} + U_p(\mathbf{r}^v) + U_d(\mathbf{r}^v, t) + U_e(\mathbf{r}^v, t). \quad (2)$$

Таким образом, квантовое движение центра вакансии описывается стандартным волновым уравнением для материальной частицы с потенциалом (2).

2. Энергетический спектр вакансий

В идеальном кристалле в отсутствие внешних сил ($U_d, U_e \equiv 0$) решеточный потенциальный рельеф $U_p(\mathbf{r}^v)$ вблизи узлов \mathbf{R} (точек абсолютного минимума) представляет собой трехмерную потенциальную яму конечной глубины, которая соединена с аналогичными ямами на соседних узлах перевальными ложбинами вдоль направлений плотной упаковки атомов. Одномерная схема потенциального рельефа в направлении $0x$ вдоль перевальных ложбин показана на рис. 2: символ U_0 обозначает высоту седловых точек по отношению к значению потенциала в точках минимума

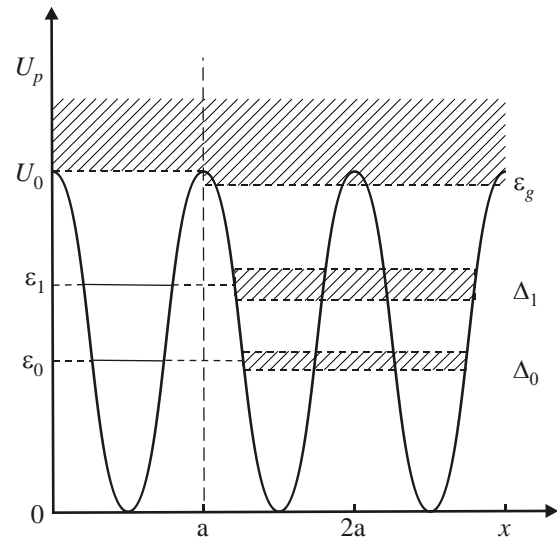


Рис. 2. Схема потенциального рельефа $U_p(\mathbf{r})$ вдоль перевальных ложбин с периодом трансляции a : на левой части рисунка (слева от вертикальной штриховой линии) при $0 < x < a$ показан энергетический спектр вакансии на отдельном узле без учета эффекта туннелирования; правая часть рисунка (справа от вертикальной штриховой линии) при $x > a$ иллюстрирует зонный спектр, возникающий при учете туннелирования вместе с трансляционной симметрией рельефа; заштрихованные области — энергетические зоны.

$U_p(\mathbf{R})=0$; для различных кристаллографических направлений U_0 может иметь различные значения. Диффузия вакансии приобретает существенно квантовый характер, если энергия нулевых колебаний ее центра в отдельной потенциальной яме сопоставима с глубиной ямы, т.е. выполняется условие $\varepsilon_0 \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_v d^2} \gtrsim U_0$,

где ε_0 — энергия основного состояния вакансии в потенциальной яме, d — ее ширина, а для U_0 следует взять наименьшее из совокупности значений этого параметра для всех перевальных направлений.

При квантовом описании движения центра вакансии в пределах отдельной достаточно глубокой ямы, но без учета эффекта туннелирования, мы получим энергетический спектр стационарных состояний, состоящий из нескольких дискретных уровней $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots < U_0$ и непрерывного спектра $\varepsilon > U_0$ (левая часть рис. 2): дискретные уровни соответствуют стационарным колебаниям центра вакансии, локализованной на отдельном узле ($0 < x^v < a$), а непрерывный спектр — волновому полю, заполняющему объем всего кристалла. Учет эффекта квантового туннелирования при движении псевдочастицы в пространственно периодическом потенциале приводит к принципиальным изменениям как энергетического спектра (правая часть рис. 2), так и пространственной конфигурации волнового поля: дискретные уровни $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots$ превращаются в зоны конечной ширины $\Delta_0, \Delta_1, \dots$, а нижняя граница непрерывного спектра ε_g опускается на конечную глубину в область $\varepsilon < U_0$; волновые функции стационарных состояний при всех разрешенных значениях энергии оказываются делокализованными во всем объеме кристалла, а псевдочастицы-вакансии приобретают свойства зонных квазичастиц — вакансионных [1,2,11,18].

Во избежание недоразумений подчеркнем, что одномерная схема на рис. 2 иллюстрирует спектр трехмерных волновых состояний псевдочастицы в объеме кристалла. Число дискретных уровней $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots$ и соответствующих им зон $\Delta_0, \Delta_1, \dots$, а также плотность состояний в зонах и их ширины определяются степенью «квантовости» кристалла и набором конкретных значений его параметров: массы атомов, энергетических и геометрических характеристик межатомного взаимодействия и структуры кристалла. Отметим также, что трехмерный характер отдельной потенциальной ямы и значительные перепады высоты ее краев на гранях элементарной ячейки вокруг отдельного узла \mathbf{R} допускают реализацию широкого набора значений для числа уровней $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots < U_0$ и расстояний между ними, так как эти значения определяются не только глубиной ямы U_0 , но и ее сложным профилем в трех измерениях. В случае предельно квантовых кристаллов в принципе возможна реализация энергетических спектров вакансий с двумя уровнями ε_0 и ε_1 , с одним уровнем ε_0 или

даже при полном отсутствии таких уровней, когда спектр состоит из одной широкой зоны с нижним краем в области $\varepsilon < U_0$ (приближение слабой связи псевдочастицы с кристаллической матрицей).

Основные положения концепции дефектонов в квантовом кристалле, как квазичастиц с зонным энергетическим спектром, сформулированы И.М. Лифшицем и А.Ф. Андреевым и описаны в обзорах [2,18]. Экспериментальное подтверждение этой концепции получено при исследовании диффузии атомов ${}^3\text{He}$ в кристаллах ${}^4\text{He}$ [3]. Установлено, что примеси замещения ${}^3\text{He}$ в ГПУ кристалле ${}^4\text{He}$ обладают свойствами квазичастиц, спектр которых имеет одну узкую зону $\Delta_0 \approx 10^{-4}$ К, как результат уширения уровня ε_0 . Зарегистрированные в экспериментах особенности коэффициента диффузии примесей при $T \lesssim 1$ К и $c_d \lesssim 10^{-2}$ получили удовлетворительное объяснение в рамках представлений о газокинетических свойствах узкозонных квазичастиц-примесей.

Теоретический анализ динамики вакансий в ОЦК кристаллах ${}^3\text{He}$ и ГПУ кристаллах ${}^4\text{He}$ привел к заключению [4–6], что в квантовых системах этого типа они также могут приобретать свойства квазичастиц — вакансионных, для которых ширина энергетической зоны $\Delta_0 \approx (1–10)$ К, т.е. значительно превосходит ширину зоны примесона. Однако к настоящему времени этот вывод теории не нашел достаточно убедительного подтверждения при экспериментальном изучении закономерностей массопереноса в этих кристаллах [3,7–9].

3. Общие закономерности квантовой диффузии

Диффузия дефектонов, имеющих показанный на рис. 2 энергетический спектр, весьма существенно отличается от классической диффузии сильно локализованных дефектов-псевдочастиц. Такие различия максимальны для идеальных или слабоискаженных кристаллов в области предельно низких температур и при малых концентрациях дефектов [1,2,18]. Наиболее существенные особенности квантовой диффузии к настоящему времени описаны при обсуждении квантовых кристаллов с максимально простым энергетическим спектром дефектонов, который имеет только одну узкую зону Δ_0 . В условиях низких температур $T \lesssim \Delta_0$ и при малых концентрациях дефектонов реализуется режим квантового когерентного течения разреженного газа квазичастиц в зоне Δ_0 , а коэффициент диффузии определяется обычной газокинетической формулой $D \approx vl$, где v — скорость движения в зоне Δ_0 , l — длина свободного пробега. Свободный пробег дефектонов ограничен их столкновениями между собой и с фононами, поэтому l уменьшается при увеличении атомной концентрации дефектонов c_d и температуры. В результате коэффициент диффузии также уменьшается при увеличении этих параметров в соответствии со степенным законом вида

$$D(c_d, T) = \frac{D_0}{c_d + \gamma T^9}, \quad T \lesssim \Delta_0, \quad (3)$$

где D_0 и γ — постоянные коэффициенты.

В области более высоких температур $T \gg \Delta_0$ происходит динамическое разрушение зоны, движение дефектонов теряет зонный характер и появляется тенденция к их локализации. Но при этом экспоненциально возрастает вероятность теплового возбуждения дефектонов в область непрерывного спектра $\varepsilon > \varepsilon_g$, а уменьшение коэффициента диффузии (3) с увеличением температуры сменяется экспоненциальным ростом, характерным для термически активированной диффузии локализованных дефектов

$$D = D_0(T) \exp\left(-\frac{\varepsilon_g - \varepsilon_0}{T}\right), \quad \Delta_0 \ll T \lesssim \varepsilon_g - \varepsilon_0. \quad (4)$$

Здесь $D_0(T)$ — слабо зависящая от температуры функция, которая описывает подвижность дефектонов вблизи нижней границы непрерывного спектра $\varepsilon > \varepsilon_g$.

Присутствие в квантовом кристалле статических дефектов структуры или существенно неоднородных упругих деформаций также нарушает квантовую когерентность движения дефектонов в макроскопических объемах и создает предпосылки для их локализации [2,11,18]. Структурные искажения можно считать относительно слабыми, если обусловленные ими слагаемые в потенциале (2) удовлетворяют условию $|\mathbf{a} \cdot \text{grad}(U_d + U_e)| < \Delta_0$. В таких кристаллах при $T \gtrsim \Delta_0$ кинетика диффузии дефектонов частично сохраняет специфические признаки квантового процесса: температурная зависимость $D(T)$ усложняется по сравнению с формулой (3), но остается степенной [18]. Истинная локализация наступает при условии $|\mathbf{a} \cdot \text{grad}(U_d + U_e)| \gg \Delta_0$, когда дефектон приобретает свойства локализованной псевдочастицы. Однако режим диффузии такого дефекта и температурная зависимость $D(T)$, насколько нам известно, в литературе детально не обсуждались. Как правило, предполагалось только, что зависимость $D(T)$ в этом случае должна приобретать вид экспоненциального закона (4), характерного для классической диффузии, когда элементарный акт процесса сводится к термически активированным скачкам дефекта между соседними потенциальными ямами через разделяющих их барьер.

Нам представляется, что при обсуждении диффузии локализованных дефектов в квантовых кристаллах такой взгляд на кинетику элементарного скачка является слишком упрощенным и маскирует некоторые квантовые аномалии зависимости $D(T)$, не совпадающие с аномалиями, которые характерны для квантовой когерентной диффузии. Действительно, локализация в отдельной потенциальной яме в принципе сохраняет влияние квантовых эффектов на движение псевдочастицы, которое может быть описано методами квази-

классического приближения в квантовой механике: ее энергетический спектр в яме может иметь один или даже несколько дискретных уровней (левая часть рис.2), а перемещение в соседнюю яму должно определяться не только термической активацией, но и процессом туннелирования через разделяющий их барьер.

Таким образом, в квантовых кристаллах в принципе возможны два механизма (или режима) квантовой диффузии точечных дефектов типа примесных атомов или вакансий: когерентное зонное течение газа дефектонов-квазичастиц и туннельные скачки локализованных псевдочастиц по узлам кристаллической решетки. Как первый, так и второй из них обеспечивают атермический массоперенос с конечным по величине коэффициентом диффузии в области предельно низких температур, а также переход к термически активированному процессу с экспоненциально возрастающим коэффициентом диффузии при достаточно высоких температурах. Однако в области промежуточных температур коэффициент диффузии имеет различные аномалии, специфические для каждого из этих механизмов. Диффузия дефектонов-квазичастиц детально обсуждена в обзорах [2,18], а ее главная особенность описывается формулой (3). Закономерности туннельного скачкообразного массопереноса ранее детально не обсуждались и будут описаны в следующем разделе.

4. Туннельно-активационный режим диффузии

Рассмотрим одну из возможных моделей диффузии дефектов-псевдочастиц в квантовом кристалле, которая допускает описание их квантового движения в квазиклассическом приближении и базируется на нескольких предположениях.

Будем рассматривать дефект как нелинейное сильно локализованное возбуждение атомной структуры кристалла — квантовую псевдочастицу с эффективной массой m_v и динамическими переменными \mathbf{r} и \mathbf{p} , которая помещена в периодический потенциал $U_p(\mathbf{r}) = U_p(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ (рис. 2).

Если в начальный момент времени такая псевдочастица локализована на одном из узлов кристалла \mathbf{R} (рис.1(а)), то ее дальнейшее движение можно разделить на два временных интервала: τ_1 — время квантовых колебаний в потенциальной яме вблизи этого узла \mathbf{R} , на протяжении которого она успевает прийти в состояние частичного равновесия с кристаллической матрицей в соответствии с энергетическим спектром стационарных состояний в яме (левая часть рис.2) и температурой кристалла; τ_2 — среднее время туннельного или термически активированного перехода на один из соседних узлов \mathbf{R}' (рис. 1(б)).

Дальнейшее перемещение псевдочастицы в объеме кристалла описывается законами классической диффузии как последовательности случайных скачков по уз-

лам решетки с частотой $1/\tau_2$, а коэффициент диффузии описывается формулами [19]

$$D(T) = \frac{\lambda^2}{\tau_2(T)} = D_0 w(T), \quad D_0 = \lambda^2 \nu_0. \quad (5)$$

Здесь λ — эффективная длина скачка, учитывающая локальную геометрию атомных конфигураций вокруг вакантного узла ($\lambda^2 \approx 10^{-1} a^2$); ν_0 — эффективная частота атомных колебаний порядка частоты Дебая для фононного спектра кристалла; $w(T)$ — вероятность перехода дефекта между двумя соседними потенциальными ямами рельефа $U_p(\mathbf{r})$, обусловленная совместным действием как эффекта туннелирования, так и тепловой активации*.

Рассмотрим сначала более простую модель локализованного дефекта в квантовом кристалле, для которого энергетический спектр имеет один дискретный уровень ε_0 . В этом случае вероятность $w(T)$ определяется соотношениями

$$w(T) = w_T(U_0 - \varepsilon_0) + [1 - w_T(U_0 - \varepsilon_0)] w_q(\varepsilon_0), \quad (6)$$

$$w_T(\varepsilon - \varepsilon_0) = \exp\left(-\frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{T}\right). \quad (7)$$

Здесь $w_T(\varepsilon - \varepsilon_0)$ — вероятность теплового возбуждения дефекта из основного состояния ε_0 в состояние с энергией ε , а $w_q(\varepsilon)$ — вероятность квантового туннелирования в соседнюю яму из состояния с энергией $\varepsilon < U_0$; с экспоненциальной точностью можно считать, что барьер не оказывает существенного влияния на движение дефекта с энергией $\varepsilon = U_0$ и полагать $w_q(U_0) \approx 1$.

Если энергетический спектр дефекта имеет два дискретных уровня ε_0 и ε_1 , то вероятность туннельно-активационных скачков $w(T)$ определяется соотношением

$$w(T) = w_T(U_0 - \varepsilon_0) + w_T(\varepsilon_1 - \varepsilon_0) w_q(\varepsilon_1) + [1 - w_T(U_0 - \varepsilon_0) - w_T(\varepsilon_1 - \varepsilon_0)] w_q(\varepsilon_0), \quad (8)$$

в котором учтено также тепловое возбуждение состояния с энергией ε_1 и туннелирование из этого уровня.

Вычисление вероятности туннелирования $w_q(\varepsilon)$ при $\varepsilon < U_0$ является довольно сложной задачей о квантовом выходе частицы из трехмерной потенциальной ямы, которая соединена с соседними ямами перевальными ложбинами. Общие методы решения таких задач разрабатывались многими авторами: см., например, [20–23] и приведенные там ссылки; здесь мы воспользуемся главными результатами этих исследований. В квазиклассическом приближении движение частицы в пере-

вальной ложбине потенциального рельефа $U_p(\mathbf{r})$ можно разделить на относительно медленное движение вдоль дна ложбины с точкой перевала U_0 , и поперечные высокочастотные осцилляции. На рис. 2 схематически показаны соответствующее направление $0x$, профиль потенциала $U_p(x)$ и точка перевала $U_0 = U_p(x_m)$, где x_m — точка максимума, вблизи которой потенциал имеет отрицательную кривизну:

$$U_p(x) \approx U_0 - \frac{1}{2} \kappa (x - x_m)^2, \quad \kappa = -\left. \frac{d^2}{dx^2} U_p(x) \right|_{x=x_m} > 0, \\ |x - x_m| < a/2. \quad (9)$$

В этом приближении вероятность туннельного выхода из ямы $w_q(\varepsilon)$ при $\varepsilon < U_0$ определяется преимущественно одномерным движением вдоль перевальной координаты x , а возбуждения осцилляторного типа вдоль поперечных координат влияют лишь на нормировочные множители. В конечном итоге вероятность $w_q(\varepsilon)$ сводится, с экспоненциальной точностью, к вычислению одномерного туннельного интеграла для частицы с некоторой перенормированной эффективной массой m^* :

$$w_q(\varepsilon) \approx \exp\left[-\frac{2\sigma(\varepsilon)}{\hbar}\right], \quad \sigma(\varepsilon) = \text{Im} \int \sqrt{2m^*[\varepsilon - U_p(x)]} dx. \quad (10)$$

Для параболического барьера вида (9) при выполнении условия квазиклассичности получим:

$$w_q(\varepsilon) \approx \exp\left(-\frac{U_0 - \varepsilon}{\hbar \nu_q}\right), \quad \nu_q = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\kappa}{m^*}}, \quad \hbar \nu_q \ll U_0 - \varepsilon. \quad (11)$$

Энергетические параметры ε_0 , ε_1 и $\hbar \nu_q$ являются основными характеристиками интенсивности квантового движения локализованного дефекта. В данной теории они рассматриваются как феноменологические параметры модели: эмпирические оценки этих величин можно получить путем сравнения с выводами теории результатов экспериментального изучения диффузии дефектов в области предельно низких температур (см. раздел б). Установить связь характеристик барьера U_0 и κ , эффективной массы дефекта m^* и параметров энергетического спектра ε_0 , ε_1 и ν_q с микроскопическими характеристиками кристалла можно, естественно, только путем строгой формулировки и аналитического или численного решения квантовомеханической задачи о динамике кристалла с дефектом.

Во избежание недоразумений отметим, что фигурирующая в формуле (10) «туннельная» масса m^* и «затравочная» масса вакансии m_v (см. раздел 1), вообще

* В кристаллах, строго говоря, коэффициент диффузии является тензором второго ранга $D_{ik}(T)$ [19], а формулы, подобные (5), описывают главные значения этого тензора по отношению к кристаллографической системе координат.

говоря, не совпадают и могут иметь существенно различные величины: m_v — масса в операторе кинетической энергии вакансии, которая непосредственно влияет на энергетический спектр $\epsilon_0, \epsilon_1 \dots$ и определяет точную величину вероятности туннелирования $w_q(\epsilon)$; m^* появилась в формуле (10) как удобный коэффициент при попытке приближенно (с экспоненциальной точностью) представить вероятность туннельного выхода вакансии из трехмерной потенциальной ямы в виде одномерного туннельного интеграла.

Подстановка соотношений (6)–(11) в формулу (5) определяет в явном виде температурную зависимость коэффициента прыжковой туннельно-активационной диффузии локализованного дефекта в квантовом кристалле. В области достаточно низких температур $T \ll \hbar\nu_q$ эта зависимость описывает чисто квантовый атермический процесс, для которого $D \approx D_0 w_q(\epsilon_0)$, а в пределе высоких температур $T \gg \hbar\nu_q$ диффузия приобретает чисто активационный характер с коэффициентом $D \approx D_0 w_T(U_0 - \epsilon_0)$ и энергией активации $E_0 = U_0 - \epsilon_0$. В области промежуточных температур зависимость $D(T)$ имеет специфические особенности экспоненциального типа, которые качественно отличаются от степенных зависимостей вида (3), характерных для зонной диффузии дефектонов-квазичастиц.

5. Главные особенности температурной зависимости коэффициента туннельно-активационной диффузии

При изменении температуры в широких пределах изменения коэффициента диффузии охватывают несколько порядков, поэтому при обсуждении зависимости $D(T)$, полученной как в результате теоретического анализа, так и при экспериментальных измерениях удобно использовать полулогарифмические координаты $\ln D(T) - T$ или $\ln D(T) - T^{-1}$. Для модели дефекта, энергетический спектр которого имеет один дискретный уровень ϵ_0 , получим:

$$\ln D = \ln D_0 - E_0\theta + \ln[1 + (1 - e^{-E_0\theta}) e^{E_0(\theta - \theta_q)}], \quad (12)$$

$$\theta = T^{-1}, \quad \theta_q = (\hbar\nu_q)^{-1}, \quad E_0 = U_0 - \epsilon_0.$$

Легко видеть, что при выполнении условия квазиклассичности $E_0\theta_q = \frac{U_0 - \epsilon_0}{\hbar\nu_q} \gg 1$ данная зависимость имеет две асимптотики (рис. 3(a)):

$$\ln D = \begin{cases} \ln D_0 - E_0\theta, & \theta \ll \theta_q, \\ \ln D_0 - E_0\theta_q, & \theta \gg \theta_q. \end{cases} \quad (13.a) \quad (13.б)$$

Линейная зависимость от обратной температуры (13.a) описывает классическую термоактивированную диффузию с энергией активации E_0 , а в области низких

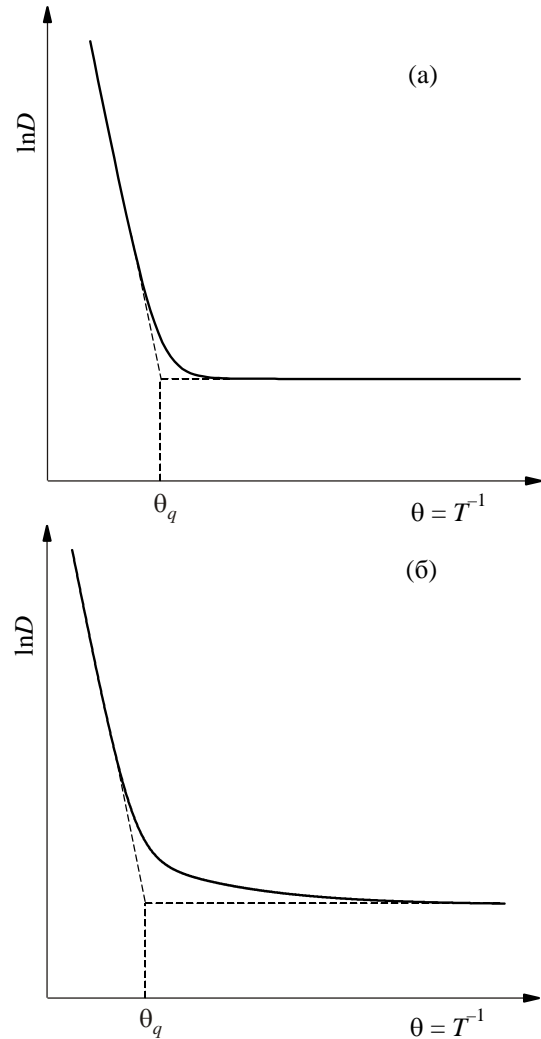


Рис. 3. Температурные зависимости коэффициента диффузии в координатах $\ln D - \theta$ для дефектов, энергетический спектр которых имеет различное число дискретных уровней: (а) — один уровень ϵ_0 , график функции (12); (б) — два уровня ϵ_0 и ϵ_1 , график функции (15) при $E_1 \approx 0,1E_0$.

температур диффузия приобретает атермический характер (13.б), обусловленный эффектом квантового туннелирования. Граничная температура $T_q = \hbar\nu_q$ (или $\theta_q = T_q^{-1}$), разделяющая эти асимптотики, характеризует интенсивность квантовых флуктуаций кинетической энергии дефекта, благодаря которым возможен процесс туннелирования.

Следует обратить внимание еще на одну характерную особенность туннельно-активационной диффузии — весьма узкий температурный интервал $\delta\theta = 2|\theta_q - \theta|$, на котором асимптотика (13.a) переходит в асимптотику (13.б):

$$\delta\theta \approx \frac{2}{E_0}, \quad \frac{\delta\theta}{\theta_q} \approx \frac{\delta T}{T_q} \approx \frac{2\hbar\nu_q}{E_0} \ll 1. \quad (14)$$

На рис. 3(a) эта особенность выглядит как резкий излом графика функции $\ln D(\theta)$ при $\theta = \theta_q$.

Для более сложной модели дефекта с двумя дискретными энергетическими уровнями ε_0 и ε_1 согласно соотношениям (11), (7) и (8) зависимость $\ln D(\theta)$ описывается формулой:

$$\ln D = \ln D_0 - E_0\theta + \ln [1 + e^{(E_0 - E_1)(\theta - \theta_q)} + (1 - e^{-E_1\theta} - e^{-E_0\theta}) e^{E_0(\theta - \theta_q)}]. \quad (15)$$

$$E_0 = U_0 - \varepsilon_0, \quad E_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_0.$$

При выполнении условия квазиклассичности $E_0\theta_q \gg 1$ зависимость (15) имеет термоактивационную (13.а) и туннельную (13.б) асимптотики в областях $\theta \ll \theta_q$ и $\theta \gg \theta_q$ соответственно, а параметр θ_q является координатой точки пересечения этих асимптотик (рис. 3(б)). При $E_1 \rightarrow 0$ или $E_0 - E_1 \rightarrow 0$ формула (15) переходит в формулу (12) и график на рис. 3(б) приобретает резкий излом (как на рис. 3а). Однако существует интервал умеренно малых значений $E_1 \approx 0,1 E_0$, для которых область перехода между асимптотиками (13.а) и (13.б) расширяется, но излом (менее резкий) в окрестности θ_q сохраняется.

Для параболического барьера (9) выполняется соотношение $8(U_0 - \varepsilon_0) = kd^2$, где d — ширина барьера на уровне ε_0 , оно позволяет связать между собой параметры рассматриваемой модели вакансии m^* , k и d с величинами $U_0 - \varepsilon_0 = E_0$ и θ_q , которые можно зарегистрировать в эксперименте:

$$kd^2 = 8E_0, \quad m^*d^2 = 2E_0 \left(\frac{\hbar\theta_q}{\pi} \right)^2. \quad (16)$$

Сравнивая формулы (12) или (15) с формулой (3) приходим к заключению о качественном различии двух возможных режимов квантовой диффузии: туннельно-активационного перемещения локализованных дефектов-псевдочастиц и зонного течения газа дефектов-квазичастиц.

6. Диффузия вакансий в кристаллах гелия при температурах порядка и ниже 1 К

В настоящее время известно несколько попыток экспериментальной регистрации вакансионного массопереноса в кристаллах ^3He и ^4He . История этой проблемы описана в обзоре [3] и в трех последних публикациях [7–9], где представлены наиболее систематические и точные результаты измерений в темпера-

турном интервале 1,5–0,1 К. Это рекордно низкие температуры для данной проблемы, что существенно повысило шансы наблюдения эффекта квантового массопереноса.

В работах [7–9] наблюдалось длительное стационарное пластическое течение (ползучесть) твердого ^3He и ^4He через пористую упругую мембрану под действием приложенного к ней постоянного механического напряжения $0 < \sigma < 10^4$ Па. Этот процесс был реализован вдали от линии плавления кристаллов на диаграмме «температура–давление» и имел достаточно большую доступную для регистрации скорость при понижении температуры до 0,1 К. Полученные в этих экспериментах типичные зависимости скорости перемещения мембраны $V = V(T)$ от обратной температуры $\theta = T^{-1}$ имеют такие же характерные особенности, как и температурные зависимости $\ln D(\theta)$ для процесса туннельно-активационной диффузии на рис. 3: монотонный характер, а также наличие на графиках протяженных прямолинейных участков и резких изломов в узкой окрестности некоторого значения θ_q . Это позволяет предполагать, что в экспериментах массопереноса через отверстия в мембране определяется диффузией вакансий и выполнить анализ экспериментальных результатов на основе представлений, описанных в предыдущем разделе*.

Будем считать, что скорость мембраны пропорциональна коэффициенту диффузии вакансий и описывается эмпирической формулой

$$V(T, \sigma) = B(T, \sigma)D(T), \quad (17)$$

а температурная зависимость множителя $B(T, \sigma)$ более слабая, чем зависимость $D(T)$. Сопоставление результатов экспериментов [7,8] с формулами (12) и (15) показано на рис. 4 и подтверждает, в первом приближении, сделанное предположение. Определенные сомнения вызывает адекватность теории эксперименту только для кристаллов ^4He при $\theta > 4$ ($T < 0,25$ К).

При анализе экспериментальных результатов в качестве грубой оценки для ширины барьера можно принять $d \approx 0,5a$, где a — характерная величина параметра решетки. С этой точностью формулы (16) позволяют получить оценки для параметров m^* и k , если в эксперименте зарегистрированы значения параметров E_0 и θ_q .

Зарегистрированные в экспериментах [7–9] точные значения энергии активации E_0 термически активированного вакансионного массопереноса в кристаллах гелия зависят от молярного объема (плотности) кристалла, а значения θ_q , разделяющие области термиче-

* Строго говоря, при анализе результатов этих экспериментов специального обсуждения требует вопрос об источниках вакансий. Нам представляется, что избыточная концентрация вакансий на берегах отверстий в мембране может быть обусловлена процессами дислокационно-вакансионной пластической деформации в объеме кристалла. Механизмы таких процессов хорошо известны в дислокационной теории пластичности [11,15,17], а детальному обсуждению дислокационно-вакансионной ползучести кристаллов гелия будет посвящена отдельная публикация.

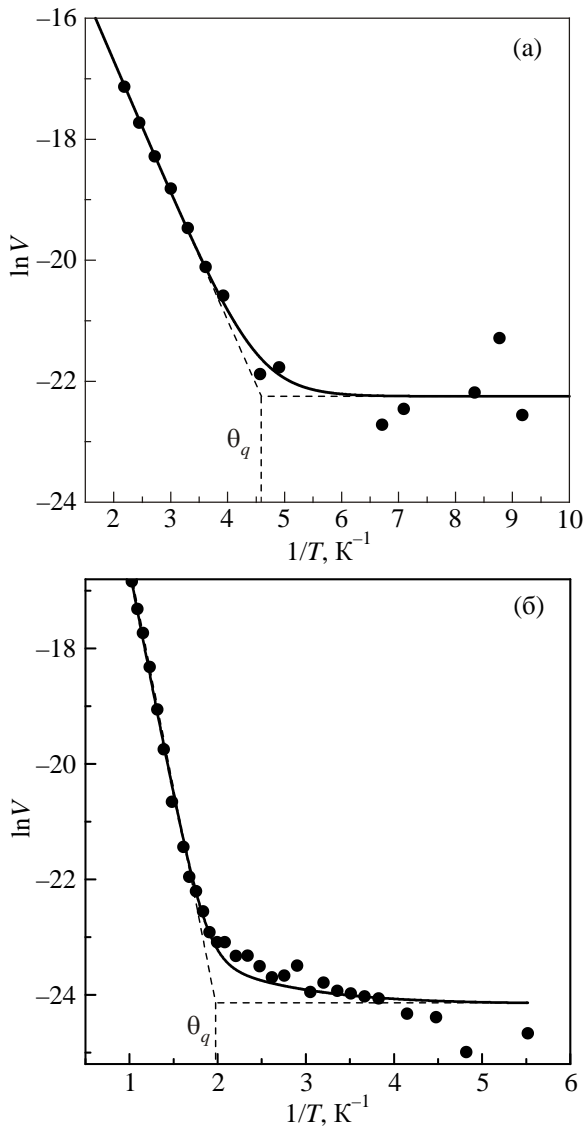


Рис. 4. Сопоставление результатов экспериментов [7,8] с теорией: (а) — аппроксимация экспериментальных данных для ${}^3\text{He}$ функцией (12), сплошная линия — график этой функции при значениях параметров $E_0 \approx 2,2 \text{ K}$ и $\theta_q \approx 4,5 \text{ K}^{-1}$; (б) — аппроксимация экспериментальных данных для ${}^4\text{He}$ функцией (15), сплошная линия — график этой функции при значениях параметров $E_0 \approx 7,9 \text{ K}$, $E_1 \approx 1,1 \text{ K}$ и $\theta_q \approx 2 \text{ K}^{-1}$.

ски активированного и квантового массопереноса, варьируются не только при изменениях плотности, но и при изменениях напряжения σ . Чтобы оценить по порядку величины параметры обсуждаемой здесь модели вакансий мы воспользуемся характерными средними значениями E_0 и θ_q , полученными при обработке экспериментальных результатов.

Параметры вакансий в ОЦК кристаллах ${}^3\text{He}$

В работе [8] зарегистрированы характерные значения $E_0 \approx 3 \text{ K}$ и $\theta_q \approx 5 \text{ K}^{-1}$. Согласно сделанным выше предположениям и формулам (16) получаем эмпирические оценки:

$$E_0 = U_0 - \varepsilon_0 \approx 3 \text{ K}, d \approx 2 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \kappa \approx 8 \text{ г/с}^2,$$

$$m^* \approx 3 \cdot 10^{-22} \text{ г}. \quad (18)$$

Сравнение m^* с массой атома ${}^3\text{He}$ ($m_a \approx 5 \cdot 10^{-24} \text{ г}$) приводит к соотношению $m^* \approx 60m_a$, которое указывает на коллективный характер вакансионного возбуждения в квантовом кристалле: туннелирование вакансии представляет собой коррелированное смещение большого числа атомов вокруг ее центра. Частично данное обстоятельство может быть следствием тенденции к поляризации ядерных спинов атомов ${}^3\text{He}$ в окрестности вакансии — образование магнитного полярона [5].

В теоретическом исследовании С.В. Иорданского [6] описана диффузия магнитнополяризованных вакансий, которые рассмотрены как вакансии с очень широкой зоной $\Delta \approx 10 \text{ K}$ в энергетическом спектре. Для этой модели вакансии при $T \ll \Delta$ температурная зависимость коэффициента диффузии $D(T) \sim T^{7/5}$ качественно иная, чем в эксперименте [8]. Данное обстоятельство является еще одним подтверждением предположения о сильной локализации вакансий в кристаллическом ${}^3\text{He}$ и присутствии в их энергетическом спектре дискретного уровня.

Параметры вакансий в ГПУ кристаллах ${}^4\text{He}$

При экспериментальном изучении вакансионного массопереноса в кристаллах ${}^4\text{He}$ [7] получены характерные средние значения $E_0 \approx 7 \text{ K}$ и $\theta_q \approx 2 \text{ K}^{-1}$, что приводит к эмпирическим оценкам:

$$E_0 = U_0 - \varepsilon_0 \approx 7 \text{ K}, E_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_0 \approx 1 \text{ K}, d \approx 2 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

$$\kappa \approx 20 \text{ г/с}^2, m^* \approx 1 \cdot 10^{-22} \text{ г}. \quad (19)$$

Сравнение m^* с массой атома ${}^4\text{He}$ ($m_a \approx 6,7 \cdot 10^{-24} \text{ г}$) приводит к соотношению $m^* \approx 15m_a$. Следовательно, в кристалле ${}^4\text{He}$ туннелирование вакансии представляет собой также коррелированное перемещение большой группы атомов, хотя их количество значительно меньше чем в кристалле ${}^3\text{He}$.

Отклонение зависимости $D(T)$ от классического закона Аррениуса $D(T) \sim \exp(-E_0/T)$ для рассматриваемой здесь модели вакансии возникает при значениях температуры $T < T_q$. Пороговая температура $T_q({}^4\text{He}) \approx 0,5 \text{ K}$ значительно больше по сравнению с $T_q({}^3\text{He}) \approx 0,2 \text{ K}$, следовательно, квантовые свойства вакансий в кристаллах ${}^4\text{He}$ выражены более ярко. Одной из причин этого различия может быть магнитная поляризация ядерных спинов вокруг центра вакансии в кристаллическом ${}^3\text{He}$ и связанное с ней понижение вероятности туннелирования.

Отметим, что полученные оценки параметра m^* не противоречат предположениям, которые использованы при вычислении вероятности туннелирования вакансии

через барьеры кристаллического потенциала (см. формулы (10) и (11)). Различия в значении температуры T_q для кристаллов ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$ можно интерпретировать как следствие различий параметров барьеров d и κ , так и следствие различной величины феноменологического параметра m^* в туннельном интеграле (10). Отсюда следует значительная неопределенность в интерпретации физического смысла эффективной «туннельной» массы вакансий m^* , ее причины обсуждены в конце разд. 4.

Вместе с тем в экспериментах установлено, что для кристаллов ${}^4\text{He}$ температурная область перехода от термоактивированной к квантовой диффузии в окрестности T_q существенно расширена и переход является менее резким. Возможная причина этой особенности – присутствие в энергетическом спектре вакансии двух дискретных уровней ε_0 и ε_1 . Однако, для обоснования такого предположения необходимо выполнить более детальное исследование влияния напряжения σ на скорость массопереноса в кристаллах ${}^4\text{He}$ при $T \lesssim T_q \approx 0,5$ К.

7. Заключение

В данном исследовании проанализирован один из возможных механизмов массопереноса в квантовых кристаллах — совместное влияние эффектов туннелирования и термической активации на диффузию вакансий, которые рассматриваются как локализованные псевдочастицы с учетом их квантовых свойств в квазиклассическом приближении.

Предполагается, что в энергетическом спектре вакансии наряду с широкой зоной имеется один или два дискретных уровня, отщепленных от нее вниз.

Установлено, что для этой модели вакансии температурная зависимость коэффициента диффузии имеет специфические особенности, похожие на зарегистрированные при экспериментальном изучении массопереноса в кристаллах ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$ [7–9]: монотонное уменьшение при понижении температуры с резким переходом от экспоненциальной зависимости, характерной для термоактивированной диффузии, к атермическому процессу с характерными признаками туннельного эффекта.

Обсуждены существенные различия между рассмотренным здесь процессом туннельно-активационной диффузии локализованных вакансий и рассмотренным ранее [1,2,6,18] процессом диффузионного течения квантового газа квазичастиц-дефектонов (вакансион) с зонным энергетическим спектром. Влияние температуры на газокинетический режим диффузии дефектонов определяется их рассеянием на фононах и описывается немоноотонной степенной функцией.

Выводы теории туннельно-активационной диффузии сопоставлены с результатами экспериментального исследования вакансионного массопереноса в кристаллах ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$ при температурах $0,1 \text{ К} < T < 1,5 \text{ К}$ [7–9] и получены эмпирические оценки для параметров мик-

роскопической модели вакансий. Однако интерпретация и анализ результатов экспериментов имеет предварительный характер, пока не разработана процедура однозначного разделения вклада в скорость массопереноса двух процессов — зарождения вакансий и их диффузии.

Авторы искренне признательны за полезные обсуждения проблемы квантовой диффузии А.С. Ковалеву, В.А. Майданову, Э.Я. Рудаковскому и М.А. Стржемечному.

1. А.Ф. Андреев, И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **56**, 2057 (1969).
2. А.Ф. Андреев, *УФН* **118**, 251 (1976).
3. В.Н. Григорьев, *ФНТ* **23**, 5 (1997) [*Low Temp. Phys.* **23**, 3 (1997)].
4. В.П. Минеев, *ЖЭТФ* **63**, 1822 (1972).
5. А.Ф. Андреев, *Письма в ЖЭТФ* **24**, 608 (1976).
6. С.В. Иорданский, *Письма в ЖЭТФ* **26**, 183 (1977).
7. В. Жучков, А.А. Лисунов, В.А. Майданов, А.С. Неонета, В.Ю. Рубанский, С.П. Рубец, Э.Я. Рудаковский, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **41**, 223 (2015). [*Low Temp. Phys.* **41**, 169 (2015)].
8. А.А. Лисунов, В.А. Майданов, В.Ю. Рубанский, С.П. Рубец, Э.Я. Рудаковский, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **42**, 1372 (2016) [*Low Temp. Phys.* **42**, 1075 (2016)]; A. Lisunov, V. Maidaonov, V. Rubanskyi, S. Rubets, E. Rudavskii, S. Smirnov, and V. Zhuchkov, *Phys. Rev. B* **92**, 140505(R) (2015).
9. A. Lisunov, V. Maidaonov, N. Mikhin, A. Neoneta, V. Rubanskyi, S. Rubets, E. Rudavskii, and V. Zhuchkov, *J. Low Temp. Phys.* **175**, 113 (2014).
10. А.М. Косевич, А.С. Ковалев, *Введение в нелинейную физическую механику*, Наукова думка, Киев (1989).
11. А.М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов*, Наукова думка, Киев (1981).
12. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)*, Вища шк., Изд-во при ХГУ, Харьков (1988).
13. В.Д. Нацик, Е.И. Назаренко, *ФНТ* **26**, 283 (2000) [*Low Temp. Phys.* **26**, 210 (2000)].
14. В.Д. Нацик, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **40**, 1366 (2014) [*Low Temp. Phys.* **40**, 1063 (2014)]; *ФНТ* **41**, 271 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 207 (2015)].
15. А.М. Косевич, *Дислокации в теории упругости*, Наукова Думка, Киев (1978); *УФН*, **84**, 579 (1964).
16. А.С. Давыдов, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1973).
17. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Атомиздат, Москва (1972).
18. Ю.М. Каган, *УФН* **141**, 541 (1983).
19. Дж. Маннинг, *Кинетика диффузии атомов в кристаллах*, Мир, Москва (1971).
20. Р. Фейнман, А. Хибс, *Квантовая механика и интегралы по траекториям*, Мир, Москва (1968).
21. Б.В. Петухов, В.Л. Покровский, *ЖЭТФ* **63**, 634 (1972).
22. А.И. Ларкин, Ю.Н. Овчинников, *ЖЭТФ* **86**, 719 (1984).
23. С.В. Иорданский, А.М. Финкельштейн, *ЖЭТФ* **62**, 403 (1972).

Tunnel-thermally activated mechanism of vacancy diffusion in a quantum crystal

V.D. Natsik and S.N. Smirnov

The vacancy model in a quantum crystal as a pseudo-particles is considered. The vacancy has the metastable quantum states localized at the lattice sites in potential wells of the crystalline field. It is assumed that quantum dynamics of such a vacancy can be described in the semiclassical approximation, and its spectrum consists of a broad band and one or two discrete levels splited from the band. The diffusion migration of the vacancy in the bulk of the crystal is reduced to a sequence of random tunnel and thermally activated jumps between the lattice sites. It is shown that the temperature dependence of the vacancy diffusion coefficient has a specific feature: a monotonic decrease upon cooling with a sharp transition from the

exponential law typical for high-temperature thermally activated diffusion to the athermal tunneling process at extremely low temperatures. The similar feature was recently recorded in the experimental study of mass transfer in ^4He and ^3He crystals (*Low Temp. Phys.* **41**, 169 (2015); *Low Temp. Phys.* **42**, 1075 (2016)). This mechanism of diffusion of vacancies and its analysis supplement the previously proposed, by A.F. Andreev and I.M. Lifshitz, concept of the diffusion flow of a defecton-quasiparticles quantum gas with a band energy spectrum (*ZhETF (rus.)* **56**, 2057 (1969); *UFN (rus.)* **118**, 251 (1976)).

PACS: 62.20.F– Deformation and plasticity;
67.80.–s Quantum solids;
67.80.D– Solid ^3He ;
67.80.dj Defects, impurities, and diffusion.

Keywords: solid helium, plastic flow, activation energy, quantum diffusion, vacancies, dislocations.