Письма в ЖЭТФ, том 17, вып. 3, стр. 161 – 164　　　　*5 февраля 1973 г.*

О ПОДВИЖНОСТИ ПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ ИОНОВ В ТВЕРДОМ ГЕЛИИ

В. П. Минеев

В работе предложен вакансионный механизм подвижности ионов в твердом гелии. Рассмотрены два случая подвижности: диффузионный и кинетический. Проведено сопоставление с имеющимися экспериментальными данными.

Подвижность ионов в твердом гелии впервые измерялась Шальниковым с сотрудниками [1]. В работах Шикина [2, 3] был предложен вакансионный механизм подвижности отрицательных ионов. Отрицательный ион (пузырек, радиусом в несколько межатомных расстояний, с заключенным в нем электроном) движется под действием приложенного к нему электрического поля, благодаря возникающим в твердом гелии диффузионным потокам вакансий из области повышенного давления в область пониженного. В работе [3] также указывалось, что аналогичный механизм подвижности положительных ионов не может иметь места, ибо вероятность подхода вакансии на межатомное расстояние к положительному иону ничтожна мала из-за возникающего, благодаря поляризации, вокруг положительного заряда, большого давления. Однако, из эксперимента [4] известно, что подвижность экспоненциально падает с понижением температуры и показатель экспоненты близок к показателю экспоненты для концентрации вакансий в твердом гелии (20 – 40°). Всюду далее численные данные приводятся для гелия-4. В настоящем сообщении предложен вакансионный механизм подвижности положительных ионов в твердом гелии.

Рассмотрим, вначале, положительный ион в твердом гелии без внешнего поля. Энергия вакансии, находящейся на расстоянии r от положительного иона, отсчитанная от энергии вакансии в отсутствие иона, будет в основном определяться выражением

$$V_p(r) = \frac{1}{2}\,\frac{a\ell^2}{r^4}\,\omega ,$$

где a – удельная поляризуемость гелия, ω – объем вакансии (объем, приходящийся на атом). Поэтому концентрация вакансий будет иметь вид

$$c(r) = c_o \exp\left\{-\frac{1}{2}\,\frac{a\ell^2\omega}{r^4 T}\right\}, \tag{1}$$

где

$$c_o = \exp\left\{-\frac{\Delta}{T}\right\} \tag{2}$$

концентрация вакансий на бесконечности.

В формуле (2), Δ – энергия, необходимая для появления вакансии в твердом гелии (см. [5]). Из выражения (1) видно, что концентрация до расстояний, определяемых из соотношения

$$\frac{1}{2}\ \frac{a\,\ell^2\omega}{R^4T}\ \sim 1 \qquad (3)$$

много меньше c_0, а для $r > R$ равна концентрации на бесконечности – c_0. Подставляя в (3) $a\omega = a_0 = 1{,}96\cdot10^{-25}\ см^2$; $\ell = 4{,}8\cdot10^{-10}$ед. зар. CGSE, $T\sim1°$, получим $R\sim10^{-7}\ см$. Заметим, что R слабо зависит от температуры. Таким образом, мы имеем вокруг положительного иона в гелии сферу, радиуса $R\sim10^{-7}\ см$ ($\sim$2,8 межатомных расстояния), внутрь которой вакансии не проникают. Если мы теперь включим поле, то появится сила, приложенная в центре сферы, которая приведет к появлению добавочного распределения давлений в гелии и возникающим, в результате этого, потокам вакансий вне сферы.

Следуя работе [3], можно рассмотреть два случая: диффузионной подвижности вакансий и случай делокализованных вакансий – вакансионов, по-видимому, имеющий место в твердом гелии. В первом случае необходимо решить задачу стационарной диффузии вне нашей сферы (см. [2, 6]).

$$\Delta c = 0, \qquad (4а)$$

$$c(R) = -\frac{p_n\omega}{T}c_0 \qquad (4б)$$

Здесь под c понимается отклонение концентрации от равновесной, p_n – давление на поверхности сферы радиуса R. Это давление находим из задачи о δ-силе (см. [7]) $e\vec{\mathcal{E}}$, приложенной в центре сферы. Вектор смещения среды под действием δ-силы:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \ell\frac{1+\sigma}{8\pi E(1-\sigma)}\ \frac{(3-4\sigma)\vec{\mathcal{E}} + \mathbf{n}(\mathbf{n}\vec{\mathcal{E}})}{r}.$$

Здесь E и σ модуль Юнга и коэффициент Пуассона твердого гелия; $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Зная $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, находим тензор напряжений σ_{ik} и

$$p_n = \sigma_{ik}n_i n_k = -\frac{(2-\sigma)}{4\pi(1-\sigma)}\ \frac{e(\vec{\mathcal{E}}\mathbf{n})}{R^2}. \qquad (5)$$

Отметим, что граничное условие (4б) имеет место лишь при выполнении требования $p_n\omega/T \ll 1$, которое означает, что на поверхности сферы, радиуса R, энергия вакансии, благодаря деформации за счет внешней силы $e\vec{\mathcal{E}}$, мала, по сравнению с температурой, тогда как энергия, благодаря поляризации вокруг положительного иона $V_p(R)$, порядка температуры. Это дает нам возможность рассматривать движение положительного иона в твердом гелии, как движение безвакансионного шарика с ионом в центре. Легко проверить, что требование $p_n\omega/T \ll 1$ выполняется вплоть до полей $\mathcal{E}\sim10^5\ в/см$. При оценке мы полагали $\omega\sim3{,}5\cdot10^{-23}\ см^3$; $T\sim1°$; $\sigma\sim1/3$; $R\sim10^{-7}\ см$.

Итак, решаем уравнение (4а) с граничным условием (4б) (см. [2, 6]), а затем вычисляем нормальную скорость единичной площадки на поверхности сферы по формуле:

$$v_n = D \left.\frac{\partial c}{\partial n}\right|_{r=R}, \qquad (6)$$

где D – коэффициент диффузии вакансий, который в случае квантовой диффузии можно оценить $D \sim a^2/\tau \sim a^2\epsilon/\hbar$, здесь a – межатомное расстояние, τ – время жизни вакансии на одном узле, ϵ – ширина вакансионной зоны. Получаем скорость иона:

$$\left.\begin{aligned} v &= \frac{v_n}{\cos\Theta} = \frac{2-\sigma}{2\pi(1-\sigma)} \frac{a^2\epsilon\omega e\mathcal{E}}{\hbar R^3} \frac{c_0}{T} \\ \mu &= v/\mathcal{E}. \end{aligned}\right\} \qquad (7)$$

Здесь θ – угол между n и $\vec{\mathcal{E}}$, μ – подвижность.

Во втором случае нормальная скорость единичной площадки на поверхности сферы будет пропорциональна отклонению концентрации вакансионов на поверхности сферы от равновесной, задаваемой формулой (4б), и средней максвелловской скорости вакансионов $\sqrt{2T/M}$ (M – эффективная масса вакансиона). Точное решение такой задачи (см. [3]) приводит к выражению:

$$v = \frac{v_n}{\cos\theta} = \frac{2-\sigma}{4\pi(1-\sigma)} \frac{e\mathcal{E}\omega c_0}{R^2\sqrt{2\pi MT}}.$$

Вспоминая c_0 из (2) получим:

$$\left.\begin{aligned} \mu &= \mu_0(T)e^{-\Delta/T} \\ \mu_0(T) &= \frac{2-\sigma}{2\pi(1-\sigma)} \frac{e\omega}{R^2\sqrt{2\pi MT}} \end{aligned}\right\} \qquad (8)$$

Показатель экспоненты Δ – щель для рождения вакансии, по данным работы [5], изменяется примерно от 20 до 35° при изменении удельного объема гелия от 21 до 18 *см³/моль*, что довольно хорошо совпадает с величиной и изменением показателя экспоненты для подвижности (см. [4]). Для того, чтобы оценить предэкспоненту, вычислим M по формуле $M \sim (\hbar^2/2a^2)(\epsilon/z)^{-1}$, ϵ – ширина вакансионной зоны ($\epsilon \sim 2-3°$, см [5]), a – межатомное расстояние ($a \sim 3{,}6$ Å), Z – число ближайших соседей. Получим $M \sim 2M_{He} \sim 10^{-23}$ г. Подставляя вышеприведенные остальные численные данные для предэкспоненты при $T \sim 1°$, $\mu_0 \sim 3$ (ед. CGSE), что примерно на два порядка меньше, чем по экспериментальным данным [4]. Такое расхождение можно объяснить тем, что в эксперименте на самом деле измерялась не подвижность, а ток, зависимость которого от температуры качественно должна совпадать с зависимостью подвижности от температуры, но из-за эффекта пространственного заряда невозможно установить точное соответствие между током и подвижностью. Таким образом, зависимость (8) находится в качественном согласии с экспериментом

[4]. Оценка предэкспоненты по формуле (7) приводит примерно к тем же значениям, что и (8).

Автор благодарен В.Л.Покровскому за полезные обсуждения.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
18 декабря 1972 г.

Литература

[1] К.О.Кешишев, Л.П.Межов-Деглин, А.И.Шальников. Письма в ЖЭТФ, 12, 234, 1970.

[2] В.Б.Шикин. Письма в ЖЭТФ, 13, 65, 1971.

[3] В.Б.Шикин. ЖЭТФ, 61, 2053, 1971.

[4] G. A. Sai-Halasz, A. J. Dahm. Phys. Rev. Lett., 28, 1244, 1972.

[5] В.П.Минеев. ЖЭТФ, 63, 1822, 1972.

[6] А.Андреев, К.Кешишев, Л.Межов-Деглин, А.Шальников. Письма в ЖЭТФ, 9, 507, 1969.

[7] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. "Теория упругости", М., изд. Наука, 1965, стр. 43.