

ДИФФУЗИОННАЯ ПОДВИЖНОСТЬ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ В ТВЕРДОМ ГЕЛИИ

В. Б. Шикин

Целью данной статьи является вычисление подвижности отрицательных ионов в предположении, что эта подвижность имеет диффузионное происхождение. Электрон, находящийся в пустотном пузырьке радиуса $a \approx 10 \text{ \AA}$ [1] при включении внешнего электрического поля напряженности E начинает оказывать несимметричное давление на стенки пузырька. Это давление после некоторого процесса подстройки приводит к возникновению стационарных диффузных потоков вакансий из участков с повышенным давлением к местам с пониженным давлением. Существование этих потоков и вызывает движение пузырька как целого в направлении ведущего поля E . Диффузионные задачи подобного типа уже встречались, например, в работах [2] при изучении диффузионно-вязкого течения поликристаллов под действием приложенных извне давлений. Поэтому необходимая нам система уравнений и ее обоснование могут быть полностью заимствованы из этих работ.

Стационарное объемное поле вакансий $c(r)$ описывается гармоническим уравнением¹⁾

$$\Delta c = 0 \quad (1)$$

с граничным условием

$$c_{r=a} = \frac{c_0 \omega_0}{kT} p_n.$$

p_n – нормальные давления на поверхности иона радиуса a , c_0 – равновесная концентрация вакансий, ω_0 – объем одной вакансии, k – постоянная Больцмана, T – температура. Нормальные потоки вакансий на поверхности иона определяют локальную скорость перемещения элемента граничной поверхности отрицательного иона $v_n(\theta)$

$$D \left. \frac{\partial c}{\partial r} \right|_{r=a} = v_n(\theta) \quad (2)$$

D – коэффициент диффузии вакансий.

Для того чтобы ион двигался как целое без деформации, необходимо выполнение условия $v_n(\theta) = V_0 \cos \theta$, где V_0 – скорость движения иона как це-

¹⁾ Мы пренебрегаем поверхностной диффузией по поверхности иона, так как поверхностный слой иона находится под большим сферически симметричным электронным давлением и, следовательно, поверхностная диффузия не может заметно превышать объемную.

лого. Таким образом, определяя давления на поверхности иона и решая гармоническую задачу (1) – (2), удается связать V_0 с напряженностью приложенного электрического поля, т.е. найти подвижность иона $\mu = V_0 / E$.

Величина электронного давления на поверхности иона $p_{Эл}^I$ может быть получена с помощью следующих формул

$$(p_{Эл}^I)_i = P_{ik} n_k,$$

$$P_{ik} = \frac{\hbar^2}{4\pi} \left[\frac{\partial \psi}{\partial x_i} \frac{\partial \psi^*}{\partial x_k} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x_i \partial x_k} + \text{к.с.} \right]. \quad (3)$$

Здесь $\psi(r, \theta)$ решение уравнения Шредингера для электрона в сферической потенциальной яме, задаваемой граничным условием $\psi(r, \theta)|_{r=a} = 0$, при наличии постоянного возмущающего электрического поля амплитуды E . В результате, в первом порядке теории возмущения имеем для $p_{Эл}^I$ такое выражение

$$p_{Эл}^I = \frac{\pi \hbar^2}{m a^2 (2\pi a)^{1/2}} \sum_{\ell} \frac{E_{0\ell}}{\lambda_0 - \lambda_{\ell}} \frac{\partial}{\partial r} i_{\ell} \left(\frac{\pi f_{\ell} r}{a} \right) F_{\ell}(\cos \theta) \Big|_{r=a} \quad (3a)$$

$$\ell = 1, 3, 5, \dots$$

m – масса электрона, $E_{0\ell}$ – матричные элементы от потенциала возмущающего электрического поля по собственным волновым функциям данной задачи, λ_{ℓ} – уровни энергии невозмущенной задачи, $F_{\ell}(\cos \theta)$ – полиномы Лежандра, $i_{\ell}(\pi f_{\ell} r/a)$ сферические функции Бесселя. Коэффициенты f_{ℓ} определены условием $i_{\ell}(\pi f_{\ell} a) = 0$.

Выражение (3a) для $p_{Эл}^I$ содержит все нечетные угловые гармоники $F_{\ell}(\cos \theta)$. Из них только первая гармоника $\sim \cos \theta$ поддерживает постоянное движение иона вдоль поля. Все остальные гармоники нарушают сферическую форму иона, и потому со временем должны быть компенсированы за счет дополнительных лапласовского p_{σ} и электронного $p_{Эл}^{II}$ давлений, возникающих на поверхности иона при его деформации. Таким образом, полагая избыточное давление на поверхности иона равным $p_{Эл}^I + p_{\sigma} + p_{Эл}^{II}$, связывая первую гармонику диффузионной задачи (1)–(2) с первой гармоникой $p_{Эл}^I$ и, требуя чтобы все диффузионные потоки с высшими гармониками обращались в ноль (это условие определяет давления p_{σ} и $p_{Эл}^{II}$), мы приходим к следующим окончательным формулам для V_0 и малой деформации иона $\xi(\theta)$ ($a(\theta) = a[1 + \xi(\theta)]$). Связь между $\xi(\theta)$ и p_{σ} , $p_{Эл}^{II}$ имеет тот же вид, что и в задаче о вычислении собственных частот отрицательного пузырька в жидком гелии [3]

$$V_0 = D \frac{c_0 \omega_0 \pi \hbar^2}{kT \pi a^5} \frac{\Lambda}{|\lambda_0 - \lambda_1|} eE,$$

$$\Lambda = \frac{2\beta_1 \int_0^1 i_0(\pi x) i_1(\pi \beta_1 x) x^3 dx}{i_0(\pi \beta_1) i_2(\pi \beta_1)} \frac{\partial}{\partial x} i_1(\pi \beta_1 x) \Big|_{x=1} \cdot \beta_1 = 1,4303,$$

$$\xi(\theta) = \sum_{\ell} \xi_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta), \quad \xi_{\ell} = \frac{(\rho_{2,1}^{\ell})_{\ell}}{\frac{\sigma}{a} [4\pi s_{\ell} + \ell(\ell+1) - 2]},$$

$$s_{\ell} = \frac{i_{\ell}'(\pi)}{i_{\ell}(\pi)} - \frac{i_0''(\pi)}{i_0'(\pi)}, \quad \ell = 3, 5, 7 \dots$$

Учитывая, что по порядку величины $\Lambda \sim 1$, $|\lambda_0 - \lambda_1| \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$,

$\sigma = 10^{-7}$ см, $\omega_0 = 10^{-22} - 10^{-23}$ см³, $c_0 E$ — коэффициент самодиффузии $\sim 10^{-7} - 10^{-8}$ см²/сек [4], находим, что при $T = 2^\circ\text{K}$ μ имеет оценку $\mu \approx 5 \cdot 10^{-6}$ см²/вольт.сек. Эта величина находится в качественном согласии с недавно полученными экспериментальными данными о подвижности отрицательных ионов в твердом гелии (см. Кешишев, Межов-Деглин, Шальников [5]).

Укажем еще на ограничения, которым должна удовлетворять величина внешнего электрического поля для применимости полученных результатов. Это ограничение сводится к неравенству $V_0 \ll c/a$ или, с учетом полученного выражения для V_0

$$c_0 \frac{\omega_0}{a^3} \frac{e E a}{1 T} \ll 1.$$

Для полей $E \sim 10^4$ в/см, использованных в экспериментах [5], это неравенство выполняется с хорошим запасом.

Автор благодарен А.Ф.Андрееву, М.И.Каганову и А.И.Шальникову за обсуждение работы и полезные замечания.

Физико-технический институт
низких температур
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
13 ноября 1970 г.

Литература

- [1] M.F.Cohen, J.Jortner. Phys. Rev., 180, 238, 1969.
- [2] И.М.Лицшиц. ЖЭТФ, 44, 1349, 1963; И.М.Лицшиц, Б.Б.Шикин. ФТТ, 6, 2780, 1964; А.Андреев, К.Кешишев, Л.Межов-Деглин, А.Шальников. Письма в ЖЭТФ, 9, 507, 1969.
- [3] E.F.Cross, H.Tung-Li. Phys. Rev., 170, 253, 1968.
- [4] H.A.Reich. Phys. Rev., 129, 630, 1963.
- [5] К.О.Кешишев, Л.П.Межов-Деглин, А.И.Шальников. Письма в ЖЭТФ, 12, 234, 1970.