

Диффузия одноэлектронных и двухэлектронных вакансионных центров в полярных кристаллах

© Н.И. Каширина, В.Д. Лахно*, В.В. Сычев*, М.К. Шейнкман

Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины,
03028 Киев, Украина

* Институт математических проблем биологии Российской академии наук,
142290 Пущино, Московская обл., Россия

E-mail: n_kashirina@mail.ru, lak@impb.psn.ru

(Поступила в Редакцию 18 июля 2006 г.)

Рассчитано изменение диффузионного барьера анионных вакансий в полярных кристаллах при захвате одного (F -центры) или двух электронов (F' -центры). Для двухэлектронных систем рассмотрены нижайшие синглетные и триплетные состояния. Показано, что захват двух электронов в нижайшее метастабильное триплетное состояние (что возможно в неравновесных условиях, например при обменном рассеянии или термическом перезаселении энергетических уровней) приводит к понижению диффузионного барьера подобной системы. В то же время диффузия двухэлектронных центров в нижайшем синглетном состоянии, как правило, связана с ростом потенциального барьера миграции по сравнению с вакансией без электронов. Вычисления выполнялись для гауссовой системы функций с учетом эффектов межэлектронной корреляции и электрон-фононного взаимодействия.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 04-07-90402, 06-04-48363).

PACS: 66.30.-h, 31.15.Pf, 76.30.Mi

1. В 1983 г. [1] один из авторов (М.К. Шейнкман) предложил новую модель рекомбинационно-стимулированной диффузии примесных центров (или дефектов) в кристаллах, суть которой состояла в том, что такая диффузия с пониженным диффузионным барьером реализуется в случае, если электронная система диффундирующего центра находится в возбужденном состоянии. В частности, один из внешних электронов в возбужденном состоянии может находиться на антисвязывающей орбитали, причем время жизни такого состояния должно быть достаточно для реализации диффузионного скачка.

В настоящей работе предлагается одна из конкретных моделей (двухэлектронный центр), при реализации которой на практике может иметь место уменьшение энергии активации диффузии. Наша задача состояла в поисках конкретной модельной системы, обладающей метастабильными (время жизни системы в возбужденном состоянии должно быть достаточным для совершения диффузионного скачка), антисвязывающими электронными состояниями. В атомной физике примером такого состояния может служить первое возбужденное состояние атома гелия — отогелий. Вследствие правил отбора оптические переходы между термами с различным спиновым состоянием запрещены, поэтому такое двухэлектронное состояние является метастабильным. В твердом теле прямым аналогом атома гелия может служить мелкий электрически нейтральный двухэлектронный примесный центр в кристалле, связанный с двухзарядной вакансией. Аналогом отрицательного иона водорода H^- являются D^- - или F' -центры с отрицательной корреляционной энергией.

Триплетные состояния подобных систем могут возникнуть в неравновесных условиях при обменном рассеянии зонных электронов на примесных центрах либо при тепловом заселении. Подобные состояния метастабильны в отличие от возбужденных $2p$ -состояний F -центра. Триплетные состояния H^- -иона в магнитном поле рассматривались в работе [2]. Расчеты энергетического спектра двух электронных донорных центров, включая триплетные состояния, в квантово-размерных структурах проведены в работах [3,4]. Отметим, что при реализации рассматриваемого далее механизма миграции двухзарядных центров в триплетном состоянии в спектре поглощения кристалла не будут наблюдаться специфические максимумы, соответствующие переходам между основным синглетным и возбужденным триплетным состоянием центра, подобно тому как это происходит для одноэлектронных $1s$ - и $2p$ -состояний. В данной системе подобные оптические переходы запрещены правилами отбора.

В обзоре [5] полагается очевидным фактом то, что в ионных кристаллах диффузия двухэлектронных центров, находящихся в синглетном состоянии, происходит с повышенным по сравнению с одноэлектронными центрами диффузионным барьером. Для нас данное утверждение не кажется достаточно убедительным. Вопрос об изменении диффузионного барьера миграции дефектов кристаллической решетки при их перезарядке, включая эффекты, связанные с поляризацией кристаллической решетки и захватом дополнительного электрона одноэлектронным вакансионным центром, может быть решен только в результате детального рассмотрения механизма диффузии того или иного центра в кристалле, в котором

этот центр диффундирует. Так, в работе [6] теоретически показано, что в результате захвата второго электрона нейтральным донорным центром в арсениде галлия образуется отрицательно заряженный двухэлектронный донор или DX -центр. При этом примесный атом меняет свое положение, переходя из узельного положения в ближайшее междоузлие. Авторы работы [6] не рассматривали вопрос о миграции одноэлектронного примесного центра, их интересовала микроскопическая модель подобных центров, учитывающая электрон-фононное взаимодействие. Мы же хотим обратить внимание на то, что подобная модель DX -центра может наглядно проиллюстрировать возможность безбарьерной миграции донора при захвате второго электрона на синглетную, связывающую орбиталь. Ранее механизм нестабильности узельного положения донорной примеси при захвате второго электрона рассматривался в работах [7,8].

2. В качестве конкретного объекта рассмотрим модельную систему, состоящую из двух положительных зарядов (например, положительно заряженные вакансии в ионном кристалле) в точках a и b , разделенных отрицательным зарядом, помещенным посередине между ними в точке c и двух электронов. Начало координат поместим в точку c . Расстояние между точками a и b равно R . Ось z направим от c к b .

Данная модельная система соответствует конфигурации седловой точки, когда две положительно заряженные вакансии разделены межузельным отрицательно заряженным атомом. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\mathbf{H}_{12} = \mathbf{T}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \mathbf{H}_Q(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \mathbf{H}_{\text{эф}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (1)$$

где \mathbf{T}_{12} — оператор кинетической энергии двух электронов, \mathbf{H}_Q включает все кулоновские взаимодействия в системе, $\mathbf{H}_{\text{эф}}$ — оператор взаимодействия электронов с фононами, \mathbf{r}_i ($\mathbf{r}_i = \{x_i, y_i, z_i\}$, $i = 1, 2$) — радиус-вектор i -го электрона, отсчитанный от начала координат, расположенного посередине между точками a и b .

При переходе одного из электронов в зону проводимости рассматриваемая система переходит в ионизированное состояние с одноэлектронным гамильтонианом

$$\mathbf{H}_1 = \mathbf{T}_1(\mathbf{r}) + \mathbf{H}_Q(\mathbf{r}) + \mathbf{H}_{\text{эф}}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где \mathbf{T}_1 — оператор кинетической энергии, \mathbf{H}_Q включает все кулоновские взаимодействия в системе, $\mathbf{H}_{\text{эф}}$ — оператор электрон-фононного взаимодействия.

Далее нас будет интересовать только электронная часть полной энергии в основном состоянии и в состоянии седловой точки. Поэтому все слагаемые, соответствующие взаимодействию вакансий между собой и вакансий с анионом в седловой точке, будут опускаться. Тогда при $R \rightarrow 0$ двухэлектронная система, описываемая гамильтонианом (1), переходит в одноцентровую конфигурацию, соответствующую F' -центру (вакансия, захватившая два электрона), а одноэлектронная система, которой соответствует гамильтониан (2), переходит к

конфигурации, соответствующей F -центру. Количественное рассмотрение будем проводить в рамках простейшей континуальной модели.

Изменению диффузионного барьера электронной системы (как одноэлектронной, так и двухэлектронной) по сравнению с диффузионным барьером для вакансии без электронов (далее пустой вакансии) соответствует разность электронной энергии для системы в седловой точке (трехцентровая конфигурация) и энергии, соответствующей одноцентровой конфигурации.

В качестве простейшей пробной волновой функции (ВФ) выберем функцию

$$\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_i^n C_i (1 + (-1)^S \mathbf{P}_{12}) \exp(-a_{1i} r_1^2 - 2a_{2i}(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2) - a_{3i} r_2^2 - 2a_{4i} z_1 - 2a_{5i} z_2), \quad (3)$$

где \mathbf{P}_{12} — оператор перестановки электронных координат; C_i , a_{1i} , a_{2i} , a_{3i} , a_{4i} , a_{5i} — вариационные параметры; $S = 0$ для синглетного и 1 для триплетного состояния двухэлектронной системы; $(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)$ — скалярное произведение векторов \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 . Электронные корреляции учитываются членом $2a_{2i}(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)$ в (3).

Для минимизации одноэлектронного гамильтониана (2) пробная ВФ выбирается в виде

$$\Psi_{s,a}^+ = \sum_{i=1}^n C_i (\exp(-a_i r^2 - 2b_i z) \pm \exp(-a_i r^2 + 2b_i z)), \quad (4)$$

где верхний знак перед вторым членом в формуле (4) относится к нижайшему $1\sigma_g^-$, нижний — к нижайшему $1\sigma_u^-$ терму. Обозначения термов даны в соответствии с [9]. ВФ Ψ_s^+ симметрична, а Ψ_a^+ антисимметрична при инверсии в начале координат, расположенном посередине между кулоновскими центрами.

Рассматриваемая модельная двухэлектронная система соответствует обменно-связанной паре парамагнитных центров в ионном кристалле с единственным отличием, связанным с тем, что в начале координат расположен отрицательный кулоновский заряд. Взаимодействие с этим зарядом приводит к дополнительным особенностям рассматриваемой системы по сравнению с обменно-связанной парой. То же относится к однократно ионизированной системе, описываемой гамильтонианом (2).

Подробные обозначения, соответствующие гамильтонианам (1) и (2), а также современное изложение метода Буймиштова–Пекара [10], используемого в настоящей работе для расчета энергии исследуемых систем, приводятся в работе [11].

3. Прежде чем перейти к рассмотрению поляронных эффектов в выбранной модельной системе, рассмотрим предельный переход к простейшей атомной конфигурации — два атома водорода, разделенные отрицательным зарядом, помещенным в середину отрезка, соединяющего протоны. Устремив к нулю расстояние между

протонами (взаимодействие между кулоновскими центрами по-прежнему опускается), перейдем к иону H^- . Согласно теореме Хилла [12], отрицательный ион атома водорода имеет только одно связанное состояние, соответствующее синглетному терму. Таким образом, связанный нижайший триплетный терм в подобной системе отсутствует. В предельном случае больших расстояний между протонами энергия рассматриваемой системы как для синглетного, так и для триплетного терма переходит к удвоенной энергии атома водорода. Таким образом, даже простейший качественный анализ показывает, что положение „седловой точки“ для этой системы может оказаться энергетически более выгодным по сравнению с одноцентровой конфигурацией как для синглетного, так и для триплетного терма. При этом связанное состояние, соответствующее метастабильному триплетному терму, появляется только при достаточно большом расстоянии между протонами. В кристалле KCl расстояние между ближайшими галогидными вакансиями $R = a\sqrt{2}/2$, где a — постоянная решетки кристалла KCl. Таким образом, в положении седловой точки $R = 4.4 \text{ \AA}$, или в атомных единицах $R = 8.41a_0$, где a_0 — борковский радиус.

Для рассматриваемой атомной системы рассчитанные с помощью ВФ (3) для $n = 10$ энергии как для синглетного, так и для триплетного терма в атомных единицах составляют -0.6414 Ha . Далее в качестве единицы энергии будем использовать Хартри $\text{Ha} = \hbar^2/ma_0^2$ либо в случае парамагнитных центров в кристаллах эффективное Хартри $\text{Ha}^* = \hbar^2/m^*a_0^{*2}$, где m и m^* — масса и эффективная масса электрона, a_0 и a_0^* — борковский и эффективный борковский радиусы электрона соответственно. Следует обратить внимание на то, что для выбранных расстояний между протонами энергии синглетного и триплетного термов в пределах приведенных выше значащих цифр совпадают. В общем случае обменная энергия носит антиферромагнитный характер и для больших межатомных расстояний незначительно понижает энергию синглетного терма по сравнению с триплетным. В рассматриваемом случае больших расстояний между атомами водорода учет обменных эффектов носит несущественный характер. Для одноцентровой конфигурации, соответствующей отрицательному иону водорода, точное значение энергии синглетного терма составляет -0.555 Ha , а для триплетного терма практически совпадает (с незначительным превышением) с энергией атома водорода -0.5 Ha . Разница электронной энергии между трехцентровой (конфигурация седловой точки) и одноцентровой конфигурациями составляет -2.3 и -3.85 eV для синглетного и триплетного термов соответственно. Таким образом, для выбранной модельной системы электронная энергия как для синглетного, так и для триплетного терма понижает энергию трехцентровой конфигурации по сравнению с одноцентровой.

Для вакансионных центров далеко не всегда переход соседнего атома в межцентровую конфигурацию связан

с появлением дополнительного отрицательного заряда, значительно повышающего электронную составляющую полной энергии в конфигурации седловой точки. В качестве примера можно привести кристалл CdS, в котором вакансии серы соответствует мелкий донор [13]. В то же время межузельное положение атома серы не обладает свойствами мелкого акцептора. Для подобных систем в конфигурации седловой точки энергия двухэлектронной системы будет заведомо ниже соответствующей энергии одноцентровой конфигурации для свободных вакансий. В этом случае для сильно локализованных состояний энергетический выигрыш для конфигурации седловой точки по сравнению с основной конфигурацией за счет электронной энергии будет примерно совпадать с глубиной залегания одноэлектронного уровня. Таким образом, при захвате второго электрона энергия активации диффузии свободной вакансии будет понижаться на величину, примерно соответствующую глубине залегания электронного уровня.

4. При переходе от атомных систем к парамагнитным центрам в ионных кристаллах энергия системы, включающей электроны, локализованные на вакансионных центрах, значительно изменяется в результате эффектов поляризации кристаллической решетки. Для описания энергетического спектра подобных систем следует учитывать эффекты электрон-фононного взаимодействия. На рис. 1 в качестве одного из примеров показана зависимость электронной энергии рассматриваемой системы в синглетном и триплетном состояниях от расстояния между вакансиями для параметров KCl. Поляронные эффекты учитывались в рамках континуального прибли-

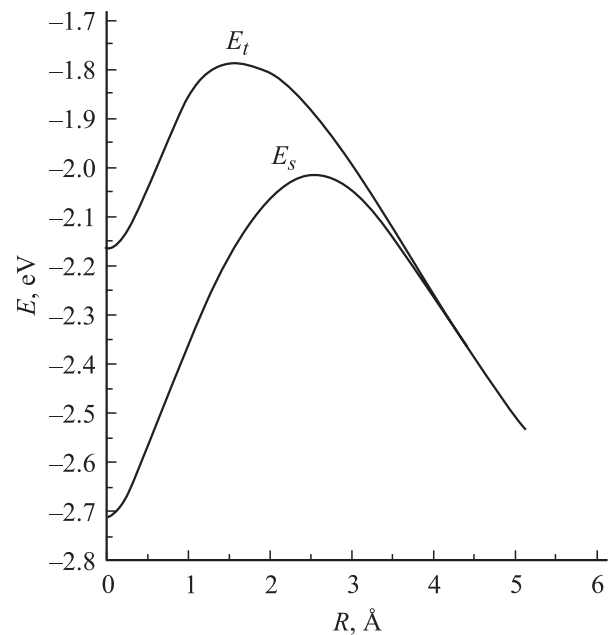


Рис. 1. Зависимости от расстояния между вакансиями хлора электронной части полной энергии синглетного (E_s) и триплетного (E_t) термов для F' -центра в KCl при переходе ближайшего иона Cl в положение седловой точки.

Изменение диффузионного барьера миграции галоидных вакансий при захвате одного и двух электронов в состоянии с различной симметрией волновой функции

	KCl	NaI	NaCl	PbS	KBr
$R, \text{Å}$	4.445	4.575	3.989	4.200	6.600
$\Delta\sigma_g, \text{eV}$	0.8334	0.8892	1.03176	$-2.020 \cdot 10^{-4}$	0.7790
$\Delta E_s, \text{eV}$	0.3246	1.3873	0.0177	0.0119	1.2137
$\Delta\sigma_u, \text{eV}$	-0.4971	-0.5408	-0.5997	$-4.365 \cdot 10^{-4}$	-0.47309
$\Delta E_t, \text{eV}$	-0.3055	-0.4782	-1.4898	-0.0201	-0.4184

Примечание. Величины $\Delta\sigma_s$ и $\Delta\sigma_a$ соответствуют изменению диффузионного барьера миграции галоидной вакансии, захватившей один электрон в симметричное и антисимметричное состояние соответственно; величины ΔE_s и ΔE_t соответствуют изменению диффузионного барьера при захвате двух электронов в синглетное и триплетное состояние соответственно. Расчеты проводились для $n = 5$.

жения, электрон-фононное взаимодействие рассматривалось в модели Фрëлиха. Положению седловой точки соответствует электронная энергия для $R = 4.4 \text{Å}$ (ближайшее расстояние между галоидными вакансиями), энергии F' -центра — точка $R = 0$. Из рисунка видно, что положение седловой точки для системы в триплетном состоянии является энергетически выгодным с точки зрения понижения электронной энергии. В тех конкретных ситуациях, когда диффузионный барьер миграции пустой вакансии меньше, чем соответствующее понижение электронной энергии для триплетного состояния, положение седловой точки может оказаться энергетически более выгодным. Тогда триплетное состояние F' -центра будет реализовываться в положении седловой точки, а основное синглетное состояние соответствовать основной (одновакансионной) конфигурации системы.

На рис. 2 приводятся зависимости энергии нижайших $1\sigma_g$ - и $1\sigma_u$ -термов одноэлектронной системы, полученные в результате варьирования функционала, соответствующего гамильтониану (2) с вариационной ВФ, выбранной в виде (4) для параметров KCl.

Применение континуального приближения к количественным расчетам энергии F -и F' -центров в ЩГК не является строго обоснованным из-за того, что радиус локализации волновой функции подобных состояний сопоставим по порядку величины с постоянной решетки. Известно также, что определение эффективной массы зонного электрона как параметра теории по величине энергии, соответствующей переходу из $1s$ - в $2p$ -состояние F -центра, дает завышенное значение. По нашему мнению, основная погрешность применения континуального приближения к подобным системам состоит в пренебрежении эффектами пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости, играющими значительную роль для сравнительно глубоких автолокализованных состояний. При качественном описании поляронов малого радиуса вместо эффективной массы используют массу электрона, а электрон-фононное взаимодействие продолжают описывать гамильтонианом Фрëлиха [14]. При более корректном рассмотрении должны использоваться не макроскопические значения высокочастотной и статической диэлектрических проницаемостей, а некоторые эффективные значения, со-

ответствующие радиусу автолокализованного состояния. Поэтому из сопоставления энергии F -центра, полученной в результате вариационных расчетов и экспериментального значения данной величины, определяется не абсолютное значение эффективной массы зонного электрона, а эффективная энергетическая единица, или эффективная константа электрон-фононного взаимодействия F -центра. Последняя в общем случае не должна совпадать с константой Фрëлиха для свободного полярона из-за более существенного влияния эффектов пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости на величину энергии локализованного состояния по сравнению со свободным поляроном. Полученную таким образом эффективную константу электрон-фононного взаимодействия можно использовать при пересчете энергетических единиц, используемых для теоретических расчетов, в электрон-вольты.

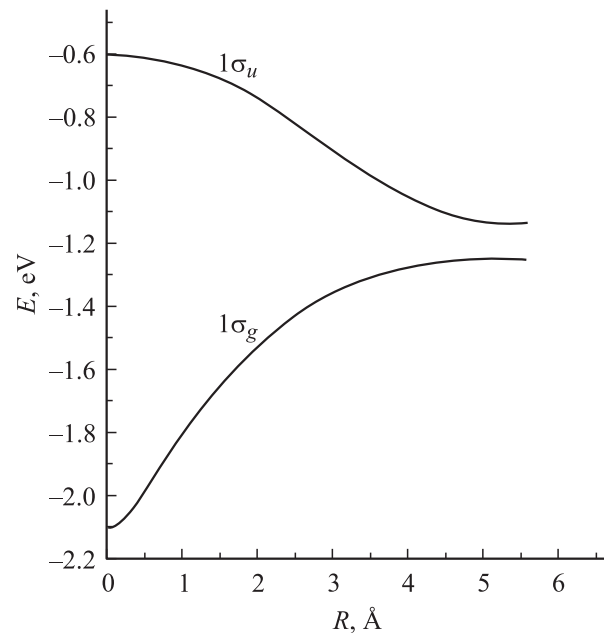


Рис. 2. Зависимости от расстояния между галоидными вакансиями электронной части полной энергии симметричного ($1\sigma_g$) и антисимметричного ($1\sigma_u$) термов для F -центра при переходе ближайшего к F -центру галоидного иона в положение седловой точки.

В таблице приведены рассчитанные величины изменения диффузионного барьера пустой вакансии в ряде ЩГК при захвате двух электронов в синглетное и триплетное состояние, а также для одноэлектронных $1s-2p$ -состояний, которым в состоянии седловой точки соответствуют $1\sigma_g$ - и $1\sigma_u$ -термы. Энергетические разности Δ_s и Δ_t определяются соотношениями

$$\Delta_{s,t} = E(R_c)_{s,t} - E(0)_{s,t}, \quad (5)$$

где $E(R_c)_{s,t}$ — энергия двухэлектронной системы, взаимодействующей с положительными зарядами в точках a и b и с отрицательным зарядом в точке c . Индексы s и t соответствуют синглетному и триплетному состояниям соответственно.

Для одноэлектронных состояний соответствующие энергетические разности имеют вид

$$\sigma_{g,u} = E(R_c)_{g,u} - E(0)_{g,u}, \quad (6)$$

где энергия $E(0)_{g,u}$ соответствует полной энергии релаксированного состояния F -центра в $1s$ - и $2p$ -состояниях соответственно; величина $E(R_c)_{g,u}$ — энергия одноэлектронного состояния в конфигурации седловой точки, рассчитанная с использованием ВФ (4).

Из таблицы видно, что в синглетном состоянии энергия активации диффузии F' -центра больше, а в триплетном — меньше по сравнению с энергией активации диффузии пустой вакансии.

Для всех рассматриваемых случаев энергия, соответствующая основному состоянию, значительно превышает энергии длинноволновых фононов. Поэтому применение метода Буймишрова–Пекара к рассматриваемым системам лишь незначительно (в пределах 5%) понижает энергию системы, полученную вариационным методом, по сравнению с предельным случаем, соответствующим адиабатическому приближению.

5. Рассчитанное понижение диффузионного барьера для миграции свободной вакансии при захвате двух электронов в триплетное состояние в КСI составляет ≈ 0.31 eV. До настоящего времени невыясненным противоречием оставалось расхождение в энергиях активации диффузии пустой вакансии, полученное непосредственным измерением данной величины методом меченых атомов [15] и косвенным путем из оптических экспериментов по образованию F_A -центров [5]. Так, непосредственные измерения давали значение 0.95 eV, в то время как энергия активации диффузии пустой вакансии, полученная из оптических экспериментов, приводила к значению 0.6 eV. Расхождение в энергии активации в 0.35 eV трудно было объяснить даже ссылкой на различие в температурном интервале, в котором проводились данные эксперименты. В работе [5] значение энергии активации 0.6 eV приписывалось более подвижной системе из двух равноправных с точки зрения экспериментального наблюдения претендентов: пустая вакансия либо F' -центр. Поскольку считалось маловероятным, что F' -центр диффундировал быстрее, значение 0.6 eV

было отнесено именно к энергии активации пустой вакансии. В неравновесных условиях подсветки F -полосы, когда происходит захват второго электрона F -центром с образованием F' -центра, электроны захватываются как в синглетное, так и в триплетное состояние. При этом, даже если последнее состояние является термически нестабильным по отношению к распаду на полярон и F -центр, время подобного распада (время термической ионизации) по порядку величины соответствует времени диффузионного скачка диффундирующего центра. Таким образом, наиболее подвижными и химически активными с точки зрения прохождения фото-химических реакций в твердом теле являются триплетные состояния F' -центров. Также важно, что захват второго электрона в синглетное состояние F' -центра значительно понижает диффузионный барьер миграции одноэлектронного F -центра. Подобное понижение барьера в КСI соответствует разности $\Delta E_s - \Delta \sigma_g = -0.51$ eV.

Как показали наши численные расчеты, наиболее подвижной системой в кристаллах КСI должны быть триплетные F'_A -центры, однако оптические эксперименты, связанные с двулучепреломлением в системе синглетных F'_A -центров, не могут выявить переориентации подобных центров в метастабильных триплетных состояниях.

ЩГК выбраны в качестве простейшей модельной системы. Рассматриваемый механизм может с одинаковым успехом применяться и при рассмотрении миграции вакансионных двухзарядных центров с отрицательной корреляционной энергией и в других кристаллах, в том числе кристаллах A_2B_6 . При этом следует учитывать взаимодействие с акустическими фононами, включая при необходимости в рассмотрение и пьезоактивные моды (например, в CdS).

В настоящее время метастабильные триплетные состояния двухэлектронных центров изучены гораздо меньше по сравнению с синглетными состояниями. В то же время есть ряд экспериментальных и теоретических работ, в которых исследуются различные аспекты, связанные именно с триплетными состояниями. Так, в работе [16] обращается внимание на необходимость учета триплетных F_3 -центров для объяснения ряда оптических экспериментов в кристаллах LiF. В работе [3] теоретически изучаются как синглетные, так и триплетные состояния D^- -центра в сферических и гауссовых квантовых ямах различной формы.

Список литературы

- [1] М.К. Шейнкман. Письма ЖЭТФ **38**, 278 (1983).
- [2] D.M. Larsen. Phys. Rev. B **20**, 5217 (1979).
- [3] J. Adamovski, M. Sobcowicz, S. Bednarek. Phys. Rev. **62**, 4235 (2000).
- [4] B. Shafran, J. Adamovski, B. Stebe. J. Phys. C **10**, 7575 (1998).
- [5] F. Lüty. In: Physics of color centers. Academic Press, N.Y. (1968). P. 181.

- [6] S. Bednarek, J. Adamovski. Phys. Rev. B **57**, 14 729 (1998).
- [7] S.B. Zhang, D.J. Chadi. Phys. Rev. B **42**, 7174 (1990).
- [8] D.J. Chadi. Phys. Rev. B **46**, 6777 (1992).
- [9] Дж. Слэтер. Электронная структура молекул. Мир, М. (1965). 588 с.
- [10] В.М. Буймистров, С.И. Пекар. ЖЭТФ **32**, 1193 (1957).
- [11] N.I. Kashirina, V.D. Lakhno, V.V. Sychyov. Phys. Rev. B **71**, 134 301-1 (2005).
- [12] R.N. Hill. Phys. Rev. Lett. **38**, 643 (1977).
- [13] Y. Toshio, O. Takashi, Sh. Yoshinoh. Annual. Rept. Rad. Center Osaka Perfect **17**, 50 (1976).
- [14] Дж. Аппель, Ю. Фирсов. Поляроны. Наука, М. (1975). 323 с.
- [15] R.G. Fuller. Phys. Rev. **142**, 524 (1966).
- [16] G. Baldacchini, E. De Nicola, R.M. Montereali, A. Scacco, V. Kaliniv. J. Phys. Chem. Sol. **61**, 21 (2000).