

Образцы	T° C	-160	-120	-80	-55	-25	22	50	100
A2	E_A τ_2/τ_1	0,06 $7 \cdot 10^2$	0,07 $2 \cdot 10^2$	0,06 $4 \cdot 10^1$	0,09 $1 \cdot 10^2$	0,28 $5 \cdot 10^5$	0,22 $1 \cdot 10^5$	0,20 $1 \cdot 10^3$	0,26 $3 \cdot 10^3$
A1	E_A τ_2/τ_1	0,10 $4 \cdot 10^4$	0,10 $2 \cdot 10^3$	— —	— —	— —	0,37 $2 \cdot 10^6$	0,35 $3 \cdot 10^5$	0,32 $2 \cdot 10^4$
A3	E_A τ_2/τ_1	0,20 $2 \cdot 10^7$	0,06 $1 \cdot 10^2$	0,11 $5 \cdot 10^2$	— —	— —	0,11 $8 \cdot 10$	0,12 $7 \cdot 10$	0,11 $3 \cdot 10$

Наличие широкого спектра τ и малые величины E_A указывают на электронно-диффузионное последствие в исследованных образцах. Этот вывод подтверждается экспериментами по изучению S_e' природного гематита. В стехиометрическом $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ отсутствуют ионы Fe^{2+} , у природного наблюдалась вязкость (рис. 2, кривая 3), при температурах -160° — $+100^\circ$ C с энергией $E_A = 0,1\text{--}0,2$ эв. Наличие максимума S_e' при $T = -160^\circ$ C, несвойственного гематиту, позволяет предположить, что вязкость природного гематита обусловлена примесями, содержащими ионы Fe^{2+} .

ЛИТЕРАТУРА

1. Трухин В. И. «Изв. АН СССР», физика Земли, № 4, 66—77, 1972.
2. Жилиева В. А., Колесников А. В., Петрова Г. Н. «Изв. АН СССР», физика Земли, № 10, 59—70, 1970.
3. Бураков К. С., Мамедов О. Г., Трухин В. И. В сб.: «Тезисы докладов IX Всесоюзной конференции по геомагнетизму». Баку, 1973.
4. Neel L. Phys. Rad., 13, 249, 1952.

Поступила в редакцию
30.3 1972 г.

Кафедра
физика Земли

УДК 539.293 : 539.37

В. М. ЯРЦЕВ

ДЕФОРМАЦИИ ВБЛИЗИ ИЗОЭЛЕКТРОННОЙ ПРИМЕСИ

Изоэлектронный примесный центр может иметь уровни в запрещенной зоне и связывать дырку или электрон проводимости. Связанное состояние образуется при выполнении условия [1, 2]:

$$1 + \frac{I}{E} \leq 0, \quad (1)$$

где $\bar{E}^{-1} = \Omega (2\pi)^{-3} \int E^{-1}(\vec{k}) d\vec{k}$, Ω — объем элементарной ячейки, $E(\vec{k})$ — закон дисперсии, I — диагональный матричный элемент потенциала примеси на соответствующих функциях Ванье. В работе [3] найдены численные значения I для различных модельных потенциалов примесного центра, где учитывались экранирование, спин-орбитальное взаимодействие, деформация решетки. Остановимся более подробно на последнем эффекте. Деформация решетки — это смещение атомов основного вещества при введении примесного центра за счет отличия длины невозмущенной ковалентной связи примеси R_i от длины такой связи в кристалле основного вещества R_h . Для характеристики деформации удобно использовать величину относительного смещения

$$x = \frac{R}{R_i - R_h}, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (2)$$

где R — смещение ближайших соседей.

В работе [3] вычислены значения I при $x=0$ (решетка не деформирована, примесь сжата до размеров атома основного вещества) и $x=1$ (максимальная деформация решетки, примесь не деформирована). Практически интересные значения I для промежуточных случаев, когда деформируются и примесь, и решетка, определялись линейной интерполяцией. Для некоторых примесных центров, например сурьма в фосфиде галлия $I(x=0) < |\bar{E}|$, $I(x=1) > |\bar{E}|$ и выполнение условия (1) зависит от типа интерполяции. В данном сообщении находится зависимость I от x по теории упругости, так как разница между значениями $I(x=0)$ и $I(x=1)$ определяется только деформационными эффектами, причем сами эти значения предполагаются известными.

Представим потенциал примеси в виде

$$U = U_0 + \tilde{U}, \quad (3)$$

где U_0 не зависит от деформации решетки, а \tilde{U} — потенциал деформации. Полагая примесь шаром с исходным радиусом R_i , найдем, что потенциал деформации внутри шара не зависит от координат и пропорционален смещению границы [4]. При наших обозначениях (2)

$$\tilde{U}_{in} = -(R_i - R_h)(1-x)B,$$

где B — постоянная, которая выражается через $I(x=0)$ и $I(x=1)$.

Для внешней области потенциал деформации равен [5]

$$U_{out} = A \frac{1}{r^3}.$$

Приравнивая значения потенциала деформации на общей границе, получим

$$A = A(x) = -(R_i - R_h)(1-x)[R_h + x(R_i - R_h)]^3 B. \quad (4)$$

Диагональный матричный элемент потенциала примеси есть

$$I = I_0 + A(x) \int |\Psi(\vec{r})|^2 \frac{d\vec{r}}{r^3}. \quad (5)$$

Предположение о линейной зависимости $I(x)$, использованное в работе [3], несправедливо. Действительное значение x_0 находится из условия равенства давления во внутренней и внешней областях:

$$\frac{E_{in}}{1 - 2\bar{E}_{in}} \left[\frac{R_i}{R_h + x(R_i - R_h)} - 1 \right] = \frac{2E_{out}}{1 + \sigma_{out}} \cdot \frac{x(R_i - R_h)}{R_h + x(R_i - R_h)}, \quad (6)$$

где модули Юнга $E_{in,out}$ и коэффициенты Пуассона $\sigma_{in,out}$ выражаются через упругие постоянные C_{ij}

$$E = \frac{3(C_{11} + 2C_{12})C_{44}}{C_{11} + 2C_{12} + C_{44}}, \quad \sigma = \frac{C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44}}{2(C_{11} + 2C_{12} + C_{44})}.$$

Применим полученный результат для примеси сурьмы в фосфиде галлия $R_i = 1,36 \text{ \AA}$, $R_h = 1,10 \text{ \AA}$, $I(x=0) = 1,06 \text{ эв}$, $I(x=1) = 2,8 \text{ эв}$, $E = -1,4 \text{ эв}$, $I(x) = 2,8 - 1,3(1-x)[1,10 + 0,26x]^3$.

Используя постоянные C_{ij} , вычисленные для рассматриваемых веществ в работе [6] по микроскопической теории упругости, найдем из уравнения (6) действительное смещение $x_0 = 0,37$. Подставляя значение $I(x_0 = 0,37) = 1,37$ в условие существования связанного состояния (1), получим

$$1 - \frac{1,37}{1,40} > 0,$$

т. е. дырка не захватывается на сурьму в фосфиде галлия, что соответствует экспериментальным данным (см. табл. в [3]). При линейной интерполяции $I(x_0 = 0,37) = 1,7$ и теория предсказывала связанное состояние. Следовательно, при рассмотрении деформации решетки вблизи примеси существенны как величина разности ковалентных радиусов атомов примеси и основного вещества, так и величина относительного смещения ближайших соседей.

Автор благодарит В. Л. Бонч-Бруевича и А. Г. Миронова за обсуждение работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лифшиц И. М. ЖЭТФ, 17, 1017, 1947.
2. Faulkner R. A. Phys. Rev., 175, 991, 1968.
3. Baldereschi A., Hopfield J. J. Phys. Rev. Lett., 28, 171, 1972.
4. Morita A., Nara H. J. Phys. Soc. Japan, 21, Suppl., 234, 1966.
5. Weinreich G. J. Phys. Chem. Solids, 8, 216, 1959.
6. Martin R. M. Phys. Rev., B1, 4005, 1970.

Поступила в редакцию
19.9 1972 г.

Кафедра
полупроводников

УДК 533.72

А. И. ОСИПОВ, А. Н. ХМЕЛЕВСКИЙ, Р. В. ХОХЛОВ

О СОХРАНЕНИИ ФОРМЫ БОЛЬЦМАНОВСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ РЕЛАКСИРУЮЩЕЙ ПРИМЕСИ В СРЕДЕ С НЕМАКСВЕЛЛОВСКИМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ПО СКОРОСТЯМ

Известно, что в процессе колебательной релаксации двухатомных молекул, моделируемых гармоническими осцилляторами и составляющих малую примесь в одноатомном газе, сохраняется форма больцмановского распределения по колебательным уровням [1]. Это значит, что в такой системе процесс установления полного статистического равновесия идет через непрерывную последовательность больцмановских распределений с различными колебательными температурами T_k , если в начальный момент времени малая примесь двухатомных молекул (гармонических осцилляторов) имела больцмановское распределение колебательной энергии с колебательной температурой T_k , отличной от температуры поступательных степеней свободы T_n . Причем, с течением времени $T_k \rightarrow T_n$.

Рассмотренные начальные условия сравнительно легко реализуется в экспериментах. Например, при прохождении сильных ударных волн через смесь газов или при внезапном расширении смеси газов. Вообще говоря, любые воздействия, продолжительность которых мала по сравнению с временем колебательной релаксации, приводят к отрыву поступательной температуры от колебательной.

Сохраняемость больцмановского распределения в процессе релаксации ведет к большому удобству, поскольку вместо функции распределения по колебательным уровням теоретическому или экспериментальному определению подлежит только один параметр — колебательная температура.

До сих пор почти все работы по колебательной релаксации предполагали существование максвелловского распределения по скоростям. Однако в реальных экспериментах возможна ситуация, когда происходит нарушение равновесного максвелловского распределения по скоростям. Например, при изучении процессов в системах с источниками быстрых частиц (так называемая химия горячих атомов) или при изучении химических процессов, где продуктами реакции являются быстрые частицы, и т. д.

Возникает вопрос — по какому закону релаксирует колебательная энергия в таких системах. В настоящей работе изучается колебательная релаксация в системах с немасвелловским распределением скоростей.

Рассмотрим простейший случай, когда малая примесь двухатомных молекул (гармонических осцилляторов) релаксирует в немасвелловском термостате одноатомного инертного газа. Уравнения, описывающие релаксацию, представляют собой уравнения баланса числа молекул на каждом колебательном уровне и имеют вид [2]:

$$\frac{dx_n}{dt} = z\rho_{10} \left\{ (n+1)x_{n+1} - \left[(n+1)\frac{\rho_{01}}{\rho_{10}} + n \right] x_n + n\frac{\rho_{01}}{\rho_{10}} x_{n-1} \right\} \quad (1)$$

$n=0, 1, 2, \dots$

Здесь z — число столкновений молекулы с окружающими атомами в единицу времени, x_n — заселенность n -го колебательного уровня,