

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ ЗАДАЧА ЛАНДАУ–ЗИНЕРА В ЭФФЕКТЕ ДЛИННОПРОБЕЖНОЙ МИГРАЦИИ

Б. Л. Оксенгендлер

*Институт ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан
702132, Ташкент, Узбекистан*

*Н. Н. Тураева**

*Институт химии и физики полимеров Академии наук Республики Узбекистан
700128, Ташкент, Узбекистан*

Поступила в редакцию 18 октября 2005 г.

Из исследований радиационных эффектов в полупроводниках при низких температурах известно, что межузельный атом мигрирует на расстояние до 1000 \AA (эффект Воткинса [1]). Интерпретация этого эффекта основана на инверсии кривых потенциальной энергии межузельного атома в полупроводниках при его перезарядке. При низких температурах возможен каскад безызлучательных переходов между основным и возбужденным состояниями перелокализуемого электрона, что ведет к когерентному туннелированию межузельного атома сквозь решетку. Описание этого эффекта с помощью S -матрицы рассеяния позволяет получить закон дисперсии и выражение для эффективной массы такой квазичастицы, названной инверсоном.

PACS: 61.80.Az, 66.35.+a

1. ВВЕДЕНИЕ

Эффект Воткинса [1] является одним из принципиально важных эффектов радиационной физики низких температур в полупроводниках. Суть эффекта состоит в том, что при облучении электронами с энергией 1.5 МэВ p -легированного кремния при 4.2 К обнаруживаются спектры вакансий и межузельного примесного атома (Al, V), причем скорость введения вакансий оказывается зависящей от концентрации легирующей примеси. При анализе многочисленных экспериментальных данных по этому эффекту был выявлен ряд парадоксальных результатов, одним из которых является природа длиннопробежной миграции собственного межузельного кремния при столь низких температурах. Для объяснения этого парадокса было предложено несколько идей [2–4]. Первой идеей, радикально изменившей взгляд на диффузию межузельных атомов кремния, стала идея инверсного механизма миграции при перезарядке Si^+ [2, 3], суть которой сво-

дится к тому, что при перезарядке Si^+ потенциальная энергия для миграции инвертируется так, что в результате получается атермическая миграция, не требующая энергии активации. При дальнейших исследованиях идея конверсии электронной энергии при перезарядке в энергию возбуждения атомных степеней свободы получила существенное развитие. Так, в работе [5] был предложен еще один интересный случай, когда атермическая миграция носит характер когерентного перемещения дефекта при переходе электрона из различных возбужденных состояний в основное и обратно. Такое движение представляет собой новую квазичастицу, названную инверсоном, суть которой видна из рис. 1.

В настоящей работе будут рассмотрены некоторые квантовые свойства такого дефекта. На основе метода S -матрицы вычислим одну из важнейших характеристик в физике твердого тела — закон дисперсии для такой квазичастицы.

В основе движения инверсона лежат безызлучательные переходы [6], для которых можно записать следующее выражение для коэффициента диффузии (режим предельной локализации):

*E-mail: nturaeva@sarkor.com

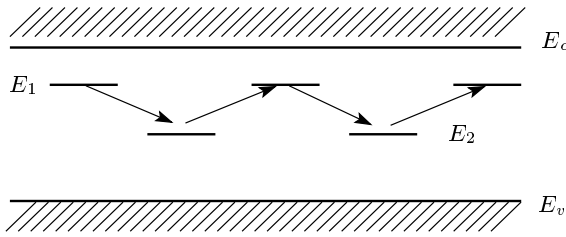


Рис. 1. Последовательность электронных переходов инверсона

$$D = a^2 W, \tag{1}$$

где

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \omega_e \left(\frac{\omega_e}{\omega_{ph}} \right) \eta^6 F_{FC},$$

a — длина скачка, ω_e — характерная частота электронных переходов, ω_{ph} — характерная фоновая частота, $\eta = \sqrt[4]{m_e/m}$ — параметр неадиабатичности, выраженный через электронную и атомную массы, F_{FC} — фактор Франка – Кондона.

2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ДЕФЕКТА С ПЕРЕЛОКАЛИЗУЮЩИМСЯ ЭЛЕКТРОНОМ

Напишем уравнение Шредингера для системы «решетка + дефект с перелокализующимся электроном»:

$$H\Psi = E\Psi, \tag{2}$$

где $H = T_r + T_R + V(r, R, \rho) + U(R, \rho)$. Здесь T_r , T_R — операторы кинетической энергии электрона и дефекта, $V(r, R, \rho)$ — потенциальная энергия взаимодействия электрона с дефектом в решетке с набором координат ρ , $U(R, \rho)$ — потенциальная энергия дефекта с решеткой.

Электронные решения уравнения Шредингера для нулевого гамильтониана представляют собой два инверсных пересекающихся периодических терма (в точке пересечения U_0), которые определяют начальное и конечное электронные состояния системы. Тогда полный гамильтониан равен

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dR^2} + H_0. \tag{3}$$

Полная волновая функция системы представляется в виде разложения

$$\Psi_n = \sum_{i=1,2} \varphi_{in}(r, R, \rho) \chi_{in}(R, \rho). \tag{4}$$

Учет неадиабатического взаимодействия в гамильтониане дает решения, асимптотически совпадающие с решениями для H_0 , но отличающиеся в области пересечения. Адиабатические термы здесь несколько разойдутся от точки пересечения, их разница равняется

$$\Delta U = \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4V^2}, \tag{5}$$

где $\varepsilon_{1,2}$ — адиабатические электронные потенциалы, V — неадиабатический член.

3. S-МАТРИЧНЫЙ АНАЛИЗ

Таким образом, каждая пара близких колебательных уровней, между которыми происходит переход, размывается в зону, и дефект превращается в дефектон — инверсон. Найдем теперь одну из важнейших характеристик в физике твердого тела — закон дисперсии для такой квазичастицы. Для этого воспользуемся методом S -матрицы [7] в модели линейных термов, когда потенциальные термы предполагаются линейно зависимыми от координаты с постоянной силой. Здесь необходимо различать два случая, когда эти силы разного знака и одного знака. В нашем случае наклон этих термов разный, поскольку переход происходит с переходом дефекта в соседнее междуузлия. Для этого случая задача безызлучательного перехода сводится к квантовым эффектам, аналогичным надбарьерному отражению и подбарьерному прохождению [8]. Задача формулируется на основе адиабатических амплитуд волны де Бройля инверсона, асимптотика которых в квазиклассическом приближении записывается в виде суммы приходящих и уходящих волн:

$$\chi_n = A_n^- Z_n^- + A_n^+ Z_n^+, \tag{6}$$

где A_n^\pm — постоянные и

$$Z_n^\pm = \left(\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2(E - E_n)}} \right)^{1/2} \times \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} \int \sqrt{2(E - E_n)} dq \mp \frac{i\pi}{4} \right).$$

Тогда S -матрицу или матрицу перехода можно представить в следующем виде:

$$\begin{bmatrix} A_1^+ \\ A_2^+ \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} A_1^- \\ A_2^- \end{bmatrix}. \tag{7}$$

Для определения энергетического спектра удобнее пользоваться другой матрицей — матрицей реакции,

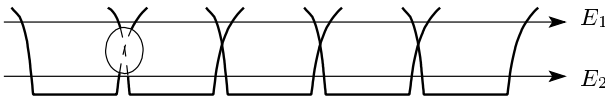


Рис. 2. Последовательность когерентных безызлучательных переходов в областях, когда полная энергия лежит над точкой пересечения, около точки пересечения и ниже точки пересечения потенциальных термов

которая связывает волны справа с волнами слева от барьера:

$$\begin{bmatrix} A_2^- \\ A_2^+ \end{bmatrix} = R \begin{bmatrix} A_1^+ \\ A_1^- \end{bmatrix}. \quad (8)$$

В модели Кронига–Пенни, в которой потенциальные ямы имеют прямоугольную форму, волновую функцию дефекта можно представить в виде плоских волн. Тогда в простейшем случае, когда дефект проходит в соседнее межузельное положение путем одного безызлучательного перехода, волновой вектор инверсона выражается через матрицу реакции следующим образом [7]:

$$\cos ka = \frac{1}{2} \text{Tr}(RT), \quad (9)$$

$$\begin{bmatrix} e^{i\chi a} & 0 \\ 0 & e^{-i\chi a} \end{bmatrix},$$

где Tr означает сумму диагональных элементов матрицы, T — матрица трансляции, $\chi = 2mE/\hbar^2$, a — расстояние между соседними ямами, m — масса дефекта. В элементарной ячейке число таких переходов равно двум, так как потенциальная кривая инвертируется два раза на одном межатомном расстоянии. Тогда закон дисперсии инверсона можно записать как

$$\cos ka = \frac{1}{2} \text{Tr}(RT)^2. \quad (10)$$

При миграции дефекта с перелокализующимся электроном в n раз на расстоянии a закон дисперсии можем записать как

$$\cos ka = \frac{1}{2} \text{Tr}(RT)^n. \quad (11)$$

При определении вида матрицы реакции для безызлучательного перехода необходимо различать три области безызлучательного перехода по отношению к точке пересечения (рис. 2):

- 1) энергия дефекта находится выше точки пересечения (квазиклассический случай);
- 2) область около точки пересечения;

3) полная энергия ниже точки пересечения, т. е. туннельное просачивание через барьер.

В квазиклассическом случае, когда скорость движения дефекта можно считать постоянной, задача близка к случаю Ландау–Зинера [9]. В этом случае адиабатические функции справа от области связи могут быть сшиты с адиабатическими функциями слева от области связи, причем для сшивки следует использовать решение Ландау–Зинера. Тогда матрица реакции имеет вид [8]

$$R = \frac{1}{1 + (1 - P)e^{2i\Phi}} \times \begin{bmatrix} P & -2i(1-P)^{1/2} \cos \Phi \\ -2i(1-P)^{1/2} \cos \Phi & P \end{bmatrix}, \quad (12)$$

где $P = \exp(-2\pi\delta)$ — вероятность Ландау–Зинера, $\Phi = \Phi_0 - \gamma$, Φ_0 — интеграл действия между точками поворота на верхнем адиабатическом терме, γ — динамическая фаза. Подставляя это выражение в закон дисперсии инверсона для случая, когда дефект проходит через одну элементарную ячейку, получим

$$\cos ka = \frac{1}{2(1 + (1 - P)e^{2i\Phi})^2} \cos 2\chi a - \frac{4(1 - P) \cos^2 \Phi}{(1 + (1 - P)e^{2i\Phi})^2}. \quad (13)$$

4. ХАРАКТЕРИСТИКИ ИНВЕРСОНА

Учитывая зависимость $\chi = 2mE/\hbar^2$, мы можем написать следующее выражение для полной энергии инверсона:

$$E = c_1 \arccos(c_2 \cos ka + c_3), \quad (14)$$

где

$$c_1 = \frac{\hbar^2}{2ma}, \quad c_2 = \frac{(1 + (1 - P)e^{2i\Phi})^2}{P^2},$$

$$c_3 = \frac{4(1 - P)}{P^2}.$$

Отсюда легко определить скорость и эффективную массу квазичастицы:

$$V = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}, \quad m^{*-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2}.$$

Вычисляя эффективную массу инверсона, находим

$$m^{*-1} = \frac{1}{4ma^2} \left[\arccos(c_2 \cos ka + c_3) \times \left(-\frac{c_2^2 a^2 (c_2 \cos ka + c_3) \sin^2 ka}{\sqrt{(1 - (c_2 \cos ka + c_3)^2)^3}} + \frac{c_2 a^2 \cos ka}{\sqrt{1 - (c_2 \cos ka + c_3)^2}} \right) + \frac{c_2^2 a^2 \sin^2 ka}{1 - (c_2 \cos ka + c_3)^2} \right]. \quad (15)$$

Большой интерес представляет рассмотрение закона дисперсии дефектона в двух остальных областях энергии. По-видимому, здесь будут изменения в выражении для матрицы реакции. В области вблизи точки пересечения можно предположить, что вид матрицы реакции остается таким же, но параметр Ландау–Зинера будет другим. Действительно, при малых значениях $(E - U_0)$ вблизи точки пересечения скорость ядра нельзя считать постоянной и поэтому параметр Ландау–Зинера имеет следующий вид [9]:

$$\delta = \frac{2\pi V^2 (2M)^{2/3}}{\hbar^{4/3} (F_1 F_2)^{1/3} (F_1 - F_2)^{2/3}} \times \Phi^2 \left[-(E - U_0) \left(\frac{2M}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{1}{F_2} - \frac{1}{F_1} \right)^{2/3} \right], \quad (16)$$

где $\Phi(\xi)$ — функция Эйри.

Матрицу рассеяния в туннельной области можно вычислить точно в одномерном случае линейных адиабатических термов [6]. В этом случае матрица рассеяния имеет вид

$$S = \frac{1}{1 + \lambda^2} \begin{bmatrix} \lambda^2 + e^{-2i\pi\delta} & -2i\lambda \sin \pi\delta \\ -2i\lambda \sin \pi\delta & \lambda^2 + e^{2i\pi\delta} \end{bmatrix}, \quad (17)$$

где $\lambda = \lambda(\delta)$. Тогда матрицу реакции можно вычислить на основе этого выражения, учитывая зависимость матрицы рассеяния и матрицы реакции:

$$R = \frac{1}{2i\lambda \sin \pi\delta} \times \begin{bmatrix} \lambda^2 + 1 & -(\lambda^2 + e^{2i\pi\delta}) \\ \lambda^2 + e^{-2i\pi\delta} & -(\lambda^2 + 1) \end{bmatrix}. \quad (18)$$

Отсюда нетрудно вычислить закон дисперсии инверсона в случае, когда дефект проходит через одну

элементарную ячейку путем туннельного просачивания:

$$\cos ka = \frac{1}{\sin \pi\delta} \left[\frac{(\lambda^2 + 1)^2}{4\lambda^2 \sin \pi\delta} - 1 \right] - \frac{(\lambda^2 + 1)^2}{4\lambda^2 \sin^2 \pi\delta} \cos 2\chi a. \quad (19)$$

Выражение для эффективной массы инверсона в случае туннельного просачивания через барьер имеет следующий вид:

$$m^{*-1} = \frac{1}{4ma^2} \left[\frac{B^2 C^2 a^2 \sin^2 ka}{\sqrt{1 - (1 - B(C \cos ka + 1))^2}} + \arccos(1 - B(C \cos ka + 1)) \times \left[\frac{2B^2 C^2 a^2 \sin^2 ka (B(C \cos ka + 1) - 1)}{\sqrt{(1 - (1 - B(C \cos ka + 1))^2)^3}} + \frac{BC a^2 \cos ka}{\sqrt{1 - (1 - B(C \cos ka + 1))^2}} \right] \right], \quad (20)$$

где

$$B = \frac{4\lambda^2 \sin \pi\delta}{(\lambda^2 + 1)^2}, \quad C = \sin \pi\delta.$$

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, с помощью матрицы рассеяния можно получить закон дисперсии безактивационного перемещения инверсона через кристаллическую решетку путем последовательности когерентных безызлучательных переходов. На основе полученного закона дисперсии вычисляются эффективная масса инверсона и его скорость перемещения. В данной работе рассмотрены три характерные энергетические области прохождения инверсоном точки пересечения потенциальных термов.

При анализе эффекта длиннопробежной миграции дефекта возникают два интересных с научной точки зрения вопроса.

1. Возможно ли квазичастичное поведение многоатомного дефекта (гантельного типа).
2. Принципиально важны ли для состава инверсона только собственные решеточные дефекты (хотя сама инверсия термов не так давно была экспериментально обнаружена для примеси бора в кремнии [10]).

Эти вопросы являются предметом отдельного рассмотрения.

В заключение хотим поблагодарить А. Ф. Андреева за многолетнюю поддержку идеи инверсона.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. D. Watkins, in: *Effects des rayonnements sur les semiconducteurs*, Dunod, Paris (1964), p. 97.
2. Б. Л. Оксенгендлер, *Метод радиационных воздействий в исследовании структуры и свойств твердых тел*, Фан, Ташкент (1971), с. 16.
3. J. Bourgoin and J. Corbett, *J. Phys. Lett.* **38A**, 135 (1972).
4. З. М. Хакимов, Ф. Т. Умарова, А. П. Мухтаров, *Узбекский физ. ж.* № 5, 45 (1995).
5. Б. Л. Оксенгендлер, *Письма в ЖЭТФ* **24**, 12 (1976).
6. Э. С. Медведев, В. И. Ошеров, *Теория безызлучательных переходов в многоатомных молекулах*, Наука, Москва (1983).
7. D. S. Saxon and R. A. Hutner, *Some Electronic Properties of a One-dimensional Crystal Model*, *Philips. Res. Rep.* **4**, № 2, 81 (1949).
8. Е. Е. Никитин, С. Я. Уманский, *Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях*, Атомиздат, Москва (1979).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).
10. K. H. Chow et al., *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2084 (1998).