

О МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНОМАЛЬНОГО МЮОНИЯ В КРЕМНИИ, ГЕРМАНИИ И АЛМАЗЕ

В.М.Самойлов

Для ряда полупроводников вычислены константы сверхтонкого взаимодействия в аномальном мюонии в модели комплекса "диамагнитная молекула плюс неспаренный электрон" с учетом обменного взаимодействия в такой системе. Результаты расчета указывают, что комплекс образуется внутри моновакансии соответствующей кристаллической решетки.

В отличие от нормального мюония Mu (связанное состояние системы μ^+e^-) с изотропным сверхтонким взаимодействием (СТВ) мюона с электроном, аномальный мюоний Mu^* , образующийся в ряде полупроводниковых монокристаллов (кремний¹, германий², алмаз³), проявляет резко выраженное анизотропное СТВ. В отсутствие внешнего поля гамильтониан СТВ в Mu^* имеет вид (см. ^{1,4}): $H = A_{\perp} (I_x S_x + I_y S_y) + A_{\parallel} I_z S_z$ (I, S – операторы спинов μ^+e^- , A_{\perp}, A_{\parallel} – константы СТВ) и отражает аксиальную симметрию системы с осью, параллельной одному из $\langle 111 \rangle$ направлений соответствующей решетки. Более удобным для дальнейшего изложения оказывается иной набор СТВ-констант A_s, A_p , представляющих вклады контактной и магнитной дипольной компонент в полное СТВ и связанных с введенными ранее величинами A_{\perp}, A_{\parallel} соотношениями: $A_s = \frac{1}{3} (A_{\parallel} + 2A_{\perp})$, $A_p = \frac{1}{3} (A_{\parallel} - A_{\perp})$. Эксперимент дает следующие значения (в МГц) этих констант: $A_s = \pm 67$ (Si), ± 96 (Ge), -206 (алм.), $A_p = \mp 25$ (Si), ∓ 35 (Ge), 187 (алм.), т.е. на один – два порядка ниже константы СТВ для Mu в вакууме (4463 МГц). Заметим, что эксперимент определяет знаки констант A_s, A_p однозначно лишь для алмаза (по превращению $\text{Mu} \rightarrow \text{Mu}^*$, см., например, ⁵).

Цель данной работы заключается в отыскании конфигурации, которая отражает основные свойства Mu^* , в том числе анизотропию системы и значения констант $A_{s,p}$ с учетом их знаков. Универсальность модели требует, очевидно, единого набора знаков констант для всех трех объектов, так что далее принимаем $A_s = -67$ (Si), -96 (Ge), $A_p = 25$ (Si), 35 (Ge).

Рассмотрение начнем с модели, предложенной в ⁶ для Mu^* в кремнии (см. рис. 1), которая представляет комплекс, состоящий из диамагнитной молекулы Si – Mu (включающей

нормальный мюоний Mu и образующейся на одном из узлов Si_1 решетки кремния) и неспаренного электрона (НЭ) e^- , локализованного на другом узле Si_2 вблизи от Si_1 . Спин мюона в такой системе взаимодействует (в нулевом приближении) лишь со спином "чужого" электрона (НЭ на Si_2), в то время как спин собственного электрона мюония спарен с валентным электроном (ВЭ) атома Si_1 и в СТВ не участвует. Однако, уже в следующем приближении следует учитывать обменную поляризацию пары ВЭ молекулы под действием НЭ. В этом случае (рис. 1) НЭ, спин которого для определенности ориентирован "вверх", притягивает к себе тот из ВЭ, чей спин направлен "вниз", и отталкивает второй ВЭ со спином "вверх".

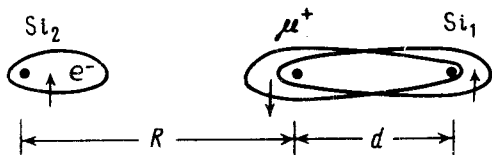


Рис. 1. Кремний. Общий вид комплекса. Обменная поляризация смещает валентные электроны вправо или влево. Ориентации спинов указаны стрелками

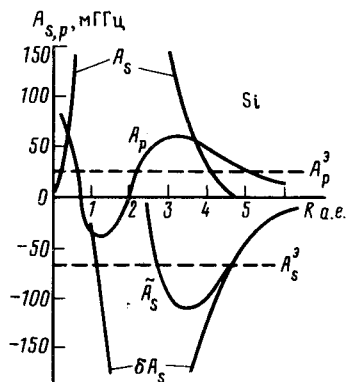


Рис. 2. Кремний. Зависимость вычисленных констант СТВ (в мегагерцах) от расстояния R (в атомных единицах, 1 ат. ед. = 0,529 Å). Пунктиром показаны экспериментальные значения $A_{s,p}^3$

Такой процесс приводит к ненулевой спиновой плотности на мюоне электронов валентной пары, вследствие чего в данной системе наряду с "прямым" СТВ мюона с НЭ (константы A_s, A_p) следует также учитывать "индуцированное" СТВ (константы $\delta A_s, \delta A_p$) мюона с наведенной спиновой плотностью. Суммарное СТВ мюона со всеми тремя электронами определяется перенормированными константами $\tilde{A}_s = A_s + \delta A_s, \tilde{A}_p = A_p + \delta A_p$. Дальнейший расчет показывает, что выполняется неравенство $|\delta A_p| \ll |A_p|$ для всех случаев, поэтому принимаем $\tilde{A}_p \cong A_p$. Напротив, величины δA_s оказываются того же порядка по абсолютной величине, что и A_s , а при значительном удалении μ^+ от Si_2 ($2 \div 3$ Å) значение \tilde{A}_s определяется величиной δA_s почти полностью; именно этим и объясняется отрицательный знак \tilde{A}_s (знак спиновой плотности ВЭ на мюоне).

Конкретный расчет констант СТВ (подробно изложен в ⁷) требует задания волновых функций НЭ и ВЭ. В качестве атомных орбиталей были выбраны $1s$ -орбитали для Mu и sp^3 -гибриды для ВЭ в Si, Ge и C (алмаз), а их радиальные части выбирались в виде орбиталей Слэтера ⁸. Значения δA_s определялись методом "конфигурационного взаимодействия" ⁹, причем в качестве возбуждений выбирались "антисвязывающие" орбитали молекулы (в соответствии с методом ¹⁰). Длины d молекул $\text{Si} - \text{Mu}, \text{Ge} - \text{Mu}, \text{C} - \text{Mu}$ в каждом случае выбирались равными длинам соответствующих связей $\text{Si} - \text{H}$ (1,47 Å), $\text{Ge} - \text{H}$ (1,53 Å), $\text{C} - \text{H}$ (1,09 Å).

Результаты вычисления величин $A_p, A_s, \delta A_s, \tilde{A}_s$ как функций расстояния R (свободный параметр) от μ^+ до Si_2 представлены на рис 2 для кремния. Критерием отбора значений R , отвечающих реальным размерам комплекса, служит равенство $A_p = A_p^3$ при условии, что для тех же значений R имеем $\tilde{A}_s \cong A_s^3$. Из рис. 2 видно, что таким способом получаем несколько разных значений R (то же имеет место в случае германия и алмаза), удовлетворяющих принятому критерию, однако введение дополнительного условия $R \gtrsim d$ (иначе молекула не сможет образоваться) устраняет неоднозначность и в каждом случае получаем по одному значению R , которые равны (в ат. ед.) 5,1 (Si), 4,7 (Ge) и 3,6 (алм.), причем вычисленные величины \tilde{A}_s для тех же R равны (в МГц) - 43 (Si), -44 (Ge) и -66 (алм.).

Полученные таким образом значения R получают естественное объяснение, если предположить, что в каждом случае (Si, Ge, алмаз) комплекс расположен внутри моновакансии (нейтральной) соответствующей решетки (жесткой). При этом молекула образуется на одной из четырех вершин вакансии и обращена мюоном к центру вакансии, а R отвечает расстоянию R_0 от мюона до одной из трех других вершин. Зная параметр решетки и длину молекулы, нетрудно определить R_0 , которые получаются равными (в ат. ед.) 5,2 (Si), 5, 5 (Ge) и 3,3 (алмаз).

Механизм СТВ в столь измененной модели Mu^* требует дополнительного обсуждения ввиду наличия трех оборванных связей (ОС) вместо одного НЭ в первоначальной модели Mu^* . Тем не менее, поскольку полный спин системы трех электронов в низшем состоянии равен $1/2$, две из трех ОС с противоположными ориентациями спинов могут спариваться, так что "свободным" остается спин лишь одного электрона. В ⁷ проанализированы два варианта такой модели. В "динамическом" варианте свободным становится поочередно спин каждой из трех ОС (спины двух других ОС спариваются также поочередно), частота такого процесса $\sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$, т.е. $\gg A_{s, p}$, и мюон "видит" НЭ равномерно размазанным по трем вершинам вакансии. Ось симметрии комплекса в таком случае совпадает с направлением ориентации молекулы, т.е. с одним из $\langle 111 \rangle$ направлений решетки. Этот вариант во многом сходен с рассмотренной в ¹¹ моделью Mu^* в виде аналогичного комплекса внутри дважды заряженной моновакансии. В "статическом" варианте НЭ неизменно остается на одной и той же вершине вакансии, а две другие ОС постоянно спарены между собой. В этом варианте реальный смысл обретает направление от мюона к НЭ, которое, однако, не совпадает ни с одним из направлений $\langle 111 \rangle$ решетки. В ⁷ показано, что в таком случае должно иметь место дублетное расщепление частот прецессии Mu^* во внешнем поле $H \gtrsim 1 \text{ кГс}$ (не исключено, что именно этим объясняется наблюдаемое в Ge (см. ²) дублетное расщепление частот $\sim 5 \text{ МГц}$). Отметим, наконец, что во всех случаях вопрос образования комплекса в моновакансии остается открытым.

Автор благодарит за обсуждение И.С.Шапиро и участников руководимого им семинара.

Литература

1. Patterson B.D., Hintermann A., Kundig W. et al. Phys. Rev. Lett., 1978, 40, 1347.
2. Holzschuh E., Graf H., Recknagel E. et al. Phys. Rev., 1979, B20, 4391.
3. Holzschuh E., Kundig W., Meier P.F. et al. Phys. Rev., 1982, A25, 1272.
4. Белоусов Ю.В., Горелкин В.Н., Смилга В.П. ЖЭТФ, 1978, 74, 629.
5. Patterson B.D. Сб. Muons and pions in material research, ed. by J.Chappert and R.I.Grinszpan, 1984.
6. Барсов С.Г., Геталов А.Л., Гордеев В.А. и др. ЖЭТФ, 1980, 79, 1461.
7. Самойлов В.М. Препринт ИТЭФ № 153, 1984.
8. Хедвиг П. Прикладная квантовая химия, М.: Мир, 1977.
9. Abragam A., Horowitz J., Pryce M.H.L. Proc. Roy. Soc., 1955, A230, 169.
10. McKonnell H.M. J. Chem. Phys., 1956, 24, 764.
11. Sahoo N., Mishra K.C., Das J.P. Phys. Rev. Lett., 1985, 55, 1506.

Поступила в редакцию

4 января 1987 г.

После переработки

5 февраля 1987 г.