

## О ВОЗМОЖНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕСТ ЛОКАЛИЗАЦИИ $\mu^+$ -МЕЗОНОВ В КРИСТАЛЛАХ

А.Г. Лундин, О.В. Фалалеев, Н.А. Сергеев

В работе, на примере кристаллов меди, рассматриваются возможности метода моментов для определения мест локализации  $\mu^+$ -мезонов в кристаллах.

В последнее время успешно развивается новый метод исследования физических свойств твердого тела с помощью поляризованных  $\mu^+$ -мезонов [1, 2]. Метод основан на экспериментальном изучении прецессии магнитного момента  $\mu^+$ -мезонов, первоначально поляризованных перпендикулярно внешнему магнитному полю. Затухание прецессии обусловлено взаимодействием  $\mu^+$ -мезона с магнитными моментами ядер кристалла. Как отмечается в работах [1, 2], форма кривой спада свободной прецессии  $\mu^+$ -мезона,  $P(t)$ , зависит от его местонахождения в кристаллической решетке и характера подвижности.

Ниже предлагается использовать широко применяемый в радиоспектроскопии твердого тела метод моментов для определения мест локализации  $\mu^+$ -мезонов в кристаллах.

Фурье-образ от  $P(t)$  представляет собой функцию распределения локальных магнитных полей на  $\mu^+$ -мезоне и является, по существу, функцией формы линии,  $g(\omega)$ , магнитного резонанса  $\mu^+$ -мезонов [3]. В общем случае функция  $P(t)$ , имеет, по-видимому, сложный вид, однако при достаточно малых временах она может быть аппроксимирована рядом:

$$P(t) = P_0 \left( 1 - \frac{M_2}{2!} t^2 + \frac{M_4}{4!} t^4 - \dots \right),$$

где

$$M_{2n} = \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega)(\omega - \omega_0)^{2n} d\omega / \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega) d\omega = \frac{(-1)^n}{P_0} \left( \frac{\partial^{2n} P(t)}{\partial t^{2n}} \right)_{t=0}$$

— моменты формы линии  $g(\omega)$ .

В отличие от  $P(t)$  моменты могут быть вычислены точно, и для магнитных диполь-дипольных взаимодействий они относительно просто связаны с координатами  $\mu^+$ -мезона в элементарной ячейке кристалла.

В качестве примера рассмотрим экспериментальные результаты по скорости затухания амплитуды прецессии спинов  $\mu^+$ -мезонов в кристаллической решетке меди [4]. При низких температурах, когда диффузия  $\mu^+$ -мезонов отсутствует скорость затухания амплитуды прецессии  $P(t)$  не зависит от температуры и хорошо описывается гауссовой кривой:

$$P(t) = \exp(-\sigma^2 t^2).$$

В этом случае экспериментально измеренный параметр  $\sigma$ , однозначно определяет всю кривую  $P(t)$  и связан со вторым моментом следующим образом:

$$M_2 = 2\sigma^2.$$

В случае поликристаллических образцов, как показал Ван-Флек, значение второго момента определяется выражением [3]:

$$M_2 = \frac{4}{15} \gamma_\mu^2 \gamma^2 \hbar^2 S(S+1) \sum_i^{(R_i < R_0)} R_i^{-6}. \quad (1)$$

В этой формуле  $\gamma_\mu$  — гиромагнитное отношение  $\mu^+$ -мезонов,  $\gamma = (f_1 \gamma_1^2 + f_2 \gamma_2^2)^{1/2}$ , где  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  и  $f_1$ ,  $f_2$  — гиромагнитные отношения и относительные концентрации изотопов ядер меди,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $S$  — спин ядер меди,  $R_i$  — расстояние между  $\mu^+$ -мезоном и  $i$ -ядром меди. Суммирование в (1) проводится по всем ядрам внутри сферы радиуса  $R_0$ . Для кубических решеток точность вычисления  $\sum R_i^{-6}$  около 0,1% обеспечивается при  $R_0$ , превышающем параметр элементарной ячейки  $a$  примерно в пять раз. Для меди при температурах 20 — 60 К, при которых были получены используемые экспериментальные результаты, параметр  $a$  прием равным 3,594 Å, учитывая температурную поправку, взятую из [5]. Вклад в (1) всех остальных магнитных моментов в кристалле, так же как и поправки на колебания ядер, пренебрежимо мал.

Учитывая, что элементарная ячейка меди является гранецентрированной кубической и содержит два типа пустот — октаэдрические и тетраэдрические, естественно предположить, что  $\mu^+$ -мезоны могут находиться в центрах пустот. Допустим также, что внедрение  $\mu^+$ -мезона не приводит к изменению взаимного расположения окружающих его ядер меди.

Если  $\mu^+$ -мезоны занимают обе из возможных позиций, наблюдаемый второй момент определяется взвешенной суммой:

$$M_2 = p_T M_2^T + p_O M_2^O,$$

где  $p_T$  и  $p_O$  — вероятности захвата  $\mu^+$ -мезонов тетраэдрической и октаэдрической пустотами соответственно ( $p_T + p_O = 1$ );  $M_2^T$  и  $M_2^O$  — значения вторых моментов, рассчитанных для каждой из этих позиций.

Расчет, проведенный на ЭЦМ, показал, что

$$M_2^T = 176,1 \cdot 10^{48} \frac{\gamma_\mu^2 \gamma^2 \hbar^2 S(S+1)}{a^6} = 13,2 \cdot 10^{10} \text{ сек}^{-2};$$

$$M_2^O = 112,6 \cdot 10^{48} \frac{\gamma_\mu^2 \gamma^2 \hbar^2 S(S+1)}{a^6} = 8,5 \cdot 10^{10} \text{ сек}^{-2}.$$

Экспериментальное значение  $\sigma$ , полученное в работе [4], равно  $(0,252 \pm 0,06) \cdot 10^6 \text{ сек}^{-1}$ . (Величина случайной ошибки оценена из рис. 3 этой

работы). Отсюда имеем следующее значение для второго момента:

$$M_2^{\text{э}} = (12,70 \pm 0,60) \cdot 10^{10} \text{ сек}^{-2}.$$

Сравнение теоретических и экспериментальных данных убедительно говорит о том, что  $\mu^+$ -мезоны в кристаллах меди занимают преимущественно тетраэдрические позиции. Отметим, что, например, в кристалле никеля, изоструктурном меди,  $\mu^+$ -мезоны, по данным работы [6], занимают октаэдрические полости.

В справедливости исходных предположений о локализации  $\mu^+$ -мезона в центрах неискаженных пустот можно было бы убедиться, если провести эксперименты по измерению второго момента на монокристаллических образцах, ориентированных в магнитном поле специальным образом. В этой связи отметим, что общие свойства ориентационной зависимости моментов для кристаллов всех сингоний, а так же методика определения координат магнитных ядер в кристаллах на основе теории оптимального эксперимента рассмотрены нами в [7, 8]. В частности, для кристаллов кубической симметрии ориентационная зависимость  $M_2$  полностью определяется двумя структурными параметрами, для наиболее точного экспериментального определения которых необходимо выполнить измерения вторых моментов при двух ориентациях кристалла в магнитном поле. Одна из этих ориентаций соответствует вектору магнитного поля, направленному вдоль оси симметрии 4 порядка ( $H_0 \parallel C_4$ ), другая — вдоль оси 3 порядка кристалла ( $H_0 \parallel C_3$ ). Соответствующие значения моментов, вычисленные для монокристалла меди, равны:

$$H_0 \parallel C_4: \quad M_2^T = 1,24 \cdot 10^{10} \text{ сек}^{-2}; \quad M_2^{\circ} = 19,25 \cdot 10^{10} \text{ сек}^{-2},$$

$$H_0 \parallel C_3: \quad M_2^T = 20,75 \cdot 10^{10} \text{ сек}^{-2}; \quad M_2^{\circ} = 0,95 \cdot 10^{10} \text{ сек}^{-2}.$$

Как видно, максимальное значение второго момента для тетраэдрической позиции приходится на минимальное значение для октаэдрической и наоборот, что должно обеспечить весьма высокую точность при сравнении теоретических и экспериментальных данных.

В заключение выражаем признательность д-ру Паттерсону (Физический институт Университета, Цюрих, Швейцария), обратившему наше внимание на интересную область приложения разрабатываемой нами методики определения координат спинов в кристаллах с помощью метода моментов.

Институт физики  
им. Л.В.Киренского  
Академии наук СССР  
Сибирское отделение

Поступила в редакцию  
1 декабря 1976 г.

### Литература

[1] И.И.Гуревич, А.И.Климов, В.Н.Майоров, Е.А.Мелешко, Б.А.Никольский, В.И.Селиванов, В.А.Суетин. ЖЭТФ, 69, 439, 1975.

- [ 2 ] В.Д.Паттерсон, Н.Граф, В.Хофманн, В.Кюндиг. Abstracts of XIX Congress AMPERE, p. 222, Heidelberg, 1976.
- [ 3 ] А.А.Абрагам. Ядерный магнетизм, М ИИЛ, 1963.
- [ 4 ] В.Г.Гребинник, И.И.Гуревич, В.А.Жуков, А.П.Маныч, Е.А.Мелешко, И.А.Муратова, Б.А.Никольский, В.И.Селиванов, В.А.Суетин. ЖЭТФ, 68, 1548, 1975.
- [ 5 ] М.П.Малков, И.Б.Данилов, А.Г.Зельдович, А.Б.Фрадков. Справочник по физико-техническим основам глубокого охлаждения, М.—Л., Госэнергоиздат, 1963, стр. 79.
- [ 6 ] И.И.Гуревич, А.Н.Климов, В.Н.Майоров, Е.А.Мелешко, Б.А.Никольский, В.С.Роганов, В.И.Селиванов, В.А.Суетин. Письма в ЖЭТФ, 18, 564, 1973.
- [ 7 ] О.В.Фалалеев, Н.А.Сергеев, А.Г.Лундин. Кристаллография, 19, 560, 1974.
- [ 8 ] А.Г.Лундин, О.В.Фалалеев, Н.А.Сергеев. Abstracts of XIX Congress AMPERE, p. 33, Heidelberg, 1976.
-