

ПРОЦЕСС ФОРМИРОВАНИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ МЮОНОМ ИОНИЗОВАННОГО АКЦЕПТОРНОГО ЦЕНТРА $(\mu A)^-$ В КРИСТАЛЛАХ СО СТРУКТУРОЙ АЛМАЗА

Ю. М. Белоусов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)
141707, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 14 июня 2016 г.

Рассмотрен процесс формирования ионизованного акцепторного центра, образованного отрицательным мюоном в кристаллах со структурой алмаза. Отрицательный мюон, попадая в мишень, захватывается ядром, образуя мюонный атом μA , связанный с решеткой. Возникший радиационный дефект обладает значительным электрическим дипольным моментом в силу нарушения локальной симметрии решетки и изменяет фононный спектр кристалла. Ионизованный акцепторный центр образуется в результате захвата электрона, взаимодействующего с электрическим дипольным моментом дефекта, и излучения фонона локальной моды, возникшей в результате деформации. Получены оценки верхней и нижней границы скорости образования ионизованного акцепторного центра в кристаллах алмаза, кремния и германия. Показано, что кинетика процесса формирования акцепторного центра должна учитываться при обработке данных μSR -экспериментов.

DOI: 10.7868/S0044451016120117

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время положительные и отрицательные мюоны (μ^+ и μ^-) широко применяются для различных исследований конденсированных сред, поведения водородоподобных легких примесей и моделирования химических процессов с участием атомарного водорода (см., например, работу [1]). Поведение μ^+ и μ^- в среде существенно различается: положительно заряженный мюон представляет собой легкую примесь, моделирующую с химической точки зрения «легкий изотоп» водорода. Отрицательно заряженный мюон быстро захватывается ядром в $1s$ -состояние, образуя μ -атом. Поскольку масса мюона в 207 раз больше массы электрона, отрицательный мюон экранирует заряд ядра Z , который эффективно становится на единицу меньше исходного, и, таким образом, моделирует одиночный изотоп атома с зарядом $Z - 1$. Этот факт хорошо известен с начальной стадии мюонных исследований (см., например, работу [2]) и послужил началом создания мюонного (μSR) метода исследований вещества. Систематическое изучение форми-

рования примесей с зарядом ядра $Z - 1$ в конденсированных средах проводилось на ранних стадиях μSR -исследований [3–5]. В работе [6] было предложено изучать с помощью μ^- свойства акцепторных центров в полупроводниках. Например, в кремнии ($Z = 14$) отрицательный мюон захватывается ядром, образуя «изотоп» алюминия μAl с зарядом ядра $Z = 13$, который представляет интерес как один из основных примесных акцепторных центров в кремниевых полупроводниках. В работах [7–9] было показано, что с помощью отрицательных мюонов можно получить ценную информацию о сверхтонкой структуре и взаимодействиях с решеткой акцепторных центров в различных полупроводниках.

При интерпретации экспериментальных данных как правило предполагается, что мюоны, попадая в конденсированную среду, быстро термализуются за время меньшее времени разрешения экспериментальной аппаратуры. Согласно этим представлениям, обычно при описании поведения поляризации спина мюона в какой-либо модели начальный момент времени принимается равным моменту попадания мюона в мишень. Однако развитие техники эксперимента и расширение класса исследуемых объектов показало, что это не всегда верно. В частности, эксперименты по изучению деполяризации спи-

* E-mail: theorphys@phystech.edu

на положительных мюонов в твердом водороде и гелии (наиболее характерные результаты представлены соответственно в работах [10, 11] и [12]) удалось теоретически объяснить, учитывая процессы термализации [13, 14]. Недавно проведенные эксперименты с отрицательными мюонами в алмазе [15–18] также показывают, что интерпретацию результатов не удается убедительно провести, исходя из предположения о быстрой (менее 10^{-10} с) термализации образующегося мюонного акцепторного центра $\mu\text{В}$. Таким образом, представляется актуальным рассмотреть процесс термализации мюонного акцепторного центра в кристаллах, возникающего как радиационный дефект.

В работах [19–22] были рассмотрены процессы нейтрализации радиационных дефектов, образованных отрицательным мюоном в кристаллах со структурой алмаза: в алмазе, кремнии и германии. В работе [20] получены оценки времени образования нейтрального химически связанного дефекта, обусловленного радиационным переходом. В работе [19] рассмотрена кинетика нейтрализации положительно заряженного дефекта, обусловленного захватом отрицательного мюона на ядро решетки, в результате захвата электронов радиационного трека. Было показано, что процесс захвата электронов трека в алмазе сильно отличается от аналогичного процесса в кристаллах кремния и германия. А именно: в алмазе за время жизни мюона $\tau_\mu \approx 2.6 \cdot 10^{-6}$ с радиационный дефект не успевает нейтрализоваться. Поэтому процессы установления химически связанного дефекта также в рассматриваемых кристаллах отличаются: в кремнии и германии химические связи восстанавливаются для нейтральной примеси $\mu\text{А}$ -мюонного атома, тогда как в алмазе сначала восстанавливаются химические связи положительно заряженного иона $(\mu\text{В})^+$, после чего происходит процесс его нейтрализации [22]. В соответствии с этим оказалось, что скорость образования химически связанного нейтрального радиационного дефекта $\mu\text{А}$ в алмазе почти на два порядка выше. В дальнейшем нейтральный химически связанный радиационный дефект образует акцепторный центр в решетке. В данной работе рассматривается процесс захвата электрона нейтральным радиационным дефектом $\mu\text{А}$ и образование ионизованного акцепторного центра $(\mu\text{А})^-$. Дальнейший процесс захвата дырки валентной зоны ионизованным акцепторным центром обусловлен кулоновским взаимодействием. Предварительные результаты оценки скорости образования ионизованного акцепторного центра $\mu\text{В}^-$ в алмазе опубликованы в работе [21].

2. ИЗМЕНЕНИЕ ФОНОННОГО СПЕКТРА ПРИ НАЛИЧИИ НЕЙТРАЛЬНОГО ЦЕНТРА $\mu\text{А}$ В РЕШЕТКЕ

В работе [21] было показано, что нейтральный центр $\mu\text{А}$, образовавшийся в решетке и вступивший в химическую связь с ближайшими атомами, создает кластер (первую координационную сферу), который обладает весьма значительным электрическим дипольным моментом. Взаимодействие электронов решетки с электрическим дипольным моментом кластера обеспечивает необходимый механизм захвата электрона и образования ионизованного акцепторного центра. Поскольку нейтральный дефект имеет ненасыщенные химические связи, кристаллическая решетка оказывается деформированной, что неизбежно приводит к изменению фононного спектра (появлению локальной моды). После захвата недостающего для насыщения химических связей электрона образуется кластер, обладающий локальной симметрией решетки и представляющий собой ионизованный акцепторный центр. Ионизованный акцепторный центр образуется с испускания фонона соответствующей локальной моды фононного спектра в результате чего снимаются деформации. Задача оказывается в некотором смысле похожей на задачу о термализации молекулярных ионов, образованных положительно мюоном в молекулярных кристаллах и криокристаллах атомов благородных газов (см. [13, 14]). Точное решение задачи с учетом симметрии кристалла не представляется возможным, да и вряд ли целесообразно, поскольку для получения оценки скорости образования ионизованного акцепторного центра $(\mu\text{А})^-$ достаточно получить качественные результаты. Поэтому мы сначала построим эффективный гамильтониан, описывающий колебания решетки с учетом локальной деформации, и получим оператор взаимодействия дефекта $\mu\text{А}$ с электронами кристалла.

Для решения задачи получим колебательный спектр кристалла при наличии нейтрального центра, находящегося в начале координат и обладающего электрическим дипольным моментом, в приближении изотропной упругой сплошной среды. При наличии электрического поля вектор смещения \mathbf{u} в упругой среде удовлетворяет волновому уравнению [23]

$$\rho \ddot{u}_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}, \quad (1)$$

где ρ — плотность среды, а тензор напряжений представляется в виде суммы

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ik}^{el} + \sigma_{ik}^E. \quad (2)$$

Здесь, как обычно, σ_{ik}^{el} определяется константами упругой среды, а второе слагаемое в выражении (2) есть тензор напряжений электромагнитного поля в среде [24]:

$$\sigma_{ik}^E = \frac{1}{8\pi} (E_i D_k + E_k D_i), \quad (3)$$

где \mathbf{E} и \mathbf{D} — соответственно среднее (макроскопическое) электрическое поле и индукция.

В данной постановке задачи электрическое поле создается сторонними зарядами, обуславливающими электрический дипольный момент центра, т. е. из уравнения Максвелла

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi \rho_{ext}$$

получаем обычное выражение поля диполя:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \frac{3(\mathbf{d} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} - \mathbf{d}}{r^3}. \quad (4)$$

В изотропной среде $\varepsilon_{ik} = \varepsilon(\mathbf{r})\delta_{ik}$, поэтому для электрического поля \mathbf{E} имеем простую скалярную связь с индукцией \mathbf{D} :

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{D}. \quad (5)$$

Учтем, что в деформированной среде диэлектрическая проницаемость зависит от координат, и для силы, действующей на среду со стороны электрического поля, создаваемого дипольным моментом, получаем выражение

$$F_i = \frac{\partial \sigma_{ik}^E}{\partial x_k} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon^2} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} D_i D_k + \frac{1}{4\pi\varepsilon} D_k \frac{\partial D_i}{\partial x_k}. \quad (6)$$

Мы здесь учли, что в области решетки за пределами первой координационной сферы $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$.

Поскольку начало координат помещено в центре ядра μA , а мы находимся в рамках приближения изотропной среды, можно считать, что диэлектрическая проницаемость обладает сферической симметрией, т. е. $\varepsilon(\mathbf{r}) = 1 + 4\pi\kappa(r)$, где $\kappa(r)$ — диэлектрическая восприимчивость, связанная с деформацией решетки. Таким образом, будем считать, что зависимость диэлектрической восприимчивости от координат обусловлена в основном изменением удельного объема v в результате деформации, а поскольку восприимчивость пропорциональна плотности среды, имеем $\kappa \propto v^{-1}$. Изменение удельного объема в результате деформации определяется следом тензора деформации [23]:

$$\delta v = v u_{ll} = v \operatorname{div} \mathbf{u}. \quad (7)$$

Таким образом, градиент диэлектрической проницаемости можно представить в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} &= 4\pi \frac{\partial \kappa}{\partial x_k} \propto \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{1}{v} = -\frac{1}{v} \frac{\partial u_{ll}}{\partial x_k} \equiv \\ &\equiv -\frac{1}{v} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_k \partial x_l} = -\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{\partial u_l}{\partial x_k}. \end{aligned} \quad (8)$$

Иными словами:

$$\nabla \varepsilon = -4\pi\kappa \nabla(\nabla \mathbf{u}). \quad (9)$$

Учтем, что в нашем случае $\operatorname{rot} \mathbf{u} = 0$, поэтому соотношение (9) принимает вид

$$\nabla \varepsilon = 4\pi\kappa \Delta \mathbf{u}. \quad (10)$$

Итак, уравнение (1) можно переписать следующим образом:

$$\ddot{u}_i - c_{\parallel}^2 \Delta u_i - \frac{\kappa}{\varepsilon^2 \rho} D_i D_k \Delta u_k = \frac{1}{4\pi\varepsilon} D_k \frac{\partial D_i}{\partial x_k}, \quad (11)$$

где c_{\parallel} — продольная скорость звука. Уравнение (11) неоднородное, но для определения спектра колебаний нам необходимо рассмотреть решение однородного уравнения

$$\ddot{u}_i - c_{\parallel}^2 \Delta u_i - \frac{\kappa}{\varepsilon^2 \rho} D_i D_k \Delta u_k = 0. \quad (12)$$

Уравнение (12), в котором вектор индукции определяется выражением (4), по-прежнему еще очень сложное, поэтому сделаем ряд серьезных упрощений. Поскольку деформация кристалла вызвана в основном его сжатием, будем рассматривать только радиальную компоненту вектора смещения \mathbf{u} , пренебрегая его угловой зависимостью, т. е.

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) \rightarrow u_r(r),$$

поэтому в уравнении (12) следует оставить только радиальную часть лапласиана. Совершенно аналогично поступим и с вектором индукции, оставив только зависимость от модуля радиуса-вектора, т. е.

$$D_r = \frac{2(\mathbf{d} \cdot \mathbf{n})}{r^3} \rightarrow \frac{2d}{r^3}.$$

Решение для радиальных смещений удобно искать в виде

$$u_r(r, t) = \frac{\chi(r, t)}{r}, \quad (13)$$

тогда радиальная функции χ удовлетворяет более простому уравнению:

$$\ddot{\chi} - \left(c_{\parallel}^2 + \frac{4\kappa d^2}{\varepsilon^2 \rho} \frac{1}{r^6} \right) \chi'' = 0, \quad (14)$$

Таблица 1. Физические параметры кристаллов C, Si и Ge и оценка частоты Ω

Кристалл	Плотность ρ , г·см ⁻³	Постоянная решетки, R_1 , 10 ⁻⁸ см	Диэлектрическая проницаемость	Ω , 10 ⁹ с ⁻¹	Энергия ионизации акцептора, эВ
Алмаз	3.51	3.57	5.75	$8.1 \cdot d$	μB , 0.37
Кремний	2.33	5.43	11.97	$1.4 \cdot d$	μAl , 0.069
Германий	5.323	5.66	16.0	$0.66 \cdot d$	μGa , 0.011

где χ'' — вторая производная по радиальной переменной r .

Для функции $\chi(r, t)$ выполняется «одномерное» преобразование Фурье:

$$\chi(r, t) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega dk}{(2\pi)^2} \chi_{\omega, k} e^{-i\omega t} \sin(kr), \quad (15)$$

$$\chi_{\omega, k} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_0^{\infty} dr \sin(kr) \chi(r, t). \quad (16)$$

Для фурье-амплитуд (16) можно получить интегральное уравнение, в котором следует учесть, что выражение для силы в уравнении (11) справедливо для $r > R_1$ — радиуса первой координационной сферы, т. е.

$$(\omega^2 - k^2 c_{\parallel}^2) \chi_k = \frac{4\kappa d^2}{\varepsilon^2 \rho} \int_{R_1}^{\infty} dr e^{ikr} \frac{1}{r^6} \chi''(r, t). \quad (17)$$

Переходя в правой части уравнения (17) к фурье-амплитуде, получаем

$$(\omega^2 - k^2 c_{\parallel}^2) \chi_k = \frac{4\kappa d^2}{\pi \varepsilon^2 \rho} \int_0^{\infty} dk' k'^2 \chi_{k'} \times \\ \times \int_{R_1}^{\infty} \frac{dr}{r^6} (\cos(k - k')r - \cos(k + k')r). \quad (18)$$

Сделаем в уравнении (18) еще одно серьезное упрощение. Наибольший вклад во втором интеграле дают значения волнового вектора $k' \approx k$, что позволяет пренебречь вкладом $\cos(k + k')r$ и вынести фурье-амплитуду $\chi_{k'}$ из-под знака интеграла в точке k . Это, в частности, означает, что основной вклад в интеграл вносят значения $k' \lesssim r^{-1}$, поэтому в рамках принятого приближения интеграл в правой части можно преобразовать:

$$\int_0^{\infty} dk' k'^2 \chi_{k'} \int_{R_1}^{\infty} \frac{dr}{r^6} \cos(k - k')r \approx \\ \approx \chi_k \int_{R_1}^{\infty} \frac{dr}{r^6} \int_0^{r^{-1}} k'^2 dk' = \frac{\chi_k}{24 R_1^8}.$$

Окончательно можно записать простое дисперсионное соотношение:

$$(\omega^2 - k^2 c_{\parallel}^2 - \Omega^2) \chi_k = 0, \quad (19)$$

где

$$\Omega = \frac{d}{\varepsilon R_1^4} \sqrt{\frac{\kappa}{6\pi\rho}}. \quad (20)$$

Численные оценки частоты Ω для кристаллов алмаза, кремния и германия приведены в табл. 1¹⁾. Поскольку величина дипольного момента d рассматривается как неизвестный параметр, при проведении численной оценки использовалось его выражение в единицах СТСЕ (Дебаях, $D = 10^{-18}$ СТСЕ).

3. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН И ОПЕРАТОР ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Построим эффективный гамильтониан, описывающий радиальные колебания решетки относительно дипольного момента, находящегося в узле, помещенном в начало координат. Перейдем от непрерывного спектра, полученного в приближении сплошной среды, к дискретному спектру колебаний решетки. Для этого рассмотрим радиальные колебания в сфере радиуса R_D с граничными условиями $u(R_D) = 0$, считая, что на границе сферы никаких деформаций нет. Тогда преобразование радиальных функций (15) и (16) для пространственных переменных следует переписать как

¹⁾ Параметры кристаллов взяты из работ [25, 26].

$$\chi(r, t) = 2 \sum_n \chi_n \sin(k_n r),$$

$$\chi_n = 2 \int_0^{R_D} dr \sin(k_n r) \chi(r, t),$$
(21)

где $k_n = \pi n / R_D$.

Обобщенные координаты системы равны радиальным компонентам χ_n , обобщенный импульс равен, соответственно, $\rho \hat{\chi}_n$. Эффективный гамильтониан будет определяться системой независимых осцилляторов, и его можно записать в виде

$$\hat{H}_{ph} = \sum_n \frac{1}{2} \hbar \omega_n (\hat{\mathcal{P}}_n^2 + \hat{\mathcal{Q}}_n^2). \quad (22)$$

Здесь

$$\omega_n = \sqrt{c_{\parallel}^2 k_n^2 + \Omega^2}, \quad (23)$$

а безразмерные обобщенные импульс и координата определены как обычно:

$$\hat{\mathcal{P}}_n = \rho \hat{\chi}_n / p_{0n}, \quad \hat{\mathcal{Q}}_n = \hat{\chi}_n / q_{0n}, \quad (24)$$

где единицы обобщенного импульса и координаты соответственно равны

$$p_{0n} = \sqrt{\hbar \omega_n \rho R_D}, \quad q_{0n} = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_n \rho R_D}}.$$

Операторы $\hat{\mathcal{P}}_n$ и $\hat{\mathcal{Q}}_n$ удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям в соответствии с гамильтонианом (22): $[\hat{\mathcal{Q}}_n, \hat{\mathcal{P}}_{n'}] = i \delta_{nn'}$.

Введем, как обычно, операторы

$$\hat{b}_n = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\mathcal{Q}}_n + i \hat{\mathcal{P}}_n),$$

$$\hat{b}_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\mathcal{Q}}_n - i \hat{\mathcal{P}}_n), \quad [\hat{b}_n, \hat{b}_{n'}^\dagger] = \delta_{nn'},$$
(25)

которые в нашем случае имеют смысл операторов уничтожения и рождения радиальных фононов, и получим выражение оператора радиальных смещений решетки:

$$\hat{u} = \frac{\hat{\chi}}{r} = \frac{1}{r} \sum_n \sqrt{\frac{2\hbar}{\rho \omega(k_n) R_D}} \sin(k_n r) (b_n^\dagger + b_n). \quad (26)$$

Определим теперь оператор взаимодействия кластера с электронами среды (валентной зоны), обеспечивающий захват электрона с испусканием радиальных фононов. Энергия взаимодействия электронов с дипольным моментом определяется выражением

$$\mathcal{U} = e\varphi = \frac{e(\mathbf{d} \cdot \mathbf{r})}{\varepsilon r^3}, \quad (27)$$

из которого легко выделяется оператор электрон-фононного взаимодействия в виде

$$\hat{V}_{e-ph} \approx \frac{e(\mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{u}})}{\varepsilon r^3} = \frac{ed}{\varepsilon r^3} \cos \theta \hat{u}. \quad (28)$$

Как видим, оператор взаимодействия (28) имеет большую сингулярность при $r \rightarrow 0$, которая неизбежно приведет к расходимости матричных элементов. Однако, поскольку оператор (27) получен в результате разложения поля по мультипольным моментам, его выражение справедливо для достаточно больших значений радиуса-вектора и не применимо при $r \rightarrow 0$. Поэтому, как это обычно делается (см., например, работу [27]), при значении $r < R_0$ — некоторого характерного размера, потенциал заменяется константой, тогда

$$\hat{V}_{e-ph} \approx \begin{cases} \frac{ed}{\varepsilon r^3} \cos \theta \hat{u} & \text{при } r > R_0, \\ \frac{edr}{\varepsilon R_0^4} \cos \theta \hat{u} & \text{при } r < R_0. \end{cases} \quad (29)$$

В нашем случае можно принять $R_0 \gtrsim r_0$, где r_0 — длина химической связи в решетке.

4. СКОРОСТЬ ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНА

Вероятность перехода в единицу времени определяется известной формулой «золотого правила» Ферми:

$$dw_{if} \equiv dw_{capt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{V}_{e-ph} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) d\nu_f \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (30)$$

где начальное состояние

$$|i\rangle = |\mathbf{k}\rangle |0_{ph}\rangle$$

соответствует свободному (в валентной зоне) электрону с волновым вектором \mathbf{k} и отсутствию возбужденных радиальных фононов, а конечное состояние будет определяться состоянием электрона, захваченного в гибридованное $|ns\rangle$ - или $|np\rangle$ -состояние кластера, и возбуждением радиального фонона с волновым вектором \mathbf{k}_{ph} :

$$|f\rangle = \begin{pmatrix} |ns\rangle \\ |np\rangle \end{pmatrix} |\mathbf{k}_{ph}\rangle.$$

Здесь $n = 2, 3$ и 4 соответственно для C, Si и Ge. В формуле (30) учтено, что в процессе захвата могут

участвовать все электроны, обладающие волновым вектором в интервале от \mathbf{k} до $\mathbf{k} + d\mathbf{k}$.

Элемент объема конечных состояний определяется состояниями радиальных фононов и для случая одномерного движения равен

$$d\nu_f = R_D \frac{dk_{ph}}{2\pi} do.$$

Здесь do — элемент телесного угла, в который испускается фонон. Энергии начального и конечного состояний равны

$$E_i = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad E_f = E_- + \hbar\omega(k_{ph}), \quad E_0 - E_- = \hbar\Delta.$$

Для получения численных результатов будем полагать величину $\hbar\Delta$ равной энергии ионизации кластера (акцептора).

Подставляя в формулу (30) выражение для оператора взаимодействия, в котором оставим только расходящуюся волну, и выполняя частичное интегрирование по углам для радиальных фононов, получаем

$$dw_{capt} = \frac{(ed)^2}{6\pi^2 \varepsilon^2 \rho \omega(k_{ph})} |{}_e \langle f | F(r) e^{ik_{ph}r} | \mathbf{k} \rangle|^2 \times \delta \left(\varepsilon_{ac} - \hbar\omega(k_{ph}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right) dk_{ph} d\mathbf{k}, \quad (31)$$

где, как следует из формулы (29),

$$F(r) = \begin{cases} r^{-4} & \text{при } r > R_0, \\ R_0^{-4} & \text{при } r < R_0. \end{cases} \quad (32)$$

Здесь $|f\rangle_e$ — конечные состояния электрона $|ns\rangle$ или $|np\rangle$.

Прежде чем вычислять матричный элемент, проведем интегрирование по волновым векторам электронов в начальном состоянии. Легко видеть, что интегрирование по модулю k может быть проведено в общем случае, поскольку результат определяется нулем аргумента δ -функции. Обозначим $\mathbf{k} = k\mathbf{n}$, где \mathbf{n} — единичный вектор, направленный вдоль волнового вектора электрона,

$$k_0^2 = \frac{2m^*}{\hbar} (\Delta - \omega_{ph}). \quad (33)$$

Интегрирование по k приводит к выражению

$$dw_{capt} = \frac{m^*}{(2\pi\hbar)^2} \frac{2}{3\rho} \left(\frac{ed}{\varepsilon} \right)^2 \times |{}_e \langle f | F(r) e^{ik_{ph}r} | k_0 \mathbf{n} \rangle|^2 \frac{k_0}{\omega(k_{ph})} dk_{ph} d\Omega. \quad (34)$$

Для дальнейшего анализа удобно ввести безразмерные параметры и переменные

$$x = \frac{\tilde{Z}}{na_0} r, \quad \tilde{k}_{ph} = \frac{na_0}{\tilde{Z}} k_{ph}, \quad \tilde{k}_0 = \frac{na_0}{\tilde{Z}} k_0, \quad (35)$$

где $n = 2, 3$ и 4 соответственно для C, Si и Ge. Это позволяет выделить характерный масштаб сечения захвата электрона кластером и выразить его через безразмерный матричный элемент

$$dw_{capt} = \frac{m^*}{6\rho(\pi\hbar)^2} \left(\frac{ed}{\varepsilon} \right)^2 \left(\frac{\tilde{Z}}{na_0} \right)^5 \times |A(\tilde{k}_{ph}, \tilde{k}_0)|^2 \frac{k_0}{\omega(k_{ph})} dk_{ph} d\Omega, \quad (36)$$

где введено обозначение

$$A(\tilde{k}_{ph}, \tilde{k}_0) = {}_e \langle f | F(x) e^{i\tilde{k}_{ph}x} | \tilde{k}_0 \mathbf{n} \rangle. \quad (37)$$

Учтем теперь закон дисперсии радиальных фононов (23) и связь волнового вектора k_0 с частотой испущенного фонона, чтобы в конечном итоге перейти к интегрированию по частотам. Имеем

$$dw_{capt} = \frac{2}{3\pi^2 \rho \hbar \langle c_{\parallel} \rangle} \left(\frac{m^*}{2\hbar} \right)^{3/2} \left(\frac{ed}{\varepsilon} \right)^2 \left(\frac{\tilde{Z}}{na_0} \right)^5 \times |A(\tilde{k}_{ph}, \tilde{k}_0)|^2 \frac{\sqrt{\Delta - \omega_{ph}}}{\sqrt{\omega_{ph}^2 - \Omega^2}} d\omega_{ph} d\Omega. \quad (38)$$

Мы здесь для упрощения записи оставили зависимость матричного элемента от волновых векторов, не переходя к переменной интегрирования ω_{ph} . Рассматриваемые кристаллы анизотропны и скорость звука зависит от направления распространения фонона в решетке. Учет анизотропии сильно усложнил бы дальнейшие выкладки, а с учетом сделанных выше приближений был бы превышением точности. Поэтому в дальнейшем мы будем использовать среднее значение продольной скорости звука $\langle c_{\parallel} \rangle$, как это обычно делается, если эффекты анизотропии не учитываются.

Обозначим

$$\omega_0 = \langle c_{\parallel} \rangle \frac{\tilde{Z}}{na_0} \quad (39)$$

и перейдем к безразмерным частотам $\tilde{\omega} = \omega_{ph}/\omega_0$, $\tilde{\Delta} = \Delta/\omega_0$ и $\tilde{\Omega} = \Omega/\omega_0$. Ниже будет показано, что матричные элементы $A(\tilde{k}_{ph}, \tilde{k}_0) \propto \tilde{k}_0^{-1}$, поэтому выражение для скорости захвата электрона удобно записать в виде

$$w_{capt} = G_n \int \frac{d\Omega}{4\pi} \int_{\tilde{\Omega}}^{\tilde{\Delta}} \frac{|A(\tilde{k}_{ph}, \tilde{k}_0)|^2}{\sqrt{(\tilde{\Delta} - \tilde{\omega})(\tilde{\omega}^2 - \tilde{\Omega}^2)}} d\tilde{\omega}, \quad (40)$$

где

$$G_n = \frac{1}{6\pi\rho m^*} \left(\frac{2m^*}{\hbar\langle c_{\parallel} \rangle} \right)^{3/2} \left(\frac{ed}{\varepsilon} \right)^2 \left(\frac{\tilde{Z}}{na_0} \right)^{13/2}. \quad (41)$$

Здесь $n = 2, 3, 4$ соответствуют значениям параметров для C, Si и Ge.

Матричный элемент (37) можно преобразовать к виду, удобному для дальнейшего анализа, выполнив интегрирование по углам. При этом выражения для s - и p -состояний различаются, однако их формально можно представить в одинаковой общей форме для различных n . Действительно, подставляя выражение для волновой функции водородоподобного атома и свободного электрона, имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_n^l(\tilde{k}_{ph}, \tilde{k}_0) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^{\infty} dx x^2 F(x) R_{nl}(x) e^{i\tilde{k}_{ph}x} \times \\ &\times \int_0^{\pi} e^{-i\tilde{k}_0x \cos\vartheta} Y_{lm}(\vartheta, \phi) d\vartheta, \end{aligned} \quad (42)$$

где $R_{nl}(x)$ — радиальная часть волновой функции, $do = \sin\vartheta d\vartheta d\phi$.

Для s -состояний волновая функция не зависит от углов, поэтому простое интегрирование по углам приводит к выражению

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_n^s(\tilde{k}_{ph}, \tilde{k}_0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\tilde{k}_0} \int_0^{\infty} F(x) R_{n0}(x) e^{i\tilde{k}_{ph}x} \times \\ &\times \sin(\tilde{k}_0x) x dx = \tilde{k}_0^{-1} (I_1^{(n)}(\tilde{\omega}) - iI_2^{(n)}(\tilde{\omega})), \end{aligned} \quad (43)$$

где $I_{1,2}(\tilde{\omega})$ — соответственно действительная и мнимая части матричного элемента.

Рассмотрим теперь матричный элемент, определяющий захват электрона в p -состояние кластера, которое представим в виде равновероятной суперпозиции $2p$ -состояний, соответствующих четырем возможным направлениям связи гибридного состояния [20]. Для каждого $2p$ -состояния направление оси квантования совпадает с направлением одной из четырех связей с ближайшими соседями. Поэтому в формуле (42) следует определить вид угловой части Y_{lm} , поскольку интегрирование выполняется в системе координат с осью $z \parallel \mathbf{k}_0$. Выразить угловую функцию Y_{lm} , определяющую состояние с определенной проекцией момента на направление связи, через угловые функции, описывающие состояния с определенной проекцией на направление волнового вектора электрона, можно с помощью матрицы конечных вращений: $Y_{lm} = \sum R_{m,m'}(\theta, \varphi) Y_{1m'}(\vartheta, \phi)$. Углы θ и φ определяют

направление соответствующей связи в решетке. Поскольку показатель экспоненты в подынтегральном выражении в формуле (42) не зависит от угла ϕ , останется только состояние с проекцией $m' = 0$. Подставляя явный вид функции $Y_{10}(\vartheta)$ и выполняя интегрирование по углам, получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_n^{p,m}(\tilde{k}_{ph}, \tilde{k}_0) &= -\frac{i\sqrt{3}}{\sqrt{2\pi}\tilde{k}_0} R_{m0}(\theta, \varphi) \int_0^{\infty} R_{n,1}(x) \times \\ &\times \left(\cos\tilde{k}_0x - \frac{\sin\tilde{k}_0x}{\tilde{k}_0x} \right) e^{i\tilde{k}_{ph}x} F(x) x dx. \end{aligned} \quad (44)$$

Так же как и в случае s -состояний, матричный элемент удобно представить в виде, явно выделив действительную и мнимую части:

$$\mathcal{A}_n^{p,m}(\tilde{k}_{ph}, \tilde{k}_0) = \tilde{k}_0^{-1} (J_1^{(n)}(\tilde{\omega}) - iJ_2^{(n)}(\tilde{\omega})). \quad (45)$$

Таким образом, скорость захвата электрона (40) определяется суммой скоростей захвата в s - и p -состояния:

$$w_{capt} = w^s + w^p. \quad (46)$$

Поскольку матричный элемент (43) не зависит от углов, скорость захвата в s -состояние равна

$$w^s = G_n \int_{\tilde{\Omega}}^{\tilde{\Delta}} \frac{(I_1^{(n)}(\tilde{\omega}))^2 + (I_2^{(n)}(\tilde{\omega}))^2}{\sqrt{(\tilde{\Delta} - \tilde{\omega})(\tilde{\omega}^2 - \tilde{\Omega}^2)}} d\tilde{\omega}, \quad (47)$$

а для определения w^p следует провести в формуле (40) интегрирование по $d\Omega$, которое сводится фактически к усреднению подынтегрального выражения по всем равновероятным направлениям. При этом мы учтем, что интегрирование по всем углам эквивалентно суммированию по равновероятным направлениям химических связей в кубической решетке. Поскольку вся зависимость от углов содержится в матричных элементах матрицы конечных вращений $R_{m0}(\theta, \varphi)$, имеем

$$\sum_{m=-1}^{+1} \frac{1}{4\pi} \int |R_{m0}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 1.$$

Считая состояния с различными проекциями момента m' равновероятными, получаем

$$w^p = \frac{1}{3} G_n \int_{\tilde{\Omega}}^{\tilde{\Delta}} \frac{(J_1^{(n)}(\tilde{\omega}))^2 + (J_2^{(n)}(\tilde{\omega}))^2}{\sqrt{(\tilde{\Delta} - \tilde{\omega})(\tilde{\omega}^2 - \tilde{\Omega}^2)}} d\tilde{\omega}. \quad (48)$$

Таблица 2. Оценка характерных параметров для кристаллов C, Si и Ge

Кристалл	$r_0,$ 10^{-8} см	\tilde{Z}	\tilde{r}_0	$\omega_0,$ 10^{14} с $^{-1}$	$k_{0,max},$ 10^7 см $^{-1}$	$\tilde{k}_{0,max}\tilde{r}_0$	$k_{ph,max},$ 10^8 см $^{-1}$	$\tilde{k}_{ph,max}\tilde{r}_0$
C	1.54	2.6	3.78	3.32	3.1	0.48	4.2	15.9
Si	2.34	3.5	5.15	1.05	1.34	0.31	1.18	2.78
Ge	2.44	5.0	5.75	1.24	0.54	0.13	0.32	0.77

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Формулы (43), (45) и (47), (48) полностью определяют скорость образования ионизованного состояния акцептора $(\mu A)^-$ в результате захвата электрона среды нейтральным радиационным дефектом, образованный отрицательным мюоном в решетке кристалла. Аналитические выражения определяются зависимостью от характерных параметров среды, которые хорошо известны, за исключением двух параметров: электрического дипольного момента кластера d и параметра R_0 , определяющего электрон-фононное взаимодействие (29). Зависимость скорости образования w_{capt} от дипольного момента d присутствует как в явном виде в константе G_n (41), так и в неявном виде в частоте Ω (20), входящей в интегралы (43) и (45). Зависимость интегралов от величины дипольного момента оказывается слабой, поэтому можно считать, что скорость $w_{capt} \propto d^2$.

Зависимость результатов от параметра R_0 оказывается более критичной. Действительно, интегралы (43) и (45) представляются в виде суммы двух интегралов, причем интегралы для $r > R_0$ экспоненциально зависят от значения нижнего предела интегрирования. К сожалению аналитического выражения, позволяющего более точно получить качественную зависимость результатов от данного параметра, в рассматриваемых кристаллах нет, поскольку не существует соответствующего малого параметра. Рассмотрим наиболее «неудобный» для оценок случай алмаза.

Как отмечалось выше, параметр R_0 не может быть меньше длины химической связи в решетке, но и не больше радиуса первой координационной сферы кластера, т.е. периода решетки. Длина химической связи в решетке алмаза равна $r_0 \approx 1.54 \cdot 10^{-8}$ см, или во введенных безразмерных единицах (35) $\tilde{r}_0 = \tilde{Z}r_0/2a_0 \approx 3.78$, поскольку для

бора $\tilde{Z} = 2.6^2$). Соответствующий безразмерный параметр для постоянной решетки в алмазе будет равен $\tilde{R}_1 = 8,76$. Таким образом в дальнейших оценках следует полагать $\tilde{r}_0 < \tilde{R}_0 < \tilde{R}_1$.

Проведем теперь оценки максимально возможных значений, которые могут принимать входящие в матричный элемент (37) параметры. Максимальное значение параметра k_0 определяется энергией ионизации акцептора $\varepsilon_{ac} = 0.37$ эВ, поэтому имеем $k_{0,max} \approx 3.1 \cdot 10^7$ см $^{-1}$ и соответственно на нижнем пределе интегрирования $\tilde{k}_0 x_0 \geq 0.48$. Таким образом, входящий в подынтегральное выражение $\sin(k_0 x)$ вносит заметный вклад. Заметим, что взаимодействие (29) справедливо для случая медленных электронов, т.е. $kR_0 \ll 1$, поэтому полученная оценка показывает, что результаты качественно правильно описывают рассматриваемый процесс. Максимально возможное значение волнового вектора фонона также определяется энергией ионизации акцептора, а поскольку $\Delta \gg \Omega$, получаем $k_{ph,max} \sim \Delta/\langle c_{\parallel} \rangle \approx 4.2 \cdot 10^8$ см $^{-1}$. Таким образом, в подынтегральном выражении матричного элемента (37) нет малых параметров, поэтому аналитического выражения с хорошим приближением получить не удастся, и дальнейшие вычисления следует проводить в численном виде.

Оценка характерных параметров для рассматриваемых кристаллов приведена в виде табл. 2. Видно, что длинноволновое приближение для описания электрон-фононного взаимодействия не позволяет дать хорошие количественные оценки, однако дает качественно правильное описание, которое соответствует сделанным выше приближениям.

Численные расчеты были проведены для нескольких различных значений неопределенных параметров задачи d и $x_0 = \tilde{R}_0$ и представлены в виде табл. 3. При выборе различных значений

²⁾ Численные значения эффективного заряда ядра \tilde{Z} для различных элементов определены в классической работе Дж. Слэйтера [28].

Таблица 3. Оценка скорости образования ионизованных акцепторных центров $(\mu A)^-$ в кристаллах алмаза, кремния и германия

d	C		Si		Ge	
	x_0	$w_{capt}, 10^8 \text{ c}^{-1}$	x_0	$w_{capt}, 10^8 \text{ c}^{-1}$	x_0	$w_{capt}, 10^8 \text{ c}^{-1}$
1.0	3.78	22.0	5.12	0.71	5.76	14.3
0.5	3.78	5.9	5.12	0.19	5.76	3.8
0.2	3.78	0.98	5.12	0.034	5.76	0.65
1.0	5.5	2.2	7.5	0.095	7.5	2.4
0.5	5.5	0.58	7.5	0.024	7.5	0.64
0.2	5.5	0.09	7.5	$2.6 \cdot 10^{-3}$	7.5	0.11

параметров предполагалось, что $d \lesssim 1D$, где $D = 1$ СГСЕ, поэтому в табл. 3 приведены результаты расчета при трех возможных значениях d . Минимальное выбранное значение $d = 0.2D$ представляется ниже величины, имеющей место в реальном кристалле. Для параметра x_0 выбраны два различных значения: $x_0 = \tilde{r}_0$ и $x_0 \approx \sqrt{2}\tilde{r}_0$, что позволяет достаточно полно представить зависимость результатов от данного параметра. Матричные элементы вычислялись для соответствующих волновых функций водородоподобного атома с эффективным зарядом ядра Z . Как показали численные расчеты, проведенные для кластера $(\mu BC_4)^+$ в работе [22], такое приближение хорошо описывает рассматриваемые дефекты.

Отметим также, что скорость захвата в p -состояния примерно на два порядка меньше скорости захвата в s -состояния во всех кристаллах: $w^p \ll w^s$, поэтому вкладом (48) в полную скорость захвата (46) всегда можно пренебречь.

Из данных, приведенных в табл. 3, следует, что в рассматриваемом диапазоне варьирования неопределенных параметров d и R_0 разброс величины в оценке скорости захвата составляет примерно два порядка, что, на первый взгляд, представляется совершенно неудовлетворительным. Это, естественно, связано и с грубостью дипольного приближения для $r \sim R_1$ и закона дисперсии радиальных фононов (23), а также самого электрон-фононного взаимодействия в области $r < R_1$. Однако рассмотренный механизм взаимодействия вполне обоснован и описывает процесс захвата электрона нейтральным дефектом решетки с образованием ионизованного состояния акцепторного центра. При этом оценка верхней границы скорости захвата вполне соответ-

ствует энергии взаимодействия (27) и может претендовать на качественно правильную оценку. Значение величины дипольного момента $d \approx 0.2D$ представляется сильно заниженным и приведено для полноты картины зависимости результатов от параметров.

Численные результаты позволяют оценить границы ожидаемой скорости образования ионизованного акцепторного центра. Для алмаза $0.5 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1} \lesssim w_{capt} \lesssim 2 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$, для кремния $0.5 \cdot 10^7 \text{ c}^{-1} \lesssim w_{capt} \lesssim 0.7 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}$ и для германия $0.6 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1} \lesssim w_{capt} \lesssim 2 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$. Данные оценки показывают, что процесс формирования термализованного состояния мюонного атома в кристаллах следует учитывать при обработке экспериментальных результатов. Следует обратить внимание также на особое положение кремния, в котором скорость формирования акцепторного центра на порядок меньше соответствующих скоростей в алмазе и германии.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Отрицательно заряженный радиационный дефект $(\mu A)^-$, представляющий собой ионизованное состояние акцепторного центра, нейтрализуется согласно механизму кулоновского захвата дырки валентной зоны. Таким образом, время термализации радиационного дефекта определяется суммарным временем всей цепочки процесса, которая на начальных этапах захвата электронов трека и образования химически связанного нейтрального центра различна в алмазе и других кристаллах со структурой алмаза. Полная скорость термализации опреде-

ляется наиболее медленным процессом, описанным в настоящей работе.

Заметим, что состояния нейтрального кластера и акцептора парамагнитны и характеризуются различными параметрами сверхтонкого взаимодействия. Состояние ионизованного акцептора диамагнитно, поэтому сверхтонкое взаимодействие в нем отсутствует. Таким образом, при обработке экспериментальных данных μ SR-исследований следует учитывать полную кинетику процесса термализации отрицательного мюона в кристаллах. Учет результатов данной работы позволит получить оценки параметров взаимодействий, определяющих формирование акцепторных центров в кристаллах.

Автор выражает благодарность Р. О. Зайцеву и В. П. Крайнову за полезные дискуссии и Л. А. Максимова за интерес к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. П. Смилга, Ю. М. Белоусов, *Мюонный метод исследования вещества*, Наука, Москва (1991).
2. А. О. Вайсенберг, *Мю-мезон*, Наука, Москва (1964).
3. А. А. Джураев, В. С. Евсеев, ЖЭТФ **62**, 1166 (1972).
4. А. А. Джураев, В. С. Евсеев, Г. Г. Мясищева и др., ЖЭТФ **62**, 1424 (1972).
5. А. А. Джураев, В. С. Евсеев, В. С. Роганов и др., ЖЭТФ **66**, 433 (1974).
6. В. Н. Горелкин, В. П. Смилга, ЖЭТФ **66**, 1201 (1974).
7. В. Н. Горелкин, В. Г. Гребинник, К. М. Грицай и др., ЯФ **56**, 26 (1993).
8. T. N. Mamedov, I. L. Chaplygin, V. N. Duginov et al., Нур. Int. **105**, 345 (1997).
9. T. N. Mamedov, K. I. Gritsaj, A. V. Stoykov et al., Phys. B **289–290**, 574 (2000).
10. Дж. Брюэр, Е. П. Красноперов, С. Р. Крейцман и др., Письма в ЖЭТФ **53**, 577 (1991).
11. W. Higemoto, K. Sotoh, N. Nishida et al., Нур. Int. **106**, 39 (1997).
12. Е. П. Красноперов, Е. Е. Мейлихов, Д. Герлах и др., Письма в ЖЭТФ **61**, 9647 (1995).
13. Ю. М. Белоусов, В. П. Смилга, ЖЭТФ **106**, 1500 (1994).
14. Ю. М. Белоусов, ЖЭТФ **131**, 243 (2007).
15. Т. Н. Мамедов, А. С. Батуринов, В. Д. Бланк и др., Препринт ОИЯИ No. P14-2007-12 (2007).
16. А. С. Батуринов, В. Н. Горелкин, В. Р. Соловьев и др., Препринт ОИЯИ No. P14-2007-188 (2007).
17. T. N. Mamedov, A. S. Baturin, K. I. Gritsaj et al., arXiv:1305.5706v1.
18. T. N. Mamedov, A. S. Baturin, K. I. Gritsaj et al., J. Phys.: Conf. Ser. **551**, 012046 (2014).
19. С. А. Антипов, Ю. М. Белоусов, В. Р. Соловьев, ЖЭТФ **142**, 982 (2012).
20. Yu. M. Belousov, J. Phys.: Conf. Ser. **343**, 012013 (2012).
21. Yu. M. Belousov, J. Phys.: Conf. Ser. **551**, 012047 (2014).
22. Yu. M. Belousov and L. P. Sukhanov, Diamond and Rel. Mat. **58**, 10 (2015).
23. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1987).
24. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1987).
25. O. Madelung, *Semiconductors – Basic Data*, 3rd ed., Springer, Berlin, Heidelberg (2004).
26. S. Adachi, *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, Wiley Series in Materials for Electronic. Optoelectronic Applications, John Wiley & Sons, Chichester (2005).
27. В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Ясиевич, *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках*, ПИЯФ им. Б. П. Константинова, С.-Петербург (1997).
28. J. C. Slater, Phys. Rev. **36**, 57 (1930).