

3. Таким образом, теория предсказывает резкое отличие многофононного РКРС в квантовой яме в сильном магнитном поле от рассеяния в объемном полупроводнике в сильном магнитном поле и в квантовой яме в отсутствие поля. Это отличие обусловлено полной дискретизацией электронных уровней в яме. При выполнении резонансного условия $\Omega_e = \omega_{L0}$ имеется узкая область частот $\omega_l (|\omega_l - \omega_n - \frac{5}{2}\omega_{L0} - \omega_0| \leq \sqrt{\alpha_0} \omega_{L0})$, в которой сечение рассеяния достигает гигантских величин. Вне этой области $S_{\beta\gamma\gamma'} \sim \alpha_0^2$ и рассеяние резко спадает. В области же гигантского рассеяния выделяются два пика, расстояние между которыми определяется расщеплением уровней и равно по порядку величины $\sqrt{\gamma_1} \omega_{L0}$. Низший уровень (электрон $n=0+2$ фонона) не проявляется в рассеянии, так как он не участвует в переходе. Если $\Omega_e \neq \omega_{L0}$, то реальные переходы между уровнями Ландау невозможны. В этом случае $S_{\beta\gamma\gamma'} \sim \alpha_0^2$ во всей области частот ω_l . Вывод о существовании области гигантского рассеяния сохраняется и для РКРС с числом испущенных фононов, большим двух. Однако картина расщепления пиков будет иной.

Список литературы

- [1] Zeyher R. // Sol. St. Comm. 1975. V. 16. N 1. P. 49—55.
- [2] Goltsev A. V., Lang I. G., Pavlov S. T., Bryzhina M. F. // J. Phys. C. 1983. V. 16. N 21. P. 4221—4241.
- [3] Белицкий В. И., Гольцев А. В., Ланг И. Г., Павлов С. Т. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 3. С. 1224—1225; ЖЭТФ, 1984. Т. 86. № 1. С. 272—286.
- [4] Ruf T., Cardona M. // Phys. Rev. Lett., 1989. V. 63. N 20. P. 2288—2290.
- [5] Сейсян Р. П., Юлдашев Ш. У. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 1. С. 12—22.
- [6] Коровин Л. И., Павлов С. Т., Эшпулатов Б. Э. // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 51. № 10. С. 516—517.
- [7] Коровин Л. И., Павлов С. Т., Эшпулатов Б. Э. // ФТТ. 1988. Т. 30, № 12. С. 3665—3671; Препринт ЛФТИ. 1989. № 1400. С. 50.
- [8] Johnson E. I., Larsen D. M. // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 16. P. 655—657.
- [9] Коровин Л. И., Павлов С. Т. // Письма в ЖЭТФ. 1967. Т. 6. № 2. С. 525—528; ЖЭТФ. 1967. Т. 53. № 5 (11). С. 1708—1716.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
24 сентября 1990 г.

УДК 537.226; 537.311.32; 538.956

© Физика твердого тела, том 33, № 3, 1991
Solid State Physics, vol. 33, N 3, 1991

ДЕЛОКАЛИЗАЦИЯ ЗОННОЙ ДЫРКИ В MgO

В. А. Лобач, И. Р. Рубин

Цель данной работы состояла в выяснении роли нестандартного для ионных кристаллов распределения электронной плотности в MgO («Mg²⁺O⁻ плюс один электрон» — модель [1—4]) в отсутствие прямых проявлений автолокализованной дырки (АЛД), общепринятых для щелочно-галогидных кристаллов (ЩГК) [5, 6]. Для этого самосогласованным методом многократного рассеяния в приближении внедренного кластера (ВКП) [7] выполнены расчеты электронной структуры релаксированных кластеров [O₆Mg₆]⁺ и для сравнения [F₆Na₆]⁺ (рис. 1), моделирующих гипотетическую АЛД в MgO и V_x-центр в NaF соответственно. Использованное здесь ВКП явно учитывает вклад кристаллического остатка в потенциал области дефекта и удобно для прямого учета смещений ионов [8, 7]. Смещения ионов в кластере [F₆Na₆]⁺ фиксировались в соответствии с теоретическими и полуэмпирическими оценками [6, 8, 9] и в наших расчетах составляли 0.33 для анионов и 1-го типа (X-анионы) и 0.1 для остальных,

огмеченных стрелками. Смещения ионов в кластере $[O_6Mg_6]^{+}$ задавались в аналогичных пропорциях.

В кластере $[F_6Na_6]^{+}$ для каждой ориентации спина «вверх» (+) и «вниз» (—) выделяются две группы орбиталей: 12 орбиталей $1b_{1u} \div 2b_{3g}$ (заштрихованная область на рис. 2) и 6 орбиталей $3a_{1g} \div 3b_{2u}$ ($3a_{1g} - 2b_{3u}$). Вклад $2p$ -состояний X-анионов в орбитали первой группы не превышает 6 %, а вклад анионов второй группы достигает 90 %. Для обеих ориентаций спина все орбитали первой группы располагаются ниже своих МТ-нулей (МТ-нули — МТН⁺ и МТН⁻ — различны для спинов «вверх» и «вниз» из-за различия в спиновых плотностях), за исключением орбитали $2b_{3g}^{+}$. Следовательно, первая группа формируется истинными связанными состояниями и соответствует валентной зоне (ВЗ) кристалла. Вторая группа представляется орбиталями с доминирующим вкладом X-анионов: от 51 % ($3b_{2u}^{+}$) до 92 % ($2b_{3u}^{-}$), т. е. соответствует системе уровней V_x -центра. Дырка полностью локализуется на орбитали $2b_{3u}$, которая располагается вдоль оси квазимолекулы X_2 в полном соответствии с [5]. Связывание состояний $3a_g \div 3b_{2u}$ ниже МТН⁻, очевидно, соответствует известному энергетическому выигрышу при образовании АЛД в ШГК. Но дырочное состояние $2b_{3u}$ располагается при E МТН⁻ и, следовательно, не является связан-

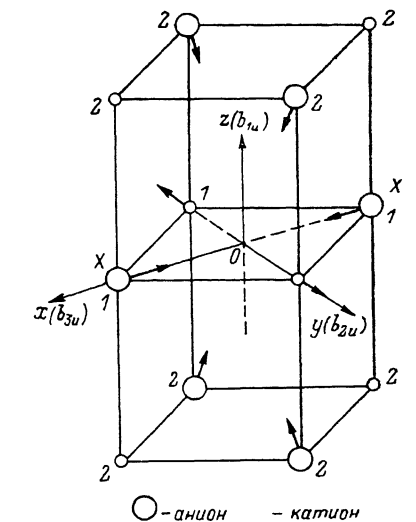


Рис. 1. Ориентация системы координат (ось абсцис совпадает с направлением $[110]$ кристалла), классификация ее осей по неприводимым представлениям точечной группы D_{2h} и направления смещений ионов из исходных позиций в идеальной структуре типа NaCl в кластерах $[O_6Mg_6]^{+}$ и $[F_6Na_6]^{+}$.

Типы ионов обозначены цифрами.

ным. Этот уровень локализуется потенциальным барьером, возникающим в окрестности аниона благодаря преобладающему вкладу в эффективный потенциал от центробежного потенциала (ЦБП) $E_l(r) = l(l+1)/r^2$ для $2p$ -состояний ($l=1$) в соответствии с известным механизмом связывания резонансных состояний [10]. При использованном (для обоих кластеров) отношении радиусов МТ-сфер аниона и катиона $\gamma = R_a/R_k = 1.19$ величина $E_l(R_a)$ для кластера $[F_6Na_6]^{+}$ равна 4.90 эВ и, следовательно, дырочный уровень располагается значительно ниже вершины барьера, имея в связи с этим достаточно большое время жизни. Таким образом, ВКП при описанных смещениях ионов качественно воспроизводит особенности V_x -центра в NaF и можно надеяться на его адекватность при рассмотрении гипотетической АЛД в MgO.

Качественно энергетическая диаграмма кластера $[O_6Mg_6]^{+}$ напоминает рассмотренную для фторида, но количественно локализация верхних шести состояний на X-анионах выражена слабее: вклад в состояния $3b_{3u}$ и $2b_{2g}$ от анионов 2-го типа составляет 60 и 80 %, а в остальные — до 30 %. Заметно возрастает в кластере $[O_6Mg_6]^{+}$ вклад от межсферной области: в состояния $2b_{2u}^{+}$ и дырочное $2b_{3u}^{-}$ вклад X-анионов составляет 62 %, а вклад межсферной области — около 30 %. Заполненное состояние $2b_{2u}^{+}$ значительно делокализовано в межсферную область, что согласуется с представлениями $Mg^{2+}O^{-}$ модели для ШЗО [1⁻⁴]. Вторая важная особенность энергетической диаграммы кластера $[O_6Mg_6]^{+}$ заключается в том, что в использованном здесь локальном приближении к функционалу плотности (ФЛП) все состояния оказываются резонансными, так как располагаются выше своих МТН. Значительное отщепление дырочного состояния

$2b_{2u}^-$ от остальных и расположение его практически у вершины связывающего потенциального барьера ($E_i(R_n)=6.12$ эВ для кислородной МТ-сферы) являются третьей особенностью. И, наконец, дырочная орбиталь $2b_{2u}^-$ гипотетической АЛД в MgO располагается не вдоль оси абсцисс, как в V_k -центре, а вдоль оси ординат, создавая для дырки возможность покинуть пределы квазимолекулы X_2^- и уйти в междоузельное пространство. Все это позволяет предположить, что в окрестности гипотетической АЛД

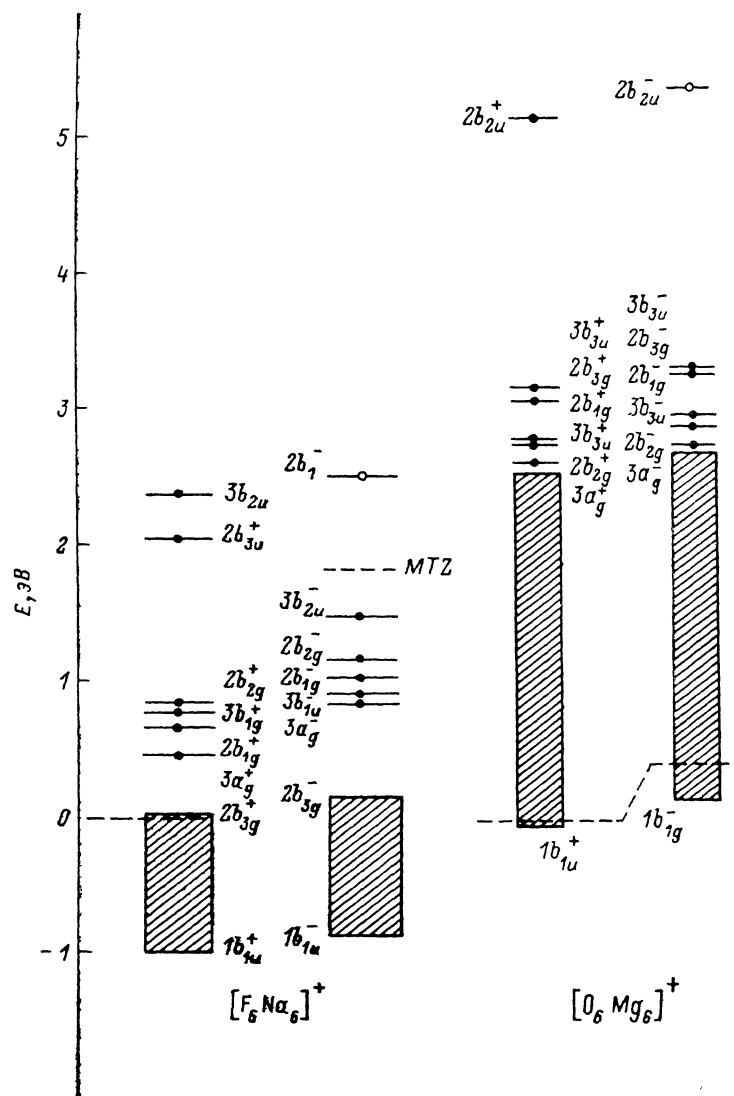


Рис. 2. Энергетические диаграммы кластеров $[F_6Na_6]^+$ и $[O_6Mg_6]^+$.

МТ-нули для электронов со спином «вверх» кластеров выбраны в качестве начала отсчета энергии.

в MgO распределение ядер и электронов таково, что локализация дырки вдоль оси X -квазимолекулы энергетически невыгодна. В рассмотренных здесь кластерах $[F_6Na_6]^+$ и $[O_6Mg_6]^+$ конфигурации ядер однотипны. Следовательно, главную роль в различии процессов автолокализации дырок в NaF и MgO может играть лишь распределение электронной плотности, что, по-видимому, и имеет место в соответствии с $[1^{-4}]$. Локализация дырки в NaF начинается с ее создания в хорошо локализованном (связанном) состоянии аниона идеального кристалла и заканчивается образованием относительно стабильного молекулярного состояния, связываю-

цего X-анионы. Воксиде этот процесс начинается с делокализированного (резонансного) состояния дырки, а деформации решетки, аналогичной наблюдаемой для NaF, недостаточно для локализации вдоль связи X—X.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Vidal-Valat G., Vidal J. P., Kurki-Suonio K. // Acta Cryst. 1978. V. A34. P. 594—601.
- [2] Bukowski M. S. T. // J. Geophys. Res. 1982. V. 81. N B1. P. 303—310.
- [3] Лобач В. А., Кулябин Б. Е., Медведева Н. И., Жуков В. П., Леванов М. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 7. С. 2238—2240.
- [4] Лобач В. А., Рубин И. Р., Кружалов А. В., Шульгин Б. В., Иванов В. Ю. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 9. С. 2610—2615.
- [5] Эварестов Р. А., Котомин Е. А., Ермошкин А. Н. Молекулярные модели точечных дефектов в широкощелевых твердых телах. Рига: Зинатне, 1983. 287 с.
- [6] Stoneham A. M. // Adv. Phys. 1979. V. 8. N 4. P. 457—492.
- [7] Соболев А. Б., Лобач В. А., Шульгин Б. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 3129—3132.
- [8] Song K. S., Stoneham A. M., Harker A. H. // J. Phys. C. 1975. V. 8. N 9. P. 1125—1135.
- [9] Brunet G., Leung C. H., Song K. S. // Sol. St. Comm. 1985. V. 53. N 7. P. 607—609.
- [10] Pendry J. B. // J. Phys. C. 1977. V. 10. N 6. P. 809—824.

Уральский политехнический институт
им. С. М. Кирова
Свердловск

Поступило в Редакцию
17 августа 1989 г.
В окончательной редакции
25 сентября 1990 г.

УДК 539.4

© Физика твердого тела, том 33, № 3, 1991
Solid State Physics, vol. 33, N 3, 1991

О РОЛИ ВАКАНСИЙ В РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ ВОКРУГ РАСТУЩЕГО ВКЛЮЧЕНИЯ НОВОЙ ФАЗЫ

А. С. Абызов, В. В. Слезов, Л. В. Танатаров

Диффузионный распад пересыщенного твердого раствора может сопровождаться возникновением механических напряжений. При диффузии атомов примеси по междоузельному механизму это очевидно, так как поток атомов привносит во включение массу, но не объем. Аналогичная ситуация возникает и при диффузии по вакансионному механизму, если удельные объемы атомов примеси в матрице и включении различны. В отсутствие процессов релаксации напряжений вокруг включения его рост прекращается. В работе [1] рассмотрен механизм релаксации напряжений, возникающих при росте газонаполненных пузырьков гелия в облучаемом материале за счет диффузии вакансий по механизму Набарро—Херринга. В настоящей работе этот механизм используется для описания релаксации напряжений, возникающих вокруг растущего включения новой фазы. Вакансии привносят во включение объем, компенсируя его дефицит, возникающий при диффузии атомов примеси. При полной компенсации дефицита объема устанавливается квазистационарный процесс, при котором поле напряжений практически не зависит от размера включения.

Нормальное напряжение σ_n на границе включения с матрицей связано с дефицитом объема δV соотношением

$$-\delta V/V = 3\sigma_n [1/(4G) + 1/K], \quad (1)$$

где V — объем включения, G — модуль сдвига материала матрицы, K — модуль всестороннего сжатия материала включения. Объем включения и его дефицит в случае раствора внедрения можно записать в виде