



Doctoral Thesis

## **Diffusion und Lokalisation positiver Myonen in einkristallinem Kupfer, Vanadium, Niobium und Tantal**

**Author(s):**

Schilling, Hugo

**Publication Date:**

1980

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000215576> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH Nr. 6508

DIFFUSION UND LOKALISATION POSITIVER MYONEN IN EINKRISTALINEM  
KUPFER, VANADIUM, NIOBIUM UND TANTAL

---

A B H A N D L U N G

zur Erlangung des Titels eines Doktors der  
Naturwissenschaften der

EIDGENOESSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE ZUERICH

vorgelegt von

HUGO SCHILLING

dipl. Phys. ETH

geboren am 19. November 1951

von Sirnach und Hauptwil, Kanton Thurgau

Angenommen auf Antrag von

Prof. Dr. H.-J. Gerber

Referent

Prof. Dr. W. Baltensperger

Korreferent

1980

ABSTRACT

The  $\mu^+$ SR (muon spin rotation) method has been used to study the muon spin relaxation rates in single crystals of Cu, V, Nb and Ta as a function of the temperature and the external magnetic field (0.05 - 5.5 kGauss).

The diffusion behaviour of positive muons in fcc Cu can be described by a quantum mechanical diffusion process involving jumps between octahedral interstitial sites. Due to the polaronic effects of the muon, the activation energy is related to the lattice relaxation; the muon total volume change per atomic volume comes out to be  $\sim 26\%$ . This number agrees well with the volume change from the displacement of the muon nearest neighbor nuclei, which is  $\sim 23\%$ . Furthermore the electric field gradient at the muon nearest neighbor nuclei has been determined:  $q = 0.30 \text{ \AA}^{-3}$ .

Positive muons in the bcc metals V, Nb and Ta show a trap limited diffusion behaviour due to impurities. The muons can reach the trapping sites even when concentrations of only a few ppm are present. The undisturbed interstitial diffusion must be very rapid; probably the muons are not bound on those sites. It seems that in all 3 metals 2 different kinds of traps exist, which can probably be identified with interstitial and substitutional impurities. An interpretation of the measurements based on a muon diffusion between "modified" tetrahedral or octahedral interstitial sites is not satisfactory. In addition, it is necessary to assume a big spread out of the muon wave function, or the formation of tunneling states, or a distortion of the local dipole environment of the muons.

A first principles cluster method has been used to study the properties of a positive muon at an octahedral interstitial site in a Cu lattice. Results about the

displacement of the muon nearest neighbor nuclei, the Knight Shift at the muon site and the electric field gradient at the muon nearest neighbor nuclei are presented.

## ZUSAMMENFASSUNG

Mit Hilfe der  $\mu^+$ SR-(Myon-Spin-Rotation) Methode wurden die Dämpfungsraten der Myonpolarisation in einkristallinem Cu, V, Nb und Ta als Funktion der Temperatur (4 - 365 K) und des äusseren Magnetfeldes (0.05 - 5.5 kGauss) gemessen.

Das Verhalten der positiven Myonen in fcc Cu lässt sich aufgrund eines quantenmechanischen Diffusionsprozesses über oktahedrische Zwischengitterplätze erklären. Die Aktivierungsenergie ist durch die vom Myon erzeugten polaronischen Effekte mit der Gitterverzerrung gekoppelt; es folgt eine Volumenaufweitung pro Atomvolumen von  $\sim 26\%$ . Diese Zahl ist in guter Übereinstimmung mit der relativen Aufweitung aus der Verschiebung der nächsten Nachbarn, welche  $\sim 23\%$  ergibt. Ferner wurde der elektrische Feldgradient an den nächsten Nachbarkernorten des Myons bestimmt:  $q = 0.30 \text{ \AA}^{-3}$ .

Die bcc Metalle V, Nb und Ta zeigen ein durch Haftstellen an Verunreinigungen bestimmtes Myondiffusionsverhalten. Auch bei Konzentrationen von wenigen ppm können die Myonen die Haftstellen immer noch erreichen. Die Diffusion über ungestörte interstitielle Plätze muss extrem rasch sein; eventuell werden die Myonen dort gar nicht gebunden. Es scheint in allen 3 Metallen 2 verschiedene Klassen von Haftstellen zu geben, die eventuell durch interstitielle bzw. substitutionelle Verunreinigungen erzeugt werden. Eine Erklärung der Daten durch Diffusion der Myonen über "modifizierte" tetrahedrische oder oktahedrische Zwischengitterplätze ist nicht genügend. Man muss zusätzlich noch annehmen, dass die Ausdehnung der Myonwellenfunktion gross ist, oder dass sich Tunnelzustände formieren, oder dass die nahe Dipolumgebung der Myonen erheblich gestört ist.

Mit einer Cluster Methode beruhend auf ersten Prinzipien wurde das Verhalten eines positiven Myons an einem oktahedrischen Zwischengitterplatz in Cu studiert. Es werden

Resultate bezüglich der Verschiebung der nächsten Nachbaratome des Myons, der Knight Shift am Myonort und des elektrischen Feldgradienten an den nächsten Nachbarkernen des Myons diskutiert.