

## Энергия активации пространственного разделения компонентов взаимодействующих пар

© В.М. Лисицын, В.И. Корепанов, А.Н. Яковлев

Томский политехнический университет,  
634004 Томск, Россия

(Поступила в Редакцию 16 июля 1997 г.)

Созданные в процессе распада электронных возбуждений френкелевские пары дефектов в ионных кристаллах большей частью аннигилируют, часть их преобразуется в устойчивые центры окраски и накапливаются в кристаллах. Температурная зависимость эффективности накопления центров окраски имеет сложный характер. Особый интерес в этой зависимости представляет участок в области температур, в которой наблюдается существенный рост эффективности накопления центров окраски. Как было показано нами, причиной роста эффективности накопления в этой области является увеличение с ростом температуры вероятности пространственного разделения компонентов взаимодействующих пар, созданных радиацией, посредством термоактивированного движения подвижного компонента [1,2].

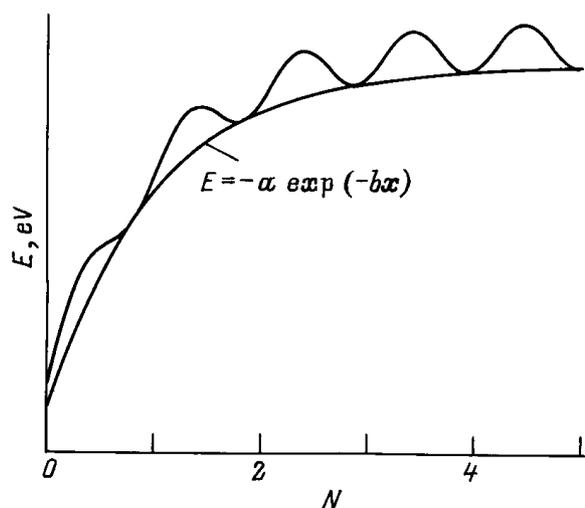
В настоящей работе методами машинного моделирования проведен анализ процесса пространственного разделения F–H-пар с заданным начальным взаимным распределением компонентов с целью установления зависимости энергии активации процесса накопления от параметров, определяющих термоактивированное движение подвижного компонента пары в поле неподвижного.

Для расчетов процесса разделения созданных при распаде электронных возбуждений коррелированных F–H-пар посредством термоактивированного движения подвижного компонента пары, H-центра, была принята следующая модель. При температурах выше необходимой для делокализации (20–60 К в щелочно-галогидных кристаллах) H-центр может совершать термоактивированное движение посредством последовательных перескоков в соседние узлы решетки. Поскольку энергия активации реориентации H-центра ниже необходимой для перескока (см., например, [3]), в модели предполагалось, что переходы H-центра возможны в любом направлении независимо от его исходной ориентации. H-центр находится в поле притяжения F-центра. В модели это учитывалось искажением потенциального рельефа для движения H-центра в ближайшей к F-центру области кристалла. Схематически потенциальный рельеф для движения H-центра в поле F-центра представлен на рисунке. Потенциал взаимодействия F-центра с H-центром неизвестен. Нами он задавался в виде  $E(r) = -a \exp(-br)$ , что позволяло в расчетах изменять как величину этого взаимодействия через параметр  $a$ , так и жесткость (дальнодействие) через параметр  $b$ .

В расчетах задавалось исходное положение H-центра в одном из ближайших к F-центру узлов решетки. Затем

с использованием метода Монте-Карло рассчитывались вероятности перехода H-центра из заданного в любое возможное для его размещения состояние в результате серии последовательных скачков. Попадание H-центра в нулевое состояние в модели означало его аннигиляцию с F-центром и исчезновение. В том случае, когда H-центр оказывался за пределами 12 сферы его возможных размещений вокруг F-центра, считалось, что H-центр преобразуется в устойчивый при условиях испытаний центр и не может аннигилировать в дальнейшем. Рассчитывалась вероятность того, что H-центр сохранится к заданному времени его миграции в зависимости от температуры кристалла. Сохранившимся считался любой H-центр вне зависимости от его размещения (внутри или вне 12 сфер вокруг F-центра). Из температурной зависимости вероятности сохранения H-центра рассчитывалась эффективная энергия активации процесса пространственного разделения взаимодействующих компонентов F–H-пары (или эффективная энергия активации процесса накопления дефектов).

Были проведены расчеты эффективной энергии активации процесса пространственного разделения взаимодействующих F–H-пар в зависимости от энергии активации миграции H-центра  $E_H$ , параметров потенциала взаимодействия F- и H-центра  $a$  и  $b$ .



Схематический вид потенциального рельефа для движения H-центра в поле F-центра. Номер состояния  $N$  означает порядковый номер сферы эквивалентных взаимных размещений центров.

**Таблица 1.** Зависимость эффективной энергии активации  $E_p$  процесса пространственного разделения расположенных в соседних узлах решетки F- и H-центров от параметров потенциала их взаимодействия вида  $E(r) = -a \exp(-br)$  и энергии активации миграции H-центра  $E_H$  в кристалле с решеткой NaCl

$E_H, \text{eV}$	$a$	$E_p, \text{eV}$		
		$b = 7$	$b = 8$	$b = 9$
0.02	6	0.0311	0.0105	0.0034
	9	0.0536	0.0199	0.0064
	12	0.0833	0.0305	0.0102
	15	0.104	0.0414	0.0149
0.04	6	0.0311	0.0105	0.0034
	9	0.0536	0.0199	0.0064
	12	0.0833	0.0305	0.0102
	15	0.104	0.0414	0.0149
0.06	6	0.0311	0.0105	0.0034
	9	0.0536	0.0199	0.0064
	12	0.0833	0.0305	0.0102
	15	0.104	0.0414	0.0149
0.08	6	0.0311	0.0105	0.0034
	9	0.0536	0.0199	0.0064
	12	0.0833	0.0305	0.0102
	15	0.104	0.0414	0.0149

**Таблица 2.** Зависимость энергии активации процесса пространственного разделения F- и H-центров от их исходного взаимного размещения в кристалле с решеткой NaCl

Исходное распределение по состояниям			$E_p, \text{eV}$
0	1	2	
0	1	0	0.0414
0	0	1	0.0076
0	0.5	0.5	0.0142

Результаты расчетов энергии активации  $E_p$  процесса пространственного разделения компонентов F–H-пар в кристалле с решеткой NaCl для случая, когда H-центр в начале процесса размещался в ближайшем к F узле решетки (состояние [110] при размещении F в начале координат) представлены в табл. 1. Расчеты были выполнены для разделения F–H-пар за  $10^{-8}$  s после старта при указанных в таблице параметрах потенциала. Как показали расчеты, эффективная энергия активации процесса пространственного разделения компонентов F–H-пар  $E_p$  не зависит от энергии активации миграции H-центра  $E_H$ , мало изменяется со временем и стремится к предельному значению. Установлено, что  $E_p$  зависит от параметров потенциала взаимодействия F- и H-центра  $a$  и  $b$ .

Энергия активации процесса пространственного разделения зависит от исходного взаимного распределения компонентов разделяющейся пары. В табл. 2 для примера приведены результаты расчета  $E_p$  для случаев, когда стартовыми для начала движения H-центров являются

состояния 1 или 2, соответствующие для кристалла с решеткой NaCl узлам [110] и [200] относительно F, также равновероятным в этих двух состояниях. В этой таблице представлены результаты расчетов, выполненные для  $E_H = 0.06 \text{ eV}$ ,  $a = 15 \text{ eV}$  и  $b = 8$ . Сделанное заключение действительно и для любых других параметров потенциала взаимодействия и  $E_H$ .

Нами были выполнены расчеты зависимости энергии активации процесса пространственного разделения от параметров потенциала взаимодействия и энергии активации миграции H-центра в кристалле с решеткой флюорита. Зависимости имеют качественный характер, совершенно подобный описанным выше. Но при всех равных исходных для расчета параметрах в кристалле с решеткой флюорита  $E_p$  оказывается в 2–3 раза ниже, чем в кристалле с решеткой NaCl.

Проведенные расчеты позволили составить качественное представление о процессе разделения образующихся при распаде электронных возбуждений коррелированных близкорасположенных взаимодействующих пар Френкеля. Траектория движения подвижного компонента пары в поле связанного с ним неподвижного, например, движения H-центра в поле F, имеет сложный характер. Траектория зависит от соотношения величин барьеров для скачков подвижного компонента по всем возможным направлениям, температуры кристалла. При низких температурах, но уже достаточных для преодоления H-центром наименьшего барьера для скачка, движение H-центра завершается аннигиляцией с F-центром в результате единственного или нескольких скачков в сторону F-центра. С повышением температуры увеличивается вероятность скачков H-центра в состоянии с тем же или большим расстоянием от F, т.е. с повышением температуры H-центр до аннигиляции проходит все больший путь или выходит за пределы области взаимодействия. Наиболее вероятная траектория движения H-центра в сторону удаления есть сферическая спираль. Это означает, что скорость смещения подвижного дефекта от неподвижного, в поле взаимодействия с которым он находится, много меньше скорости его движения. Это явление должно иметь место всегда при движении любого дефекта в кристалле с другими дефектами. Скорость перемещения дефекта должна резко уменьшаться при прохождении его мимо другого дефекта, с которым всегда есть взаимное притяжение или отталкивание. Этот эффект, очевидно, может сказываться на туннельных процессах. Замедление скорости перемещения дефекта возле другого должно приводить к росту эффективности возможных туннельных процессов между ними.

## Список литературы

- [1] В.М. Лисицын. Изв. вузов. Физика, 2, 86 (1979).
- [2] В.М. Лисицын, В.И. Корепанов, В.Ю. Яковлев. Изв. вузов. Физика, 11, 5 (1996).
- [3] Ч.Б. Лушник, А.Ч. Лушник. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах. Наука, М. (1989). 264 с.