

Э. И. АДІРОВИЧ

**О ВЛИЯНИИ ЛОКАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ НА
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКУЮ ПРОНИЦАЕМОСТЬ КРИСТАЛЛОФОСФОРОВ**

(Представлено академиком С. И. Вавиловым 4 IV 1949)

1. Возбуждение твердых фосфоров, обладающих кристаллическим свечением ⁽¹⁾, приводит, как правило, к заметному увеличению их диэлектрической проницаемости ⁽²⁾. Параллелизм между затуханием фосфоресценции и затуханием $\Delta\varepsilon = \varepsilon - \varepsilon_0$, а также „замораживание“ $\Delta\varepsilon$ охлаждением и уничтожение инфракрасным облучением доказывают, что диэлектрические изменения обусловлены электронами, локализованными на уровнях прилипания. Пользуясь модельным представлением дефектов кристаллической структуры ^(3,4), оценим порядок величины $\Delta\varepsilon$. Мы ограничимся в настоящей работе чисто электронной поляризацией s -состояний дефектов в статических полях.

2. До тех пор, пока изменение энергии, вызываемое поляризацией локализованного электрона, мало по сравнению с его энергией связи $(\frac{1}{2} \frac{e^2}{b} E^2 \ll -UW)$, эффекты, вызываемые полем, состоят в смещении электронного облака как целого. Дипольный момент дефекта $\mathbf{p} = -e\vec{\eta}$ и волновые функции электрона до и после наложения поля (соответственно $\varphi(\mathbf{r}, x)$ и $\psi(\mathbf{r}, x)$) связаны между собой уравнением

$$\psi(\mathbf{r}, x) = \varphi(|\mathbf{r} - \vec{\eta}|, x) = \varphi(\sqrt{z^2 + \eta^2 - 2z\eta \cos \theta}, x). \quad (1)$$

Равнодействующая сил, приложенных к электронному облаку со стороны двойного слоя, равна

$$\begin{aligned} F' &= - \int eE^i(z, x) \varphi^2(\sqrt{z^2 + \eta^2 - 2z\eta \cos \theta}, x) z^2 dz \sin \theta \cos \theta d\theta d\alpha = \\ &= - 2\pi \int \varphi^2(\sqrt{x^2 + \eta^2 - 2x\eta \cos \theta}, x) x^2 \sin \theta \cos \theta d\theta, \end{aligned} \quad (2)$$

так как $E^i(z, x) = \frac{\delta(z-x)}{e}$ (см. ⁽³⁾).

При $\eta \ll x$

$$\begin{aligned} \varphi^2(\sqrt{x^2 + \eta^2 - 2x\eta \cos \theta}, x) &= \varphi^2(x - \eta \cos \theta, x) \approx \\ &\approx \varphi^2(x, x) - \frac{\partial [\varphi^2(z, x)]}{\partial z} \Big|_{z=x} \eta \cos \theta. \end{aligned} \quad (3)$$

Подстановка (3) в (2) приводит к

$$F' = -a\eta, \quad (4)$$

где

$$a = -\frac{4\pi}{3} x^2 \left. \frac{\partial [\varphi^2(z, x)]}{\partial z} \right|_{z=x}. \quad (5)$$

Пользуясь соотношением

$$\rho(z, x) = u^2(z, x) = 4\pi z^2 \varphi^2(z, x) \quad (6)$$

(см. (3) формула (17)), преобразуем a к следующему виду:

$$a = \frac{1}{3} \left[\frac{2\rho(x, x)}{x} - \left. \frac{\partial \rho(z, x)}{\partial z} \right|_{z=x} \right]. \quad (7)$$

Согласно формуле (10) в (3) находим, что

$$\begin{aligned} \frac{2\rho(x, x)}{x} &= \frac{4\sqrt{V-W}\sin^2\sqrt{1+W}x}{x(1+x\sqrt{V-W})}, \\ \left. \frac{\partial \rho(z, x)}{\partial z} \right|_{z=x} &= \frac{4\sqrt{V-W}\sqrt{1+W}\sin\sqrt{1+W}x \cos\sqrt{1+W}x}{1+x\sqrt{V-W}}. \end{aligned} \quad (8)$$

Привлекая соотношение

$$\operatorname{tg}\sqrt{1+W}x = -\frac{\sqrt{1+W}}{\sqrt{V-W}}, \quad (9)$$

вытекающее из (3), формула (11), получаем

$$a_n = \frac{4}{3} \frac{\sqrt{V-W_n}(1+W_n)}{1+x\sqrt{V-W_n}} \left(\frac{1}{x} + \sqrt{V-W_n} \right). \quad (10)$$

Индекс n в (10) — главное квантовое число электронного состояния. Энергия связи электрона в состоянии ns , обозначаемая W_n , и радиус дефекта x связаны соотношением

$$x = \frac{n\pi - \arccos\sqrt{V-W_n}}{\sqrt{1+W_n}} \quad (11)$$

(см. (3)). Следовательно, для любого состояния ns формула (10) показывает нам, как зависит от размеров дефекта коэффициент в выражении для квазиупругой силы (4), действующей на электрон. Для состояния $1s$ эта зависимость представлена графически на рис. 1.

Формула (4) записана в безразмерных величинах, причем расстояния выражены в долях $L = \hbar/\sqrt{2mU}$, а силы — в долях U/L . В размерных единицах эта формула принимает следующий вид:

$$|F| = b\eta = \frac{U}{L^2} a\eta = \frac{2mU^2 a}{\hbar^2} \eta. \quad (12)$$

В статическом внешнем поле E

$$\frac{2mU^2 a}{\hbar^2} \eta = eE', \quad (13)$$

откуда находим дипольный момент p и поляризуемость α дефекта

$$p = e\eta = \alpha E', \quad (14)$$

где

$$\alpha = \frac{e^2 \hbar^2}{2mU^2 a}. \quad (15)$$

Пусть ν — концентрация локализованных электронов. Пусть $N_0 \alpha_0$ — отнесенная к единице объема поляризуемость невозбужденного кристалла. Допустим также справедливость известного соотношения между средним и эффективным полями

$$E' = E + \frac{4\pi}{3} P. \quad (16)$$

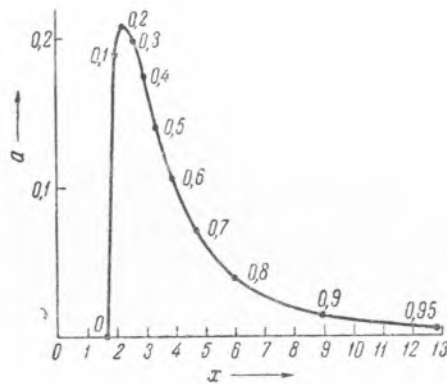


Рис. 1. Зависимость коэффициента a от радиуса дефекта в состоянии $1s$. Цифры возле точек указывают значения W

В таком случае

$$\epsilon = \frac{\frac{3\epsilon_0}{\epsilon_0 + 2} + \frac{8\pi}{3} \nu \alpha}{\frac{\epsilon_0 + 2}{\epsilon_0 + 2} - \frac{4\pi}{3} \nu \alpha}, \quad (17)$$

где

$$\epsilon_0 = \frac{1 + \frac{8\pi}{3} N_0 \alpha_0}{1 - \frac{4\pi}{3} N_0 \alpha_0} \quad (18)$$

диэлектрическая проницаемость невозбужденного фосфора.

Положим, в соответствии с экспериментальными данными, $\epsilon_0 \approx 10$, $\nu \approx 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $U \approx 10^{-12}$ эрг. Для вычисления ϵ согласно (17) и (15) необходимо знать величину a . Поскольку a входит в знаменатель выражения для поляризуемости α (15) и может, вообще говоря, принимать сколь угодно малые значения (см. (10) и рис. 1), величина диэлектрической проницаемости ϵ существенно зависит от значения a .

3. Рассматривать поляризацию кристалла в целом, как простую сумму поляризаций отдельных дефектов, т. е. пренебречь взаимодействием локализованных электронов, можно лишь в том случае, когда характеристическая длина $1/\sqrt{W}$, на протяжении которой плотность электронного облака снаружи двойного слоя спадает в e

раз⁽³⁾, мала по сравнению со средним расстоянием между дефектами структуры. При концентрации дефектов $\sim 10^{18}$ см⁻³ расстояние между ними равно в среднем $20d$. Считая постоянную решетку d равной 5 \AA и замечая, что при $U \approx 1 \text{ eV}$ длина $L = \hbar / \sqrt{2mU}$, в долях которой записаны все длины в безразмерных формулах, равна $L \approx 2,5 \text{ \AA} \approx d/2$, приходим к требованию

$$-W \gtrsim 0,1. \quad (19)$$

Обращаясь к рис. 1, видим, что область очень малых значений слева оказывается тем самым исключенной.

То же условие независимости отдельных дефектов и взаимодействия их лишь через макроскопические поля заставляет потребовать, чтобы диаметр дефекта был меньше среднего расстояния между ними:

$$2x < 40. \quad (20)$$

При $x \approx 10$ находим из графика на рис. 1, что $-W \cong 0,9$, а $a_1 \approx 0,01$. Значительно меньшие значения a_1 справа исключаются требованием (20).

При $a_1 = 0,01$ из формулы (17) находим, что $\epsilon = 12,4$, т. е.

$$\Delta\epsilon \approx 2. \quad (21)$$

Таким образом, изменение диэлектрической проницаемости, обусловленное электронами прилипания, может составить несколько единиц, даже при чисто аддитивном рассмотрении поляризаций дефектов структуры.

4. Полученные результаты справедливы при двух предположениях:

$$\frac{1}{2} \frac{e^2}{b} E'^2 \ll -WU, \quad \eta = \frac{e\sqrt{2mU}}{b\hbar} E' \ll x, \quad (22)$$

причем коэффициент b в (22) равен $\frac{2mU^2}{\hbar^2} a$ (см. (12) и (13)). Из этих условий следует, что

$$E' \ll \frac{2\sqrt{m}U^{1/2}V\bar{W}V\bar{a}}{\hbar e}, \quad E' \ll \frac{V\sqrt{2m}U^{1/2}ax}{\hbar e}. \quad (23)$$

При $U \sim 1 \text{ eV}$, $x \sim 10$, $a \sim 0,01$ и $W \gtrsim 0,1$ область применимости полученных выше результатов определяется неравенством

$$E' \ll 500 \text{ кв/см}, \quad (24)$$

т. е. простирается почти до пробивных напряженностей.

Физический институт
им. П. Н. Лебедева
Академии наук СССР

Поступило
10 III 1949

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ В. Л. Левшин, Изв. АН СССР, сер. физ., **9**, 355 (1945). ² G. F. J. Garlick and A. F. Gibson, Proc. Roy. Soc., A, **188**, 485 (1947). ³ Э. И. Адирович, ДАН, **63**, 111 (1948). ⁴ Э. И. Адирович, ДАН, **63**, 635 (1948).