

О ВОЗБУЖДЕНИИ ЛОКАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ ЗАРЯЖЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ И СТУПЕНЬКАМИ ДВИЖУЩИХСЯ ДИСЛОКАЦИЙ В ЩЕЛОЧНОГАЛОИДНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Ю. Я. ЮШИН

ИНСТИТУТ КРИСТАЛЛОГРАФИИ им. А. В. ШУБНИКОВА АКАДЕМИИ НАУК СССР,
МОСКВА, СССР

и

Й. ЯНСКИ

ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ГРУППА ПО КРИСТАЛЛОФИЗИКЕ ВЕНГЕРСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
БУДАПЕШТ

(Поступило 22. I. 1976)

Решена задача о возбуждении оптически активных локальных колебаний в щелочно-галоидных кристаллах движущейся заряженной частицей. Вычислены величина поглощаемой локальными колебаниями энергии и интенсивность их инфракрасного излучения в случаях, когда движущимися зарядами являются ионы и заряженные ступеньки движущихся дислокаций. Предлагается использовать детектирование этого излучения для определения количества нерелятивистских ионов в каскадах, создаваемых в кристаллах частицами высоких энергий, и для диагностики плазмы при разрушении кристалла интенсивным световым импульсом.

1) Существование локальных колебаний в кристаллах с примесями проявляется в различных физических свойствах этих кристаллов [1—3]. В щелочно-галоидных кристаллах (щ. г. к.) с примесями замещения наличие оптически активных локальных колебательных мод приводит к инфракрасному поглощению на частотах, превышающих частоты поперечных оптических колебаний совершенного кристалла [2—3].

В настоящей работе рассматривается задача о воздействии заряженной частицы, движущейся внутри кристалла, на локальное оптическое колебание в щ. г. к. со структурой NaCl. Предполагается, что температура кристалла произвольна. Поэтому до прохождения заряженной частицы локальная мода находится в тепловом равновесии с остальными колебательными модами кристалла, а её возбуждение описывается планковской функцией распределения. Учитывая что это обстоятельство, мы провели исследование в рамках квантовой теории.

В п. 2, 3 изложено решение указанной задачи в гармоническом приближении, полученное с помощью методов нерелятивистской квантовой теории поля. Возбуждение локальной моды значительно, если эффективное время пролета заряженной частицы порядка периода колебания и много меньше его времени жизни, что и оправдывает применение гармонического приближения.

Полученные результаты мы используем в п. 4, 5 для тех случаев, когда движущимися зарядами являются ионы и заряженные ступеньки краевых дислокаций. В частности, в этих случаях может быть обнаружено инфракрасное излучение из кристалла на частоте локальных колебаний ω_0 . Следует подчеркнуть, что это излучение, в отличие от излучения основной решетки, не будет поглощено внутри кристалла, что облегчает его детектирование.

Наши результаты, записанные в общем виде, справедливы для любых центров в щ. г. к. Однако наиболее изучены, как экспериментально, так и теоретически, U -центры в щ. г. к. [2, 3], когда примесью замещения является водород или дейтерий. Поэтому в дальнейшем мы будем конкретизировать наше рассмотрение, используя теоретические модели U -центров.

2) Если на ионы кристаллической решетки действуют силы, зависящие от времени, и $F_\alpha(l, k, t)$ — декартова компонента ($\alpha = 1, 2, 3$) силы, действующей на k -ый атом в l -ой ячейке в момент времени t , то в гармоническом приближении поведение системы ионов будет описываться гамильтонианом

$$H = H_0 + H_1, \quad H_1 = - \sum_{l, R, \alpha} u_\alpha(l, k) F_\alpha(l, k, t), \quad (1)$$

$$H_0 = \sum_{l, k, \alpha} \frac{p_\alpha^2(l, k)}{2 M_{lk}} + \frac{1}{2} \sum_{l, k, \alpha} \sum_{l', k', \beta} \varphi_{\alpha\beta}(lk; l'k') U_\alpha(l, k) U_\beta(l', k'). \quad (2)$$

Здесь M_{lk} , $p_\alpha(l, k)$, $u_\alpha(l, k)$ — соответственно масса и компоненты импульса и отклонений k -го иона в l -ой ячейке кристалла, $\varphi_{\alpha\beta}(lk; l'k')$ — динамическая матрица кристалла [2]. Отклонения и импульсы отдельных ионов можно выразить через нормальные координаты $A = a_s + a_s^+$ и канонически сопряженные им импульсы

$$P_s = \frac{\hbar}{2i} (a_s - a_s^+),$$

$$u_\alpha(lk) = \left(\frac{\hbar}{2M_{lk}} \right)^{1/2} \sum_n \omega_s^{-1/2} B_\alpha^{(s)}(lk) A_s, \quad (3)$$

$$P_\alpha(lk) = \left(\frac{2M_{lk}}{\hbar} \right)^{1/2} \sum_s \omega_s^{1/2} B_\alpha^{(s)}(lk) P_s. \quad (4)$$

Здесь \hbar — постоянная Планка, ω_s — частоты нормальных колебаний. Операторы рождения и уничтожения фононов s -ой моды колебаний a_s^+ , a_s удовлетворяют перестановочным соотношениям $[a_\alpha^s, a_\beta^R] = \delta_{s\beta}$, а коэффициенты $B_\alpha^{(s)}(lk)$ — условиям ортонормированности и замкнутости

$$\sum_{lk\alpha} B_\alpha^{(s)}(lk) B_\alpha^{(s')}(lk) = \delta_{ss'}, \quad \sum_n B_\alpha^{(s)}(lk) B_\beta^{(s')}(l'k') = \delta_{ll'} \delta_{kk'} \delta_{\alpha\beta}. \quad (5)$$

Используя (3), преобразуем $H_1(t)$ к виду

$$H_1 = - \sum_k f_s(t) A_s, \quad f_s(t) = \sum_{l, k, \alpha} \left(\frac{\hbar}{2M_{lk}\omega_s} \right)^{1/2} B_\alpha^{(s)}(l, k) F_\alpha(l+k, t). \quad (6)$$

Гейзенберговские уравнения движения для операторов $A_s(t)$, $P_s(t)$, вытекающие из (1)–(6), имеют вид

$$\dot{A}_s(t) = 2 \frac{\omega_s}{\hbar} P_s(t), \quad \dot{P}_s(t) = - \frac{\hbar\omega_s}{2} A_s(t) + f_s(t), \quad (7)$$

или

$$\ddot{A}_s(t) + \omega_s^2 A_s(t) = \frac{2\omega_s}{\hbar} f_s(t). \quad (8)$$

Используя запаздывающую функцию Грина ур. (8), получаем его решение

$$A_s(t) = A_s^{(in)}(t) + \frac{2}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' f_s(t') \sin \omega_s(t-t'). \quad (9)$$

Здесь предполагается, что при $t \rightarrow -\infty$ силы $F_\alpha(l, k, t) \rightarrow 0$, $A_s^{(in)}(t)$ — операторное решение соответствующего однородного уравнения, удовлетворяющее некоторому начальному условию при $t \rightarrow -\infty$.

Рассматривая задачу о возбуждении заряженной частицей локальных колебаний оптического типа, предположим, что частица с зарядом Ze движется прямолинейно со скоростью \vec{v} в плоскости, образованной кристаллографическими осями x, y , траектория совпадает с кристаллографической осью x , а примесный атом находится в той же плоскости на оси y на расстоянии b от начала координат.

При вычислении $f_s(t)$ по ф. (6) учтем, что $F_\alpha(l, k, t) = e_{lk} E_\alpha(l, k, t)$, $E(l, k, t)$ — напряженность электрического поля, создаваемая заряженной частицей в точке, совпадающей с положением равновесия иона (lk) , e_{lk} — электрический заряд этого иона.

Кроме примесного атома, в локальном колебании участвует лишь небольшое число его соседей, для которых $B_\alpha^{(s)}(l, k)$ существенно отличны от нуля. Так в модели примеси замещения [3], в которой учтено отличие массы примесного атома от массы замещенного им атома основной решетки и изменение силы взаимодействия между атомом примеси и его ближайшими соседями, лишь для этих последних $B_\alpha^{(s)}(l, k) \neq 0$.

Как следует из модели междуузельного дефекта, рассмотренной в [4] (U_1 центр в KI), в локальном колебании, ответственном за инфракрасное поглощение, практически участвует лишь ион водорода.

Предполагая, что прицельное расстояние $b > a$ (a — расстояние между ближайшими соседями в решетке), запишем $E_\alpha(l, k, t) \approx E_\alpha(0, t) +$

+ $(\mathbf{R}_{lk} - \mathbf{R}_0) \nabla E_\alpha$, пренебрегая высшими членами разложения по $\mathbf{R}_{lk} - \mathbf{R}_0$, где \mathbf{R} — радиус-векторы иона примеси (0) и его соседей (lk), а градиент $\nabla E_\alpha(t)$ вычислен в точке нахождения примеси. Для дефектов замещения в щ. г. к. примесный атом является центром симметрии. Поэтому второй член разложения дает нулевой вклад в $f_s(t)$, так как для двух одноименных ионов, расположенных симметрично относительно примесного атома, все множители в (6) одинаковы, за исключением $\mathbf{R}_{lk} - \mathbf{R}_0$, которые отличаются знаком. Учитывая это в (6), получаем

$$f_s(t) = \sum_{\alpha} E_{\alpha}(0, t) g_{\alpha}^{(s)}, g_{\alpha}^{(s)} = \sum_{l,k} e_{lk} \left(\frac{\hbar}{2M_{lk} \omega_s} \right)^{1/2} B_{\alpha}^{(s)}(lk). \quad (10)$$

Заметим, что оператор дипольного момента, связанного с отклонением ионов от равновесных положений, равен

$$d_{\alpha} = \sum_{l,k} e_{lk} u_{\alpha}(lk) = \sum_s g_{\alpha}^{(s)} A_s. \quad (11)$$

Таким образом, возбуждение локального колебания происходит за счёт взаимодействия его дипольного момента $g^{(s)} A_s$ с кулоновским полем движущейся заряженной частицы.

Локальные оптические колебания, связанные с дефектами замещения в щ. г. к. с кубической решеткой, трехкратно вырождены. Векторы $g^{(s)}$ для трех вырожденных ветвей $s = 1, 2, 3$ ортогональны, поскольку при поворотах на углы $\pi/2$ они должны переходить друг в друга. Произведя линейное преобразование для нормальных координат A_1, A_2, A_3 , мы можем добиться того, что векторы $g^{(s)}$ будут направлены по кристаллографическим осям. Поэтому запишем $g_{\alpha}^{(s)} = g \delta_{\alpha s}$, $s = 1, 2, 3$. Мы вычислили величину g для упомянутой выше модели [3] и получили

$$|g| = \frac{e_0 \hbar}{\omega_0 (M_1 M_2)^{1/2}} \frac{M_1 + M_2}{M_1 + 2M_2}. \quad (12)$$

Здесь M_1 — масса одновалентного примесного иона, M_2 — масса ближайшего соседнего иона основной решетки, $e_0 = |e_{lk}|$, ω_0 — частота локального колебания. С другой стороны, величина g может быть найдена из результатов экспериментов по инфракрасному поглощению на частоте ω_0 .

Предположим, что в момент времени $t = 0$ заряженная частица находится в начале координат на расстоянии b от примесного иона. Тогда компоненты напряженности её собственного кулоновского поля в точке расположения примеси в момент времени t равны ($v_x = v > 0$)

$$\tilde{E}_y(0, t) = \frac{Zeb}{(v^2 t^0 + b^2)^{3/2}}, \quad \tilde{E}_x(0, t) = -\frac{Zevt}{(v^2 t^2 + b^2)^{2/2}}, \quad \tilde{E}_z(0, t) = 0. \quad (13)$$

Разложим $\tilde{E}_{x,y}(t)$ в интеграл Фурье и вычислим компоненты Фурье

$$\tilde{E}_{x,y}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{E}_{x,y}(t) e^{i\omega t} dt.$$

Получаем [5]

$$\tilde{E}_y(\omega) = \frac{Zeb}{2\pi v} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x^2 + b^2)^{-1/3} \cos \frac{\omega x}{v} = \frac{Ze\omega}{\pi v^2} K_1 \left(\frac{\omega b}{v} \right), \quad (14)$$

$$\tilde{E}_x(\omega) = -i \frac{Ze}{2\pi v} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x^2 + b^2)^{-3/2} x \sin \frac{\omega x}{v} = -i \frac{Ze\omega}{\pi v^2} K_0 \left(\frac{\omega b}{v} \right), \quad (15)$$

где $K_{0,1} \left(\frac{\omega b}{v} \right)$ — модифицированные функции Бесселя третьего рода.

Учтем теперь поляризацию кристаллической среды электрическим полем заряженной частицы. Для этого мы воспользуемся результатом, полученным в теории многих тел в рамках диэлектрического формализма [6, 7], и запишем

$$U(\omega, \mathbf{q}) = \frac{V(\omega, \mathbf{q})}{\varepsilon(\omega, \mathbf{q})},$$

где $V(\omega, \mathbf{q})$ — компонента 4-мерного преобразования Фурье кулоновского потенциала заряженной частицы в вакууме, равная

$$\frac{Ze}{2\pi^2 q^2} \delta(\omega - \mathbf{q}\mathbf{v}) \quad [8],$$

$\varepsilon(\omega, q)$ — продольная диэлектрическая проницаемость кристалла, q — волновой вектор. $U(\omega, \mathbf{q}) = V(\omega, \mathbf{q}) + V_p(\omega, \mathbf{q})$ есть суммарный (эффективный) потенциал, создаваемый «сторонней» заряженной частицей в среде, а $V_p(\omega, \mathbf{q})$ — потенциал индуцированных зарядов. Разложим $\varepsilon^{-1}(\omega, \mathbf{q})$ в ряд по $q^2 = q^2$ (из соображений симметрии нечётные по q члены в разложении отсутствуют)

$$\varepsilon^{-1}(\omega, \mathbf{q}) = \varepsilon^{-1}(\omega, 0) + q^2 \frac{\partial \varepsilon^{-1}}{\partial (q^2)} + \dots \quad (16)$$

Эффективным безразмерным параметром разложения в (16) является $(qa)^2$ [9], a — расстояние между ближайшими соседями в решетке. В то же время в кулоновский потенциал на расстояниях $\gtrsim b$ от заряженной частицы основной вклад дают компоненты Фурье $V(\omega, \mathbf{q})$ с $q \lesssim 1/b$.

При вычислении напряженности $\mathbf{E}(0, t)$ мы ограничимся в разложении (16) его первым членом $\varepsilon^{-1}(\omega, 0) = \varepsilon^{-1}(\omega)$ (в кубических кристаллах тензор $\varepsilon_{ik}(\omega) = \delta_{ik} \varepsilon(\omega)$). Это приближение является точным при $b \gg a$, а при $b \lesssim a$

соответствует учёту главной части поляризации среды, ввиду частичной взаимной компенсации неучитываемых вкладов от наведенных поляризаций ионов в напряженность $\mathbf{E}(0, t)$. В частности, нетрудно видеть, что второй член разложения (16) дает нулевой вклад в $\mathbf{E}(0, t)$. Мы получаем в результате, что компоненты Фурье напряженности электрического поля $E_{\alpha}(0, t)$ равны $E_{x,y}(\omega) = \tilde{E}_{x,y}(\omega)/\varepsilon(\omega)$.

3) Попытаемся выяснить, в каком состоянии будут находиться осцилляторы локальных мод после прохождения заряженной частицы, если до этого они находились в состоянии теплового равновесия с остальными колебательными модами кристалла. Поскольку при $t \rightarrow \pm \infty$ $f_s(t) \rightarrow 0$ мы можем использовать формализм in, out — операторов квантовой теории поля [10]. Получаем из (9)

$$A_s^{(\text{out})}(t) = A_s^{(\text{in})}(t) + u_s^* e^{i\omega_s t} + u_s e^{-i\omega_s t}, \quad u_s = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' f_s(t') e^{i\omega_s t'}. \quad (17)$$

Интервал времени T , когда $f_s(t)$ практически отлична от нуля $T \sim C \frac{b}{v}$, где число $C \sim 10$. Поэтому гейзенберговский оператор $A_s(t)$, даваемый (9), совпадает с $A_s^{(\text{out})}(t)$ при $t > T$. Используя (10)–(15), мы получаем величины u_1, u_2 для мод, дипольный момент которых поляризован соответственно по осям x, y

$$u_1 = K_0 \left(\frac{\omega_0 b}{v} \right), \quad u_2 = i\gamma K_1 \left(\frac{\omega_0 b}{v} \right), \quad \gamma = \frac{2Zeg\omega_0}{\hbar v^2 \varepsilon(\omega_0)}. \quad (18)$$

Для вычисления средних значений динамических величин, относящихся к колебанию данной моды, перейдем к представлению взаимодействия и найдем матрицу плотности локального колебания после прохождения заряженной частицы $\hat{\rho}^{(\text{out})} = \hat{\rho}_1$, предполагая, что до этого

$$\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}^{(\text{in})} = \exp \{ -\hbar\omega_0 (a_s^+ a_s + 1)/kT \} n^{-1}(T).$$

Здесь k — постоянная Больцмана, T — температура кристалла.

Для нахождения $\hat{\rho}_1$ удобно использовать представление когерентных состояний осцилляторов $|\alpha\rangle$, обладающих свойством $a_s |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$ [11]. В α -представлении для матрицы плотности

$$\hat{\rho}_0 = \int d^2\alpha P_0(\alpha) |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad P_0(\alpha) = \frac{1}{\pi n(T)} \exp \left(-\frac{|\alpha|^2}{n(T)} \right) \quad (19)$$

и $n(T) = \left[\exp \left(\frac{\hbar\omega_0}{kT} \right) - 1 \right]^{-1}$. Когерентное состояние $|\alpha\rangle$ получается из основного состояния осциллятора $|0\rangle$ действием унитарного оператора сдвига

$|\alpha\rangle = D(\alpha) |0\rangle$, $D(\alpha) = \exp(\alpha a_s^+ - \alpha^* a_s)$ [11]. Учитывая соотношения $A_s^{(\text{out})} = S^+ A_s^{(\text{in})} S$, находим, что матрицы рассеяния S , соответствующие (17), (18), равны $D(u_s)$ для $s = 1, 2$. Поэтому оператор $\hat{\varphi}_1 = S \hat{\varphi}_0 S^+$ можно представить в виде

$$\hat{\varphi}_1 = \int d^2 \alpha P_0(\alpha) D(u_s) D(\alpha) |0\rangle \langle 0| D^+(\alpha) D^+(u_s). \quad (20)$$

Используя закон умножения операторов сдвига [11]

$$D(\alpha_2) D(\alpha_1) = D(\alpha_1 + \alpha_2) \exp\left(\frac{\alpha_2 \alpha_1^* - \alpha_2^* \alpha_1}{2}\right),$$

получаем

$$\hat{\varphi}_1(\alpha) = \int d^2 \alpha P_0(\alpha) D(\alpha) D(\alpha + u_s) |0\rangle \langle 0| D^+(\alpha + u_s). \quad (21)$$

Соответствующая (21) весовая функция

$$P_1(\alpha) = \int \delta^2(\alpha - \alpha_1 - u_s) P_0(\alpha_1) d^2 \alpha_1 = \frac{1}{\pi n(T)} \exp\left\{-\frac{|\alpha - u_s|^2}{n(T)}\right\}. \quad (22)$$

Для вычисления средних значений различных величин с помощью (21), (22), запишем выражение для соответствующего оператора в виде суммы нормальных произведений от операторов $a_s^+(t)$, $a_s(t)$. Учитывая определение когерентных состояний и ф. (19), (22), получим

$$Sp\{\hat{\varphi}_1(a_s^+(t))^n (a_s^m(t))\} = \frac{e^{i(n-m)\omega_0 t}}{\pi n(T)} \int (\alpha^* + u^*)^n (\alpha + u)^m \exp\left[-\frac{|\alpha|^2}{n(T)}\right] d^2 \alpha. \quad (23)$$

Переходя к полярным координатам в комплексной плоскости α , находим

$$[\pi n(T)]^{-1} \int (\alpha^*)^m \alpha^n \exp\left[-\frac{|\alpha|^2}{n(T)}\right] d^2 \alpha = [n(T)]^m m! \delta_{mn}. \quad (24)$$

Формулы (23), (24) позволяют найти среднее значение произвольного оператора, зависящего от a_s^+ , a_s . Из них следует, что средние от операторов, линейных по a_s^+ , a_s , получаются из соответствующего выражения для этих операторов заменой $a_s \rightarrow u_s$, $a_s^+ \rightarrow u_s^*$. Средние от операторов, квадратичных по a_s^+ , a_s , находятся с помощью соотношения $\langle a_s^+ a_s \rangle = n(T) + |u_s|^2$. В частности, под действием заряженной частицы локальная мода приобретает энергию $\hbar\omega_0 |u_s|^2$. Для энергии, приобретаемой тремя вырожденными модами одного примесного центра, получаем

$$\mathcal{E}_1(b) = \frac{4g^2 Z_2 e \omega_0^3}{\hbar v^4 \varepsilon^2 (\omega_0)} \left[K_0^2 \left(\frac{\omega_0 b}{v}\right) + K_1^2 \left(\frac{\omega_0 b}{v}\right) \right]. \quad (25)$$

Вычислим теперь с помощью матрицы плотности $\hat{\phi}_1$ интенсивность инфракрасного излучения на частоте ω_0 для одного локального центра, возбужденного заряженной частицей. Используя формулу для интенсивности дипольного излучения в среде [12], получаем

$$I_0 = 2\mathcal{E}_1(b) \Gamma_r, \quad \Gamma_r = \frac{2g^2 \omega_0^3 \varepsilon^{1/2}(\omega_0)}{3 \hbar c^3}. \quad (26)$$

В этой формуле и в дальнейшем не учитывается всегда существующее тепловое излучение оптического колебания $\sim n(T)$.

После прохождения заряженной частицы амплитуды локальных колебаний будут затухать в соответствии с формулой $u(t) = ue^{-\Gamma t}$ из-за взаимодействия с остальными колебательными модами кристалла вследствие ангармонизма, Γ — полуширина линии инфракрасного поглощения [2]. Будет затухать и интенсивность инфракрасного излучения $\sim e^{-2\Gamma t}$. Полная энергия, излученная одним центром после прохождения заряженной частицы, равна ($\Gamma_r \ll \Gamma$)

$$\mathcal{E}_r = I_0 \int_0^\infty e^{-2\Gamma t} dt = \frac{I_0}{2\Gamma} = \mathcal{E}_1(b) \frac{\Gamma_r}{\Gamma}. \quad (27)$$

Обобщим полученные результаты на случай произвольного направления движущейся частицы по отношению к кристаллографическим осям. С этой целью проведем плоскость, проходящую через траекторию частицы и примесной атом и введем в этой плоскости декартову систему координат x', y' таким образом, что траектория частицы совпадает с осью x' , а примесный атом лежит на оси y' на расстоянии b от начала координат. Величины $\tilde{E}_y(t)$, $\tilde{E}_x(t)$ и их компоненты Фурье даются ф. (13)–(15), а результирующие сдвиги координаты s -го локального колебания равны $u_s = u_1 \cos(\widehat{y' g_s}) + u_2 \cos(\widehat{y' g_s})$. В эту формулу входят косинусы углов между осями x', y' и вектором $\mathbf{g}^{(s)}$, направленным по соответствующей кристаллографической оси, u_1, u_2 даются ф. (18). Нетрудно убедиться, что ф. (25)–(27) будут по-прежнему справедливы.

Вычислим энергию \mathcal{E} , теряемую заряженной частицей на единице пути на возбуждение локальных колебаний. Предполагая, что примесные атомы расположены в кристалле равномерно с плотностью N_c , находим

$$\mathcal{E} = N_c \int_{b_0}^\infty 2\pi b \mathcal{E}_1(b) db = Dv^{-3} K_0 \left(\frac{\omega_0 b_0}{v} \right) K_1 \left(\frac{\omega_1 b_0}{v} \right), \quad (28)$$

$$D = \frac{8 \pi b_0 Z^2 e^2 g^2 \omega_0^2 N_1}{\hbar \mathcal{E}^2(\omega_0)},$$

где b_0 — минимальное значение прицельного параметра. Физическим основанием для производимого при интегрировании по прицельному параметру

усреднения по расстояниям между примесным атомом и траекторией заряженной частицы является процесс многократного рассеяния заряженной частицы на малые углы. Энергия, теряемая заряженной частицей в единицу времени, $W = \mathcal{E}v$. При определении интенсивности инфракрасного излучения на частоте ω_0 из кристалла, в котором N заряженных частиц движутся со скоростью v , учтём, что возбужденное частицей локальное колебание затухает за время $\sim \Gamma^{-1}$, а в эксперименте измеряется усредненная по времени интенсивность, которая равна

$$I = N \mathcal{E}v \frac{\Gamma_r}{\Gamma}. \quad (29)$$

Величина указанных выше эффектов существенно зависит от численного значения $z = b_0 \omega_0 / v$ и быстро убывает при $z \gg 1$, что связано с асимптотическим поведением функций

$$K_{0,1}(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}.$$

Полученные результаты можно использовать и при рассмотрении взаимодействия движущихся зарядов с оптически активными резонансными колебаниями, для которых $\Gamma \ll \omega_0$, поскольку для промежутков времени $\sim \omega_0^{-1}$ резонансное колебание можно приближенно описать как локальное движение оптического типа [2, 3]. В заключение данного раздела остановимся на конкретной причине, из-за которой можно использовать гармоническое приближение при решении нашей задачи. С учётом ангармонизма второй член в ур. (9) принимает вид

$$\frac{2}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' f_0(t') \sin [\omega_0(t-t')] e^{-\Gamma(t-t')}.$$

Как следует из проведенного нами анализа, локальное колебание возбуждается пролетающей частицей значительным образом лишь в том случае, если возбуждающая сила $f_0(t')$ существенно отлична от нуля для величин $|t'| \gtrsim \tau$, а время пролета $\tau \sim \omega_0^{-1}$. Будем рассматривать времена t такие, что $|t| \gtrsim \tau$. Соответственно, $|t - t'| \gtrsim \tau \sim \omega_0^{-1}$. Так как величина затухания $\Gamma \ll \omega_0$, то $\Gamma(t - t') \ll 1$. Поэтому величину $\exp[-\Gamma(t - t')]$ можно заменить единицей для указанных значений t .

4) В случае, когда движущимся зарядом является ион с массой M_j , рассмотрение п. 2, 3 применимо при условии $\frac{M_j v^2}{2} \gg \mathcal{E}_1(b)$. В случае $\varepsilon_0 = \frac{M_j v_0^2}{2} > \mathcal{E}_1(b)$ его можно использовать для приближенного самосогласованного решения задачи, полагая $v = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2M_d}} + \sqrt{\frac{\varepsilon_0 - \mathcal{E}_1(b)}{2M_j}}$. Для электронов указанное неравенство для скоростей $v \sim a \omega_0$ не выполняется.

При облучении твердых тел потоками релятивистских частиц (протонов, нейтронов и т. д.) в кристаллах образуются различного рода радиационные нарушения в результате смещений атомов из их равновесных положений. Если падающая на кристалл частица обладает достаточно высокой энергией, то она может вызвать каскад нарушений, поскольку выбиваемые ею «первичные» атомы могут, в свою очередь, образовать на длине своего пробега несколько «вторичных» смещенных атомов и т. д. [13, 14]. Так по оценке Зейтца [13] нейтрон с энергией 2 Мэв при замедлении до тепловых энергий производит в твердых телах $\sim 10^3$ смещений.

Выбиваемые ионы в результате сильного взаимодействия с атомами кристалла могут потерять часть электронов своих внешних оболочек. В анализе этого процесса, проведенном Н. Бором и Д. Лидхардом [15], учитывались результаты экспериментов Н. Лассена [15]. Измеряя отклонения ионов в магнитном поле, Лассен определял величину их заряда после прохождения через газы и твердые тела. В последнем случае были обнаружены большие флуктуации зарядов ионов относительно среднего заряда, определяемого балансом между процессами потери и захвата электронов. Рассматривая движение ионов в щ. г. к., следует учитывать большую ширину запрещенной зоны, что затрудняет процессы захвата электронов ионами.

Детектирование инфракрасного излучения локальных мод может дать сведения о числе ионов с нерелятивистскими скоростями, имеющихся в кристалле в результате каскадного процесса, и величинах их зарядов.

Предположим, что на щ. г. к. падает стационарный по времени поток релятивистских частиц и вследствие каскадного процесса в кристалле имеется N_j ионов, обладающих зарядом $Z_j e$, и $f_j(\mathbf{v})$ — функция распределения этих ионов по скоростям, $\int f(\mathbf{v}) d^3 v = 1$. В этом случае интенсивность инфракрасного излучения на частоте ω_0 есть

$$I = \Gamma_r \Gamma^{-1} \sum_j N_j \int f_j(\mathbf{v}) \mathcal{E}_j(\mathbf{v}) d^3 v, \quad (30)$$

а $\mathcal{E}_j(\mathbf{v})$ дается ф. (28) при замене $Z \rightarrow Z_j$. В качестве минимального прицельного расстояния b_0 можно выбрать сумму радиусов примесного и пролетающего ионов. Сделаем следующее замечание относительно такого выбора. В классической теории рассеяния имеется однозначное соответствие между углом рассеяния и значением прицельного параметра [17]. Поэтому, ограничивая интегрирование по прицельному параметру, мы фактически не учитываем процессов рассеяния заряженной частицы на примесном ионе на углы, большие некоторого угла Θ_0 , зависящего от b_0 . Следует иметь в виду, что из-за известной угловой зависимости амплитуды [18, 19] рассеяния и резерфордского сечения рассеяние, обязанное кулоновскому взаимодействию, происходит, в основном, на малые углы. С другой стороны, для рассматри-

ваемых нами энергий движущихся ионов большим углом рассеяния отвечает такая величина переданной примесному иону кинетической энергии, которая может превзойти энергию $E_d \sim 25$ эв, достаточную для его смещение в междузельное положение [13]. Этот процесс следует учитывать при вычислении энергии, теряемой движущимся ионом [13], но он не дает вклад в интенсивность инфракрасного излучения на частоте ω_0 . При рассмотрении рассеяния на большие углы необходимо, наряду с кулоновским взаимодействием, учитывать отталкивательный потенциал взаимодействия между ионами [20], обусловленный перекрытием их электронных оболочек, имеющий малый радиус действия и препятствующий сближению ионов. Тот факт, что при столкновении между ионами, которое сопровождается передачей энергии, большей E_d , в момент наибольшего сближения движущегося и примесного ионов имеет место заметное взаимное проникновение их электронных оболочек [13] и определяет выбор нижнего предела интегрирования по b порядка суммы ионных радиусов.

Оценим величину интенсивности излучения U -центров в кристалле $KCl(N)$. При этом $\omega_0 = 10^{14}$ сек $^{-1}$, $g^2\omega_0\hbar^{-1} \approx 7,5 \cdot 10^4$ см 3 сек $^{-2}$, $b_0 \approx 3 \cdot 10^{-9}$ см. Положим $N_c \approx 10^{19}$ см $^{-3}$, $Z = 3$, $\omega_0\Gamma^{-1} = 10^2$.

Для скоростей v от $1,5 \cdot 10^6$ до $3 \cdot 10^6$ см/сек, которым соответствуют кинетические энергии ионов K 45 и 180 эв, интенсивность $I \sim N(v)10^{-18}$ вт, где $N(v)$ — число ионов в указанном интервале скоростей.

Предположим, что производится бомбардировка кристалла нейтронами, при которой используется нейтронный генератор, преобразующий пучок ускоренных дейтронов в нейтроны посредством реакции типа $Be^9(d, n)B^{10}$ [14]. Этот метод обеспечивает поток нейтронов j до 10^{11} см $^{-2}$ сек $^{-1}$ и обладает тем преимуществом, что энергии нейтронов сосредоточены в узком интервале. Оценим $N(v)$ по формуле $N(v) \sim jSK\alpha$, где S — поперечное сечение кристалла, K — число ионов, смещенных одним нейтроном, а коэффициент $\alpha = \Delta T/T$. Здесь T — среднее время пробега выбитого иона, ΔT — время, когда скорость иона находится в указанном выше интервале скоростей. Полагая $K \sim 10^3$, $\alpha \sim 10^{-2}$, $S = 10^2$ см 2 , получаем $I \sim 10^{-4}$ вт.

Если на диэлектрик падает лазерный световой пучок, энергия фотонов в котором меньше ширины запрещенной зоны, то при достаточно высокой интенсивности света происходит разрушение кристалла, физический механизм которого детально не известен [21]. После воздействия лазерного импульса в исследуемых образцах имеются полости, свободные от основного вещества кристалла [21—24]. Поэтому можно предположить, что на одной из стадий процесса разрушения в кристалле образуется электронно-ионная плазма, которая «выплескивается» в близлежащие области кристалла. Одной из трудностей экспериментального изучения разрушения является то, что процесс имеет характер «взрыва». Можно ли использовать измерение интенсивности инфракрасного излучения возбужденных ионами локальных колеба-

ний для диагностики плазмы-определения степени ионизации ионов, их распределения по энергии, эффективной температуры плазмы?

Чтобы ответить на этот вопрос, вычислим интенсивность излучения на частоте ω_0 , предполагая, что ионы «внедряются» в область кристалла с концентрацией примесных центров N_c и имеют максвелловское распределение по скоростям, соответствующее температуре T . Тогда интенсивность излучения I_j ионов с зарядом $Z_j e$ и массой M_j и полная интенсивность I равны

$$I_j = R_j \int_0^\infty dv e^{-\lambda_j v^2} K_0 \left(\frac{\omega_0 b_0}{v} \right), \quad I = \sum_j I_j, \quad (31)$$

где $R_j = 4\pi N_j \left(\frac{M_j}{2\pi kT} \right)^{3/2} D \Gamma_r \Gamma^{-1}$, D дается ф. (28), N_j — число ионов данного типа, $\lambda_j = M_j / 2kT$. Интеграл (31) можно вычислить численно для различных температур T .

Чтобы получить оценку для T_j , поступим следующим образом: заменим бесселевы функции их асимптотиками $K_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}$, а v^2 в показателе экспоненты разложим около среднеквадратичной скорости максвелловского распределения $\tilde{v}_j = \sqrt{\frac{3kT}{M_j}}$ и оставим два первых члена этого разложения. Получаем

$$I_j \approx R_j e^{\lambda_j \tilde{v}_j^2} \frac{\pi}{2\omega_0 b_0} \int_0^\infty dv v \exp \left(-2\lambda_j \tilde{v}_j v - \frac{2\omega_0 b_0}{v} \right). \quad (32)$$

Такая оценка правильно учитывает вклад в интенсивность максимума максвелловского распределения и несколько завышает вклад его высокоэнергетического «хвоста». Вычисление (32) дает [5]

$$I_j \approx 2\sqrt{6\pi} \exp \left(\frac{3}{2} \right) D N_j \frac{\Gamma_r}{\Gamma} \tilde{v}_j^{-2} K_2 \left(4 \sqrt{\frac{3\omega_0 b_0}{2\tilde{v}_j}} \right). \quad (33)$$

При определении температуры плазмы T с помощью измерения интенсивности I следует учитывать, что величина (33) резко уменьшается с ростом отношения $\omega_0 b_0 / \tilde{v}_j$. Мы провели оценки интенсивности для кристалла KCl(H), полагая объем полости $\sim 10^{-8}$ см³, чему соответствует полное число ионов $N \sim 10^{14}$, $\omega_0 \Gamma^{-1} = 5$, $N_c = 10^{20}$ см⁻³, $Z = 1$. Численные значения других величин указаны выше в этом разделе. Для температур T , равных $2 \cdot 10^4$, $2,5 \cdot 10^9$, градусов К мы получили соответственно $I \sim 2,4 \cdot 10^{-9}$; 10^{-6} ; $2,3 \cdot 10^{-6}$ вт.

Следует иметь в виду возможность сравнения результатов измерений, проведенных на образцах, содержащих разные примеси (при одинаковом

кристалле — матрице), чему соответствуют различные частоты ω_0 . В частности, в кристаллах с U -центрами водород может быть заменен дейтерием. Инфракрасное излучение основной решетки может быть эффективно отфильтровано, если использовать фильтры из порошков того же кристалла без примесей [25].

5) Известно [26], что краевые дислокации в щ. г. к. при своем движении переносят электрический заряд, а взаимодействие заряженных ступенек дислокаций с дефектами весьма существенно для механических свойств ионных кристаллов [27]. В работе [28] экспериментально выявлено значительное влияние заряженных ступенек на электронную подсистему дефекта (F — центра).

Используя полученные нами результаты, можно оценить степень возбуждения локальных оптических колебаний заряженными ступеньками быстро движущихся дислокаций, а также соответствующие этому взаимодействию силу торможения дислокации и интенсивность инфракрасного излучения.

Считается [29, 30], что элементарные ступеньки на краевой дислокации в щ. г. к. имеют эффективный заряд $\pm e/2$. Пусть краевая дислокация единичной длины имеет n_j заряженных ступенек и движется со скоростью v в своей плоскости скольжения. Энергия, теряемая ею на единице пути на возбуждение локальных оптических колебаний, совпадает с соответствующей силой торможения F и равна $F = \mathcal{E} n_j$ (\mathcal{E} дается ф. (28) с $b_0 = a$). Она сильно зависит от скорости дислокации и имеет резкий максимум при $\omega_0 a/v \sim 1$.

Если плотность дислокаций, движущихся со скоростью v есть N_d , то энергия, теряемая ими в единицу времени в объеме V , и соответствующая интенсивность инфракрасного излучения равны

$$\mathcal{E}_d = n_j v \mathcal{E} N_d V, \quad I = \mathcal{E}_d \frac{\Gamma_e}{\Gamma}, \quad (34)$$

Оценим силу F в кристалле $KBr(Li)$, где частота квазилокального колебания $\omega_0 = 4 \cdot 10^{12}$ сек $^{-1}$ [3], для следующих значений величин: $n_j = 4 \cdot 10^6$ см $^{-1}$ [28], $N_d = 10^8$ см $^{-2}$, $N_c = 10^{20}$ см $^{-3}$, $v = 6 \cdot 10^4$ см/сек. Получаем $F \sim 2,8$ дн/см и соответствующее ему напряжение сдвига $\sigma = Fb^{-1} \sim 560$ гмм $^{-2}$, b — длина вектора Бюргера. Для сравнения отметим, что используя формулу для силы торможения дислокации $F = Bv$, где определенный из эксперимента коэффициент торможения $B \approx 2 \cdot 10^{-3}$ дн сек. см $^{-2}$ для кристалла KBr [29], мы получим при $v = 6 \cdot 10^4$ см/сек. величину $F \sim 120$ дн/см.

Для указанных выше значений величин и $\omega_0 \Gamma \approx 30$ [3] интенсивность $I \sim (2 \cdot 10^{-7})$ Вт/см $^3 \cdot V$. Поскольку причиной этого излучения является взаимодействие заряженной ступеньки с отдельными примесными центрами на расстояниях порядка нескольких постоянных решетки, то его детектиро-

вание позволило бы подтвердить концепцию заряда, связанного со ступенькой, в «микромасштабе» при скоростях дислокаций, близких к предельным.

Для высокочастотных локальных колебаний с $\omega_0 \sim 10^{14}$ сек⁻¹ (например, *U*-центр) величины *F*, *I* малы из-за ограниченности скорости краевых дислокаций скоростью поперечных звуковых волн в кристаллах.

В заключение укажем на возможность безызлучательных электронных переходов в примесных центрах, связанную с возбуждением локальных колебаний, а также на возможность выхода примесного иона в междоузлие. Оба эти процесса приводят к разрушению примесного центра. Возбуждение локальных колебаний может быть зафиксировано также, если одновременно измерять сечение неупругого рассеяния нейтронов на локальных колебаниях. Это сечение пропорционально среднему числу квантов \bar{n} для процесса поглощения и $\bar{n} + 1$ для процесса испускания фонона.

*

Авторы благодарны Л. М. Беляеву, В. В. Набатову, Н. М. Плакиде, И. Тарьяну и Г. Турчани за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ, 12, 156, 1942.
2. А. Марадунин, Solid State Physics, 18, 273, 1966; 19, 1, 1967.
3. M. V. KLEIN, in "Physics of Colour Centers", ed W. B. Fowler, Academic Press, New York—London, 1968, p. 430.
4. С. ВЕНЕДЕК, в книге «Физика примесных центров в кристаллах», г. Таллин, 1972, стр. 181.
5. Г. Бейтмен и А. Эрдейи, Таблицы интегральных преобразований, т. 1, изд-во «Наука», 1969.
6. С. КИТТЕЛ, Quantum Theory of Solids, John Wiley and Sons Inc., New York—London, 1963.
7. J. M. ZIMAN, Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, 1972.
8. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Теория поля, Физматгиз, 1960.
9. В. М. Агранович, В. Л. Гинзбург, Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов, изд-во «Наука», 1965.
10. E. M. HENLEY and W. THIRRING, Elementary Quantum Field Theory, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York—London, 1962.
11. R. J. СЛАУВЕР, Phys. Rev., 131, 2766, 1963.
12. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Электродинамика сплошных сред, § 69, Гостехиздат, 1957.
13. F. SEITZ, Discuss. Farad. Soc., 5, 271, 1949.
14. M. W. THOMPSON, Defects and Radiation Damage in Metals, Cambridge University Press, 1969.
15. N. ВОНН, J. LINHARD, Dan. Math.-Fys. Medd., 28, 3, 1954.
16. N. O. LASSEN, Phys. Rev., 79, 1016, 1950.
17. J. O. HIRSCHFELDER, CH. F. CURTISS, R. B. BIRD, Molecular Theory of Gases and Liquids, John Wiley and Sons, Inc., New York, Chapman and Hall, Lim., London, 1954.
18. S. S. SCHWEBER, An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, Row, Peterson and Co., New York, 1961.
19. Л. Д. Соловьев, Ю. Я. Юшин, ЖЭТФ, 45, 1202, 1963.
20. M. BORN, HUANG KUN, Dynamical Theory of Crystal Lattices, Oxford University Press, 1954.

21. Действие лазерного излучения, Изд-во «Мир», М., 1968.
22. S. R. GIULIANI, *Appl. Phys. Lett.*, **5**, 137, 1964.
23. Л. М. Беляев, В. В. Набатов, Ю. В. Писаревский, Ю. В. Шалдин, *Кристаллография*, **10**, 767, 1965.
24. Л. М. Беляев, А. Н. Головистиков, В. В. Набатов, *ФТТ*, **10**, 3733, 1968.
25. Длинноволновая инфракрасная спектроскопия, изд-во «Мир», М., 1966.
26. А. А. Урусовская, *УФН*, **96**, 39, 1968.
27. J. D. ESNELBY, C. W. NEWLY, P. L. PRATT, A. B. LIDIARD, *Phil. Mag.*, **3**, 75, 1958.
28. G. TURCHÁNYI, J. JANSZKY, M. MÁTRAI, I. TARJÁN, *Phys. Stat. Sol.*, **38**, K 35, 1970.
29. F. SEITZ, *Phys. Rev.*, **80**, 239, 1950.
30. J. P. HIRTH, J. LOTHE, *Theory of Dislocations*, Academic Press, New York, 1968.
31. R. STRUMANE, R. DE VALLIST, *Phys. Stat. Sol.*, **3**, 1387, 1963.
32. В. Б. Парийский, А. И. Третьяк, *ФТТ*, **9**, 2457, 1967.