Письма в ЖЭТФ, том 24, вып. 1, стр. 12 – 15 *5 июля 1976 г.*

ИНВЕРСОН – ДЕФЕКТОН НОВОГО ТИПА

Б.Л.Оксенгендлер

Предлагается новый механизм делокализации дефектов, основанный на инверсии термов, осуществляемый при электронных переходах.

В работе [1] Андреевым и Лифшицем были введены новые квазичастицы – дефектоны, квантовые свойства которых, разносторонне исследованные (см. обзоры [2, 3]), обуславливались малой массой атомов (H, He), приводящей к большой величине амплитуды нулевых колебаний.

Ниже предлагается новый механизм делокализации атомных частиц (в определенных режимах превращающий дефект в дефектон), основанный на специальном виде зависимости потенциального рельефа дефекта в кристалле от состояния локализованного на дефекте электрона. Непрерывное движение дефекта возможно в результате чередующихся переходов электрона из основного состояния в возбужденное и обратно вблизи определенных точек, соответствующих пересечению термов.

I. Рассмотрим неметалл, имеющий чередующиеся неэквивалентные междоузлия двух видов: (H) и (T), с междоузельным дефектом, на котором локализован электрон. Пусть этот электрон может находиться в двух состояниях: основном ($|_e gr >$) и возбуждённом ($|_e ex >$) (рис. *а*, *б*), которым соответствует два различных потенциальных терма, причем инверсных (минимуму одного соответствует максимум другого и наоборот) (рис. *в*) [4, 5]. Рассмотрим предел низких температур: $T \to 0$. Пусть дефект находится в $i + 1$ междоузлии с электроном, возбужденным внешним агентом в состояние ($|_e ex >$ $|_e ex >$). При этом потенциальным рельефом дефекта служит терм 1. Двигаясь направо (рис. *в*) в состоянии с полной энергией E, дефект может отразиться от барьера и остаться в яме $i + 1$, опускаясь на ее дно в процессе колебательной релаксации. Однако из-за наличия инверсного терма 2 при достижении области пересечения термов (точка B) имеется вероятность

(W) совершения неадиабатического электронного перехода $|_e ex> \to$ $\to |_e gr>$, в результате которого дефект переходит на терм 2, и ему становится доступной область $i + 2$ междоузлия. Если при дальнейшем движении, в точке C произойдет обратный переход $|_e gr> \to |_e ex>$ и соответствующий ему переход на терм 2, то дефект опять пройдет в ранее недоступную область $i + 3$ междоузлия. Непрерывная серия таких неадиабатических переходов приводит к квазисвободному движению сквозь кристалл такого сложного дефекта (атом с перелокализующимся на нем электроном). Соответствующую квазичастицу (см. ниже) логично назвать "инверсоном". Приведенные рассуждения справедливы для области энергий *II* (рис. *в*); для области *I* дополнительная возможность свободного движения осуществляется при полном отсутствии переходов (в надбарьерной области). В *III* области энергий дефектонное состояние невозможно.

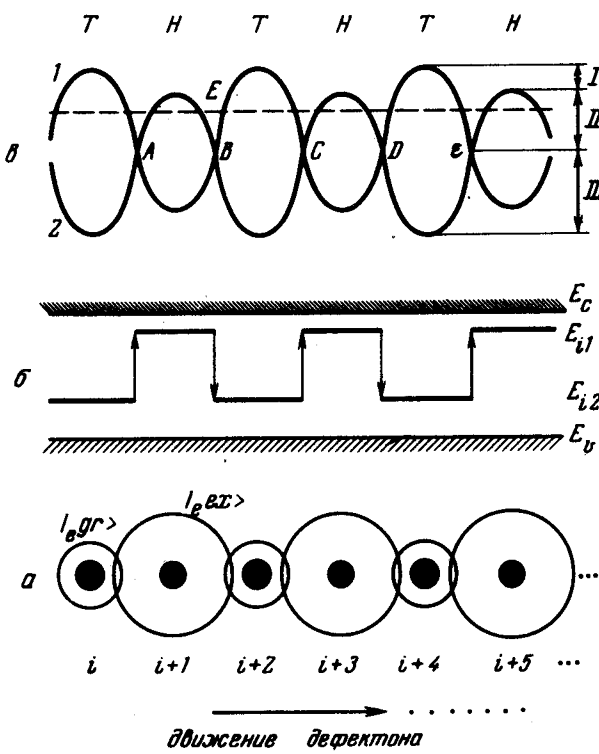

Схема инверсона: *а* – изображение периодического возбуждения локализованного электрона (черные кружочки – "керн" дефекта), *б* – изменение состояния локализованного электрона в зонной схеме, *в* – потенциальный рельеф дефекта в кристалле (*1* – для возбужденного электрона и *2* – для невозбужденного электрона)

II. Учитывая различные каналы распада "инверсона" можно записать условия его существования. Пусть $\tau_{од} = \tau_0 / W$ – время оседлой жизни дефекта (τ_0 – период колебаний атома). Тогда инверсон будет хорошей квазичастицей при условии $\tau_{од}$ мало по сравнению с характерными временами распада дефекта ионизацией или рекомбинацией, а также с временами релаксации колебательной энергии инверсона и направления его квазиимпульса. В условиях низкой температуры и отсутствия сверхплотной ионизации с учетом принципа Пригожина – Бака [6], можно получить температурное ограничение инверсонного состояния: $T << (1/8)\Theta W^{1/9}$, где Θ – температура Дебая.

III. В приближении сильной связи из уравнений для амплитуд переходов

$$|2n> \equiv |H> \to |T>, \qquad |2n+1> \equiv T> \to |H>:$$

$$i\hbar \dot{C}_{2n} = E_0 C_{2n} - A(C_{2n-1} + C_{2n+1}); \quad i\hbar \dot{C}_{2n+1} = E_0 C_{2n+1} - A(C_{2n} + C_{2n+2})$$

легко получаем закон дисперсии: $E(q) = E_0 \mp 2|A|\cos qa$, где $A \approx$ $\approx < {}_e ex| < X_{ex} | \hat{V} | X_{gr} > |_e gr >$, причем $\hat{V}$ – оператор неадиабатичности; $|X_{ex}>$, $|X_{gr}>$ – вектора (колебательных) состояний дефекта для возбужденного и основного состояний локализованного электрона соответственно. Полагая для ширины зоны $\Delta\epsilon = 4|A| \approx \hbar/\tau_{ОД}$, получаем оценку для эффективной массы: $M^* \approx \hbar\tau_0/2Wa^2 \approx 5\cdot 10^{-25}/W$ г. Ясно, что эффективная масса существенно зависит от номера колебательного состояния: $M^* \sim [< X_{gr}|X_{ex}>]^{-1}$.

IV. Диффузионные свойства инверсона во многом аналогичны свойствам легких дефектов Андреева –Лифшица [1 – 3, 7]. Имеются, однако, и различия. В случае совпадения расщепленных колебательных уровней в инверсных термах доминирует когерентная диффузия. В применении к инверсону для отдельной зоны получаем: $D_c \approx v^2 t_{tr} \approx$ $\approx (D_0/8)(\Theta/8T)^9$. При неперекрывающихся уровнях важен вклад некогерентной диффузии и механизма спонтанного излучения фононов [8], которые для инверсона дают: $D_h \approx D_0 (16/\omega_D \tau_0)(T/\Theta)^7$ и $D_{сп} \lesssim$ $\lesssim D_0 (\gamma^2/\omega_D^4 M^2 \pi^4)$. Здесь всюду $D_0 = W^2 s^2 \tau_0$ (s – скорость звука), M – масса диффузанат; γ – силовая константа термов. Важно отметить, что в общем случае несовпадающих уровней даже при отсутствии рассеяния инверсона на дефектах, механизм спонтанного излучения будет доминировать при $T < \Theta\,[\tau_0 \gamma^2/16\omega_D^3 M^2 \pi^4]^{1/7}$. Замечания. 1. Приведенные рассуждения легко обобщаются на случай вакансий, дислокационных перегибов, split- и bond-конфигураций и т. д. при локализации на них электронных возбуждений, осуществляющих инверсию термов 2. Возможно, что именно инверсоны уже давно наблюдаются в низкотемпературных (1 – 20К << Θ) радиационных экспериментах на полупроводниках (проблема "длинопробежной" миграции) [9]. В пользу этого говорит согласие дефектонной модели "вытеснения" примесей собственными междоузлиями [10] с экспериментом [9], из чего для удельных потерь движущегося междоузлия следует $(-dE/dx) << 0{,}7$ эв/Å, что значительно меньше обычных, обусловленных упругими столкновениями (25 эв/Å).

В заключение хочу выразить глубокую благодарность А.Ф.Андрееву за внимание к работе, интересное обсуждение и ценные советы.

Институт ядерной физики
Академии наук Узбекской ССР

Поступила в редакцию
21 апреля 1976 г.

Литература

[1] А.Ф.Андреев, И.М.Лифшиц. ЖЭТФ, 56, 2057, 1969.

[2] А.Ф.Андреев. УФН, 118, 251, 1976.

[3] R.A.Guyer, R.C.Richardson, L.I.Zane. Rev. Mod. Phys., 43, 532, 1971.

[4] Б.Л.Оксенгендлер. Сб. Прикладная ядерная физика. Материалы апрельской конф. молодых ученых УзССР, 1971г. Ташкент, изд. "Фан", 221, 1973; Сб. Метод радиационных воздействий в исследовании структуры и свойств твердых тел, Ташкент, изд. "Фан", 16, 1971.

[5] J.Bourgoin, J.Corbett. Phys. Lett., A38, 135, 1972.

[6] J.Prigogine, T.Bak. J. Chem. Phys., 31, 1368, 1972.

[7] Yu.Kagan, M.I.Keinger. J. Phys. C7, 2791, 1974.

[8] А.Ф.Андреев, А.Э.Мейерович. ЖЭТФ, 67, 1559, 1974.

[9] G.Watkins, Rad. Damage Semicond, Dunod, Paris. 97, 1965; Lattice Defects in Semicond, Ins. Phys., Conf. Ser. №23, London – Bristol, 1, 1975.

[10] Д.Р.Мусин, Б.Л.Оксенгендлер, М.С.Юнусов. Изв. АН УзССР, физ-мат наук , №4, 67, 1975.