

P14-2007-188

А. С. Батури^{*}, В. Н. Горелкин^{*}, Т. Н. Мамедов,
В. Р. Соловьев^{*}, И. В. Черноусов^{*}

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ
МЮОНОМ АКЦЕПТОРНОГО ЦЕНТРА В АЛМАЗЕ
И ПОВЕДЕНИЕ ЕГО ПОЛЯРИЗАЦИИ

^{*}Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

Батурин А. С. и др.

P14-2007-188

Особенности формирования отрицательным мюоном акцепторного центра в алмазе и поведение его поляризации

Дается объяснение принципиального отличия формирования отрицательным мюоном акцепторного центра (АЦ) в алмазе от аналогичных процессов в кристалле кремния. Показано, что в алмазе формирование мюоном примесного центра μB^- происходит за времена, превышающие 10^{-9} с, что много медленнее, чем в кремнии, поскольку в алмазе маловероятен процесс захвата электрона из валентной зоны за счет оже-эффекта. Затухания поляризации мюона в алмазе при температурах выше 40 К объясняются захватом дырки на ионизованный акцепторный центр μB^- . Рассчитанная плотность носителей вблизи ионизованного АЦ резко и немонотонно зависит от концентрации примеси на временах меньше 10^{-13} с. Эта зависимость существенно влияет на динамику изменения состояния АЦ и поведение поляризации спина мюона, измеряемой на временах порядка 10^{-7} с.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем им. В. П. Дзелепова ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2007

Baturin A. S. et al.

P14-2007-188

Features of Acceptor Center Formation by Negative Muon and Behavior of the Muon Polarization in Diamond

An explanation is given to dramatic distinctions between the acceptor center (AC) formation by negative muon in diamond and in silicon. It is shown that in diamond the impurity center μB^- formation by muon occurs not so fast as in silicon and takes more than 10^{-9} s, because in contrast to silicon the probability of electron capture from valence band due to Auger effect is negligible. The damping of the muon spin polarization in diamond at temperatures higher than 40 K is explained by hole capture on ionized acceptor center μB^- . The calculated charge-carriers density near the ionized AC dramatically and non-monotonically depends on the impurity concentration for time less than 10^{-13} s. This dependence notably affects the dynamics of the AC state and behavior of the muon spin polarization at times $\sim 10^{-7}$ s.

The investigation has been performed at the Dzhelpev Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2007

ВВЕДЕНИЕ

Отрицательные мюоны оказались весьма полезными для исследования свойств акцепторных примесей в кремнии. Впервые μ SR-методом удалось измерить константу сверхтонкого взаимодействия в акцепторном центре (АЦ) [1–5], которую невозможно измерить методами магнитного резонанса из-за большой скорости релаксации электронного момента АЦ. Было выяснено [1–5], что в результате захвата отрицательного мюона атомом Si в кремний за время меньше чем 10^{-10} с образуется нейтральный акцепторный центр μ Al, в котором легко наблюдать температурные зависимости парамагнитного сдвига частоты и скорости затухания амплитуды прецессии спина мюона. По этим зависимостям можно восстанавливать характерные времена кинетических процессов в твердотельной плазме, образованной мюоном в конце своего трека торможения [6]. В частности, можно получить зависимость константы скорости захвата носителей на уединенный АЦ от концентрации носителей.

В связи с интересом к использованию алмаза в качестве материала для полупроводниковой электроники в последнее время проводятся μ SR-исследования на образцах искусственного алмаза. В алмазе мюонный атом, образующийся при захвате отрицательного мюона углеродом, имитирует примесь бора (В), которая чаще всего используется для легирования алмаза. Первые μ SR-эксперименты показали, что в отличие от кремния в алмазе за время 10^{-10} с нейтральный АЦ не образуется, о чем свидетельствует отсутствие парамагнитного сдвига частоты прецессии спина мюона [7]. Этот факт может интерпретироваться либо как медленное образование отрицательного центра μ V⁻, либо как медленный захват дырки на ионизованный АЦ. Последнее может быть связано с проявлением в алмазе эффекта отрицательной подвижности [8, 9].

Для выяснения причины, почему в алмазе АЦ долго остается ионизованным, тогда как в кремнии он быстро становится нейтральным, в данной публикации рассмотрена динамика образования АЦ на базе мюонного атома, образующегося при захвате отрицательного мюона атомом углерода в кристалле алмаза. Процесс формирования АЦ разбивается на два основных этапа. Первый связан с быстрыми процессами формирования в кристалле нейтрального или однократно заряженного АЦ, которые протекают на временах меньше 10^{-9} с, второй — с процессами изменения состояния АЦ из-за

его взаимодействия с окружающей его почти термализованной твердотельной плазмой на временах больше 10^{-9} с.

Первый раздел посвящен качественной оценке величин констант скорости образования — основы «будущего акцепторного центра». К сожалению, авторам не известны экспериментальные или расчетные данные по скорости этого процесса, поэтому представленные в статье результаты будут базироваться на полученной качественной оценке. Далее, в соответствии с хронологией протекания процессов, в разделах 2 и 3 обсуждается процесс формирования электронно-дырочного облака в области локализации «ядра» АЦ, а в разделе 4 — его пространственно-временная релаксация на временах больше 10^{-9} с. В том же разделе обсуждается поведение непосредственно измеряемой в μ SR-эксперименте поляризации спина мюона.

1. ОЦЕНКА СКОРОСТИ ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ АЦ

Наиболее медленным процессом первого этапа является заключительная стадия нейтрализации многозарядного иона, получившегося при захвате мюона атомом углерода. А именно, захват электрона нейтральным мюонным атомом μ B с превращением последнего в кулоновский АЦ — μ B⁻. Захват электрона на нейтральный центр может происходить радиационно, с высвечиванием кванта излучения, и нерadiационным способом — с передачей энергии оже-электрону.

Радиационный захват сходен с фотоприлипанием электрона к атому. Захват электрона на μ B с передачей энергии электрону из зоны проводимости аналогичен сверхупругому столкновению электрона с возбужденным атомом, а захват с передачей энергии электрону из валентной зоны — оже-эффекту с внутренних атомных оболочек. В кристалле последний процесс возможен, если уровень μ B⁻ лежит в валентной зоне на глубине, превосходящей ширину запрещенной зоны. По-видимому, в алмазе этот механизм не реализуется, поскольку энергия сродства к электрону ни для одного из атомов или молекул не превосходит 4 эВ, а ширина запрещенной зоны алмаза 5,4 эВ. В кремнии, однако, такие захваты возможны, поскольку ширина его запрещенной зоны равна 1,2 эВ.

Скорость захвата электрона на нейтральный μ B можно грубо оценить из газокинетической модели подобно тому, как это делается в [10]. В данном случае оценка константы трехчастичной реакции $K_3 \sim \langle v\sigma \rangle b^3$ (где $\langle v\sigma \rangle \approx \langle v \rangle b^2$ — частота столкновения двух частиц, а b^3 — эффективный объем, в котором может произойти реакция) лежит в интервале 10^{-32} – 10^{-30} см⁶/с, поскольку в данной оценке должны фигурировать атомные размеры и атомные скорости. Размер области b , который иногда называют радиусом Томсона,

в данном случае определяется энергией I_{att} , которой должны обмениваться частицы при захвате электрона $b \sim e^2/(\kappa I_{\text{att}})$, где κ — диэлектрическая проницаемость алмаза.

Поскольку в алмазе процесс захвата электрона на нейтральный $\mu\text{В}$ с участием двух электронов из валентной зоны энергетически запрещен, рассмотрим захват электрона на нейтральный $\mu\text{В}$ с передачей энергии электрону проводимости. Поскольку концентрация электронов в валентной зоне $n_{e-v} = 7 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ величина постоянная, скорость оже-процесса на электронах проводимости $K_3 n_{e-v} n$ зависит от времени через концентрацию электронов n в зоне проводимости. Поэтому для выяснения роли этого процесса в формировании $\mu\text{В}^-$ необходимо знать временное поведение плотности носителей на сравнительно малых временах $10^{-16} - 10^{-11} \text{ с}$. Этому вопросу посвящен следующий раздел статьи.

Очень грубую оценку скорости формирования $\mu\text{В}^-$ за счет радиационного перехода можно провести по сечению фотоприлипания электрона валентной зоны к нейтральному атому с незаполненной оболочкой. Наиболее подходящим аналогом для этого процесса в алмазе является, по-видимому, фотоприлипание к атому фтора, поскольку у фтора для полного заполнения внешней электронной оболочки не хватает одного электрона. У примеси бора в решетке алмаза также одна ненасыщенная связь. Экспериментальная зависимость [11] сечения фотоприлипания от скорости электрона хорошо аппроксимируется формулой

$$\sigma_{\text{ph}}(v) = \frac{5,5 \cdot 10^{-16} \frac{\text{см}^3}{\text{с}}}{v \frac{\text{см}}{\text{с}}}. \quad (1)$$

Отсюда следует, что скорость образования $\mu\text{В}^-$ оказывается постоянной $\nu_{\text{ph}} = n_{e-v} \sigma_{\text{ph}} v = 3,8 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ и не зависит ни от температуры, ни от концентрации примесей, что вполне согласуется с экспериментальными результатами [7, 12, 13] для алмаза.

2. ПРОЦЕССЫ В ОКРЕСТНОСТИ $\mu\text{В}$ -АКЦЕПТОРА НА МАСШТАБЕ ВРЕМЕН МНОГО МЕНЬШЕ 10^{-9} с

2.1. Ионизация среды оже-электронами. После захвата атомом углерода мюон в результате каскадных радиационных и оже-переходов попадает на нижнюю орбиту. При этом максимальная энергия, которая может выделиться при переходах отрицательного мюона из непрерывного спектра в $1s$ -состояние мезоатома, равна $\varepsilon_{\text{max}} \approx 100 \text{ кэВ}$. Большая ее часть приходится на радиационные переходы. Существующие экспериментальные дан-

ные позволяют допустить, что совокупная кинетическая энергия каскадных оже-электронов составляет примерно 6 кэВ [14–16].

При ионизации атома решетки оже-электрон теряет приблизительно энергию $E_g + \bar{\varepsilon}_s$, где $E_g = 5,4$ эВ — ширина запрещенной зоны в алмазе и $\bar{\varepsilon}_s$ — средняя кинетическая энергия вторичных электронов, примерно равная 20 эВ. В результате ионизации атомов решетки вокруг образовавшейся «примеси», представляющей собой ионизованный мюонный атом бора $\mu\text{В}$, вылетевшие оже-электроны породят $N_0 \sim 6 \text{ кэВ} / (E_g + \bar{\varepsilon}_s) \sim 2 \cdot 10^2$ вторичных электронов и дырок. Более точной оценке числа рожденных вторичных электронов и их пространственного распределения посвящен материал данного раздела.

Для оценки размеров области, где произошли акты ионизации решетки алмаза, воспользуемся табличными данными [17] по сечениям ионизации углерода и предположим для простоты, что имеется только один исходный оже-электрон, который теряет энергию только на ионизацию среды. В области интересующих нас энергий для качественных оценок вполне применима модель Томсона [10], согласно которой средняя энергия вторичных электронов равна

$$\bar{\varepsilon}_s(J, \varepsilon) = J \ln \frac{J + \varepsilon}{J} + \frac{J^2}{J + \varepsilon} - J, \quad (2)$$

где J — потенциал ионизации, ε — энергия налетающего электрона. Сечение ионизации обычно аппроксимируется общепринятой полуэмпирической формулой [10]

$$\sigma_i(\varepsilon) = \frac{\pi e^4}{J} f\left(\frac{\varepsilon}{J}\right), \quad f(x) = \frac{10(x-1)}{(x+0,5)(x+8)}, \quad (3)$$

где e — заряд электрона.

Для грубой оценки потенциал ионизации J можно взять равным ширине запрещенной зоны $E_g = 5,4$ эВ. При этом средняя энергия рожденного электрона $\bar{\varepsilon}_s(E_g, \varepsilon) \approx 20$ эВ $\gg E_g$ (при $\varepsilon = 1$ кэВ), то есть электрон находится в состоянии, слабо искаженном кристаллическими полями. Вполне вероятно, что по этой причине более подходящей величиной для J будет энергия ионизации отдельного атома, которая более чем в два раза превышает E_g , при этом и средняя энергия выброшенного вторичного электрона возрастет примерно во столько же раз.

Из полученной характерной величины энергии вторичного электрона следует, что на этапе рождения электронно-дырочных пар, когда энергия электронов заведомо превышает температуру среды и порцию энергии, передаваемую среде в каждом акте ионизации, применимо приближение непрерывных

потерь. Время торможения при этом равно

$$t(\varepsilon_f, \varepsilon_i) = \int_{\varepsilon_f}^{\varepsilon_i} d\varepsilon' / g(\varepsilon'),$$

где $g(\varepsilon)$ — скорость потери энергии электроном, которая для каждого отдельно взятого процесса ионизации определяется выражением

$$g(\varepsilon) = (\bar{\varepsilon}_S(\varepsilon) + J) \nu_i(\varepsilon), \quad \nu_i(\varepsilon) = \sigma_i(\varepsilon) n \sqrt{2\varepsilon/m_e}, \quad (4)$$

где масса m_e близка к массе свободного электрона.

Время торможения и длина пробега электрона L при потере энергии от величины ε_i до ε_f определяются выражениями

$$t_f - t_i = t(\varepsilon_f, \varepsilon_i) = \int_{\varepsilon_f}^{\varepsilon_i} \frac{1}{g(\varepsilon')} d\varepsilon', \quad L(\varepsilon_f, \varepsilon_i) = \int_{\varepsilon_f}^{\varepsilon_i} \frac{\sqrt{2\varepsilon'}}{g(\varepsilon') \sqrt{m_e}} d\varepsilon'. \quad (5)$$

Для качественного понимания поведения оже-электронов в процессе их торможения до $\varepsilon \sim 1$ эВ на рис. 1 приведены зависимости характерных скоростей процессов, определяющих торможение электрона. Кривая 1 представляет эффективную частоту релаксации направления импульса электрона $\nu_{\text{eff}}(\varepsilon)$, которая равна транспортной частоте рассеяния на отдельных атомах в области высоких энергий и частоте рассеяния на фононах в области малых энергий [8, 9, 18]. Рассчитанная с сечением (6) частота рождения электронно-дырочных пар (частота ионизации атомов решетки) для $J = 5,4$ эВ представлена кривой 3. И, наконец, кривая 2 описывает итоговую скорость потерь энергии $g(\varepsilon)/\varepsilon$, учитывающую ионизацию атомов решетки ($J = 5,4$ эВ), ионизацию примеси ($J = 0,37$ эВ) плотности $n_{\text{imp}} = 10^{17}$ см $^{-3}$ и рассеяние на фононах.

Поскольку при энергии электрона больше ширины запрещенной зоны $\varepsilon > E_g$ частота потерь энергии больше частоты релаксации импульса, электрон движется почти прямолинейно в этой области энергий. При энергиях, меньших 5 эВ, скорость потери энергии примерно на порядок меньше скорости релаксации направления импульса, и движение в координатном пространстве приобретает диффузионный характер. Характерные длины процессов легко пересчитываются по частотам. Как мы увидим, для большинства оже-электронов диффузионное смещение при энергии около 5 эВ оказывается больше, чем пройденный линейный путь. По этой причине процессы в переходной области энергий от прямолинейного движения к диффузионному оказываются существенными для формирования пространственной функции распределения электронов около АЦ. Проанализируем подробнее первый этап торможения оже-электронов.

Непосредственно после вылета оже-электрона, образовавшегося при переходе мюона из состояния водородоподобного атома с главным квантовым числом k , его энергия в большинстве случаев равна

$$\varepsilon(k) \approx 100 \text{ кэВ} \cdot \left[\frac{1}{(k-1)^2} - \frac{1}{k^2} \right], \quad (6)$$

поскольку наиболее вероятны переходы с изменением k на 1 [16, 20, 21]. При $k \leq 33$ энергия оже-электрона становится больше ширины запрещенной зоны, и он теряет свою энергию, в основном, на ионизацию и образование электронно-дырочных пар. Согласно формулам (5) оже-электроны с начальной энергией $\varepsilon(k)$ тормозятся до энергии E_g за время $t_{ip}(k) = t(E_g, \varepsilon(k))$ и проходят линейный путь $L_{ion}(k) = L(E_g, \varepsilon(k))$. Результаты оценок по этим формулам со скоростью потерь энергии, изображенной на рис. 1, представлены на рис. 2 и 3. Время ионизации оказалось значительно меньше, чем время прямолинейного движения, особенно для вторичных электронов. Расчет для вторичных электронов производился по тем же формулам (5) с начальной энергией $\bar{\varepsilon}_S(J, \varepsilon(k))$.

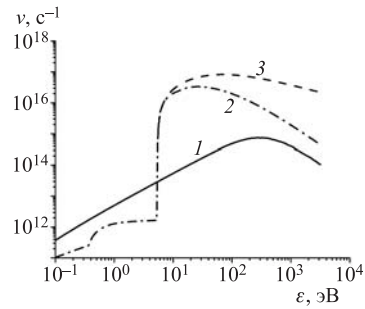


Рис. 1. Зависимость характерных частот процессов от энергии электронов: 1 — эффективная скорость релаксации направления импульса электрона $\nu_{\text{eff}}(\varepsilon)$; 2 — суммарная скорость потери энергии $g(\varepsilon)/\varepsilon$; 3 — частота ионизации атомов решетки для $J = 5, 4$ эВ

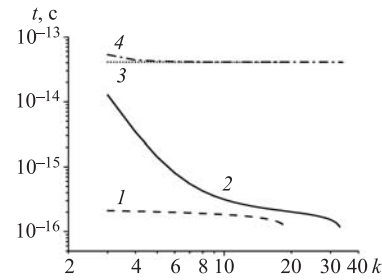


Рис. 2. Время ионизации оже-электроном (кривая 2) и рожденным им вторичным электроном (кривая 1) в зависимости от главного квантового числа k -уровня, задающего энергию оже-электрона; кривые 3, 4 соответствуют времени прямолинейного движения этих электронов

Согласно данным, представленным на рис. 3, линейный пробег оже-электронов, начальная энергия которых соответствует $k \geq 5$, значительно больше размера области ионизации, поэтому в процессе разлета по прямой они удаляются от области ионизации, и в центре около АЦ их концентрация быстро,

за времена, меньшие $t_0 = 4,8 \cdot 10^{-14}$ с, падает. При этом линейный пробег оже-электронов примерно равен эффективной длине свободного пробега $\lambda_{\text{eff}} = v/\nu_{\text{eff}} (5,4 \text{ эВ}) \approx 3 \cdot 10^{-6}$ см, которая значительно больше пути ионизации. На этом пути, тем не менее, электроны потеряют примерно 0,4 эВ, что видно из соотношения между $\nu_{\text{eff}} (5,4 \text{ эВ})$ и $g (5,4 \text{ эВ})$ на рис. 1.

Для более детальной физической картины необходимо оценить распределение электронов вдоль прямолинейного трека. Средняя энергия вторичных электронов не превосходит $\bar{\varepsilon}_s(\varepsilon(k=3)) < 10^2$ эВ, поэтому они быстро тормозятся и не уходят далеко от основного трека. Их число вдоль трека можно оценить, считая, что основные потери приходятся на ионизацию. Тогда для каждого каскадного перехода имеем

$$N_i(k) \approx \int_{E_g}^{\varepsilon(k)} \frac{\bar{\varepsilon}_s(\varepsilon') \cdot \nu_i(\varepsilon', J) + \bar{\varepsilon}_s(\varepsilon') \cdot \nu_i(\varepsilon', E_g)}{E_g \cdot g(\varepsilon', T)} d\varepsilon'. \quad (7)$$

Сделанная численная оценка $\sum_k N_i(k) \approx 3,7 \cdot 10^3$ представляется разумной, поскольку согласуется с оценкой по «цене» ионизации $\sum_k \varepsilon(k)/E_g \approx 4,7 \cdot 10^3$.

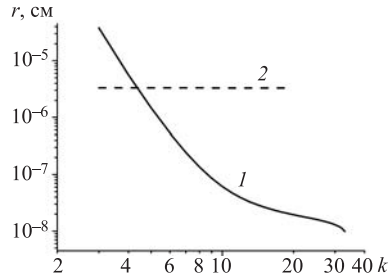


Рис. 3. Линейный пробег оже-электрона (1) и рожденных им вторичных электронов (2) в зависимости от k (см. рис. 2)

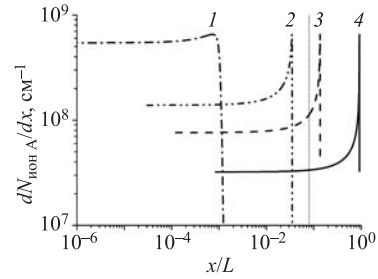


Рис. 4. Распределение по пространству линейной плотности ионизаций, произведенной оже-электронами различной энергии $\varepsilon(k)$; 1, 2 — $k = 5, \dots, 10, \dots, 33$; 3 — $k = 4$; 4 — $k = 3$. Вертикальная прямая обозначает положение $x = r_0$; x/L — безразмерное расстояние от АЦ (см. текст)

На рис. 4 представлено рассчитанное по формуле (7) распределение по пространству линейной плотности ионизаций, произведенной оже-электронами различной начальной энергии $\varepsilon(k)$. К моменту $t_0 = 4,8 \cdot 10^{-14}$ с значительная часть рожденных электронов находится вблизи поверхности радиуса

$r_0 \approx \lambda_{\text{эф}} \approx 3,3 \cdot 10^{-6}$ см, поскольку, как видно из рис. 2, время образования вторичных электронов пренебрежимо мало по отношению ко времени прямолинейного разлета оже-электрона, а длина этого разлета у всех электронов приблизительно одинакова. Вклад оже-электронов, рожденных вследствие переходов мюона с уровней $k = 3$ и 4 , в число электронов внутри указанной сферы, как видно из рис. 4, мал, поскольку основная область ионизаций лежит вне сферы радиуса $r_0 < (0,14 - 1)L$, где $L = 4,14 \cdot 10^{-5}$ см — максимальное удаление самого быстрого оже-электрона.

Таким образом, к моменту времени $t_0 = 4,8 \cdot 10^{-14}$ с, когда движение электронов (дырок) приобретает диффузионный характер, внутри сферы радиуса $r_0 = 3,3 \cdot 10^{-6}$ см содержится $N = \sum_{k \geq 5} N_i(k) \approx 800$ частиц. Для простоты расчета будем считать, что частицы распределены в бесконечно тонком сферическом слое радиуса r_0 с примерно одинаковой энергией $\varepsilon_0 \approx 5$ эВ. Такое распределение будет браться в качестве начального для следующего диффузионного этапа кинетических процессов около АЦ.

2.2. Диффузионное движение горячих электронов ($4,8 \times 10^{-14} < t < 10^{-10}$ с). Диффузионное движение электронов начинается с момента времени $t_0 \approx 4,8 \cdot 10^{-14}$ с, когда их энергия становится $\varepsilon < \varepsilon_0 \approx 5$ эВ. Значения времени t_0 и энергии ε_0 будут считаться начальными в представленном в данном разделе рассмотрении. Величина

$$\tau(\varepsilon(t), \varepsilon_0) = \int_{\varepsilon(t)}^{\varepsilon_0} \frac{D_r(\varepsilon')}{g(\varepsilon')} d\varepsilon' \quad (8)$$

пропорциональна среднему квадрату смещения частицы к моменту времени t — $\langle r^2(t) \rangle = 6\tau(t)$ — и называется, согласно терминологии Э. Ферми [22], «возрастом» частицы, отсчитанным от момента времени $t_0 \approx 4,8 \cdot 10^{-14}$ с, когда энергия частицы была равна ε_0 . Здесь $D_r(\varepsilon)$ — пространственный коэффициент диффузии электронов.

Приближение непрерывных потерь еще применимо в алмазе до энергий ε порядка 0,1 эВ. В этом приближении уравнение для функции распределения в координатно-энергетическом пространстве

$$\frac{\partial f(\varepsilon, \vec{r}, t)}{\partial t} - \frac{\partial (g(\varepsilon) f(\varepsilon, \vec{r}, t))}{\partial \varepsilon} - D_r(\varepsilon) \Delta_{\vec{r}} f(\varepsilon, \vec{r}, t) = q(\varepsilon, \vec{r}, t) \quad (9)$$

преобразуется к уравнению диффузии, в котором «возраст» частицы τ играет роль «времени». Для выполнения этого преобразования в уравнении (9) переходят к новым переменным τ , ε_0 и к новой функции $\phi(\vec{r}, \tau, \varepsilon_0)$, которые

связаны со старыми соотношениями

$$t = \int_{\varepsilon}^{\varepsilon_0(\varepsilon, t)} \frac{1}{g(\varepsilon')} d\varepsilon', \quad \tau(\varepsilon, t) = \int_{\varepsilon}^{\varepsilon_0(\varepsilon, t)} \frac{D_r(\varepsilon')}{g(\varepsilon')} d\varepsilon', \quad fg = \phi. \quad (10)$$

Монотонность в зависимостях (10) обеспечивает возможность построения, хотя бы численно, функций $\varepsilon(\tau, \varepsilon_0)$ и $t(\tau, \varepsilon_0)$, определяемых соотношениями (10) и

$$t^{\tau, \varepsilon_0}(\tau, \varepsilon_0) = \int_{\varepsilon^{\tau, \varepsilon_0}(\tau, \varepsilon_0)}^{\varepsilon_0} \frac{1}{g(\varepsilon')} d\varepsilon'. \quad (11)$$

Физический смысл величины $\varepsilon^{\tau, \varepsilon_0}(\tau, \varepsilon_0)$ — это энергия частицы, ушедшей от начальной точки, где ε_0 — ее энергия, на расстояние $\beta\tau$ и набравшей «возраст» τ , а $t^{\tau, \varepsilon_0}(\tau, \varepsilon_0)$ — время, за которое это произойдет.

С помощью переменных τ, ε_0 уравнение (9) для функции $f(\varepsilon, \vec{r}, t)$ преобразуется в уравнение для функции $\phi(\vec{r}, \tau, \varepsilon_0)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(\vec{r}, \tau, \varepsilon_0)}{\partial \tau} &= \Delta \phi(\vec{r}, \tau, \varepsilon_0) + \tilde{q}(\vec{r}, \tau, \varepsilon_0), \\ \tilde{q}(\vec{r}, \tau, \varepsilon_0) &= \frac{g(\varepsilon_{\tau, \varepsilon_0}(\tau, \varepsilon_0)) \cdot q(\varepsilon_{\tau, \varepsilon_0}(\tau, \varepsilon_0), t_{\tau, \varepsilon_0}(\tau, \varepsilon_0), \vec{r})}{D_r(\varepsilon_{\tau, \varepsilon_0}(\tau, \varepsilon_0))}. \end{aligned} \quad (12)$$

Общее решение этого уравнения такое же, как у стандартного уравнения теплопроводности или диффузии с известными источниками $\tilde{q}(\vec{r}, \tau, \varepsilon_0)$ и начальной функцией $g(\varepsilon_0) \cdot f(\vec{r}', \varepsilon_0, t = 0)$:

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}, \tau, \varepsilon_0) &= \iiint_V G(\vec{r}, \vec{r}', \tau) \cdot g(\varepsilon_0) \cdot f(\vec{r}', \varepsilon_0, t = 0) d\vec{r}' + \\ &+ \int_0^{\tau} \iiint_V G(\vec{r}, \vec{r}', \tau - \tau') \cdot \tilde{q}(\vec{r}', \tau', \varepsilon_0) d\vec{r}' \cdot d\tau'. \end{aligned} \quad (13)$$

Из уравнений (12) видно, что на этом этапе ε_0 может рассматриваться как свободный независимый параметр, который обеспечивает дельтообразную особенность у функции Грина $G(\vec{r}, \vec{r}', \tau)$ уравнения (13) при $t \rightarrow t_0$, $\tau(\varepsilon, \varepsilon_0(\varepsilon, t)) \rightarrow 0$, что обеспечивает выполнение начального условия

$$G(\vec{r}, \vec{r}', \tau) = e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{r}')^2}{2\tau}} / (2\pi\tau)^{\frac{3}{2}}, \quad \tau(\varepsilon, \varepsilon_0(\varepsilon, t)) = \int_{\varepsilon}^{\varepsilon_0(\varepsilon, t)} \frac{D_r(\varepsilon')}{g(\varepsilon')} d\varepsilon'. \quad (14)$$

Можно проверить и непосредственной подстановкой, что

$$f(\varepsilon, \vec{r}, t) = \phi(\varepsilon_0(\varepsilon, t), \vec{r}, \tau(\varepsilon, t)) / g(\varepsilon)$$

удовлетворяет уравнению (9), если $\phi(\varepsilon_0, \vec{r}, \tau)$ удовлетворяет уравнению (9), если $\phi(\varepsilon_0, \vec{r}, \tau)$ удовлетворяет (12). Таким образом, в приближении непрерывных потерь нахождение функции распределения на этапе диффузионного движения сводится к квадратурам.

Отметим также, что для времен, много больших времени термализации, когда заведомо неприменимо приближение непрерывных потерь, уравнение (12) можно, тем не менее, снова использовать, поскольку оно превращается в обычное уравнение диффузии, в котором $\tau \approx Dt$. По энергии распределение, конечно, станет равновесным, определяемым температурой решетки. При необходимости можно непрерывным образом сшить решения, соответствующие двум различным этапам движения частиц в среде.

Учитывая начальное пространственное распределение и дельтообразное распределение по энергии в начальный момент времени в терминах «возраста» частиц, получим выражение для плотности частиц

$$n(r, t) = N \frac{e^{-\frac{(r^2 + r_0^2)}{2\tau(\varepsilon(t), \varepsilon_0)}} \operatorname{sh}\left(\frac{r \cdot r_0}{\tau(\varepsilon(t), \varepsilon_0)}\right)}{r \cdot r_0 \cdot \sqrt{\tau(\varepsilon(t), \varepsilon_0)} (\sqrt{2\pi})^3}, \quad (15)$$

$$n(0, t) = N \frac{e^{-\frac{r_0^2}{2\tau(\varepsilon(t), \varepsilon_0)}}}{(\sqrt{2\pi\tau(\varepsilon(t), \varepsilon_0)})^3}.$$

Это распределение является результатом интегрирования по сфере функции Грина уравнения диффузии (13), в которую оно переходит при $r_0 \rightarrow 0$ или $\tau(\varepsilon(t), \varepsilon_0) \gg r_0^2$.

В дальнейшем потребуются знать плотность электронов на АЦ, которая в данной идеализированной модели в начальный момент времени экспоненциально мала. Реально из-за конечной ширины энергетического спектра, разного времени рождения электронов и отличия только на порядок величины размера области ионизации от той, которую они занимают, тормозясь до энергии $\varepsilon_0 \approx 5$ эВ, эта плотность не столь мала. Однако она заведомо меньше, чем в последующие времена порядка t_0 , когда из-за начавшегося диффузионного характера движения плотность в области размера r_0 станет усредняться.

2.3. Вероятность образования $\mu\text{В}^-$ за счет оже-перехода на электродах зоны проводимости. Результаты расчета по второй формуле (15) представлены на рис. 5. Максимальная плотность носителей на АЦ порядка

10^{18} см^{-3} достигается примерно в момент времени $t_0 + 3 \cdot 10^{-14} \text{ с} \approx 8 \cdot 10^{-14} \text{ с}$, это соответствует тому, что усреднение происходит уже после одного эффективного квазиупругого столкновения электрона с фононом.

Полученная величина плотности электронов позволяет оценить вероятность образования $\mu\text{В}^-$ за счет перехода типа Оже на электронах зоны проводимости. Поскольку их плотность сильно зависит от времени, вероятность можно оценить как

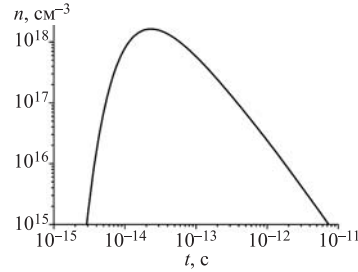


Рис. 5. Зависимость плотности носителей на АЦ от времени

$$w = K_3 n_{e-v} \int_0^{\infty} n_e(t) \cdot dt = 1,5 \cdot (10^{-3} - 10^{-1}), \quad (16)$$

где использована оценка константы трехчастичной реакции K_3 , приведенная в разделе 1. Верхняя граница, вероятно, слишком велика, поскольку сама оценка константы трехчастичной реакции K_3 завышена. Тем не менее, уже из этой оценки следует, что быстрое образование $\mu\text{В}^-$ по этому механизму маловероятно. Необходимо, однако, более строго и последовательно рассчитать время формирования отрицательно заряженной акцепторной примеси, образованной отрицательным мюоном в алмазе за счет радиационного перехода, скорость которого «грубо» оценивалась в разделе 1.

3. ПРОЦЕССЫ В ОКРЕСТНОСТИ $\mu\text{В}$ -АКЦЕПТОРА НА МАСШТАБЕ ВРЕМЕН $10^{-13} - 10^{-10} \text{ с}$

3.1. Ионизация примесей вторичными электронами. Параллельно процессу формирования $\mu\text{В}^-$ вокруг него идет процесс термализации свободных носителей, сопровождающийся ионизацией примеси и взаимодействием с фононами. До энергий порядка температуры для оценок будем использовать формулы (10). Следует, однако, заметить, что квазиупругое приближение рассеяния носителей на фононах применимо только при энергиях выше 10^3 К . Это следует учитывать в количественных расчетах. Кривые, характеризующие энергию и «возраст» частицы как функцию времени, представлены на рис. 6 и 7. На данном временном интервале, начинающемся с 10^{-13} с , как видно из графиков, безразлична предыстория. Все процессы имеют характерные времена больше 10^{-13} с , поэтому все частицы, достигшие энергии $\varepsilon_0 \approx 5 \text{ эВ}$ в какой-то предыдущий момент, ведут себя одинаково.

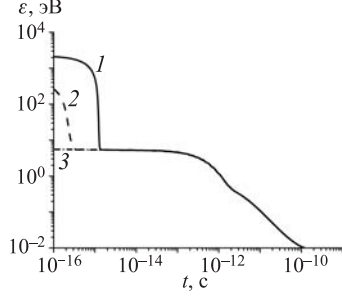


Рис. 6. Зависимость энергии оже-электрона от времени при разных значениях его начальной энергии $\varepsilon(k)$; 1 — $k = 5$; 2 — $k = 8$; 3 — $k = 30$

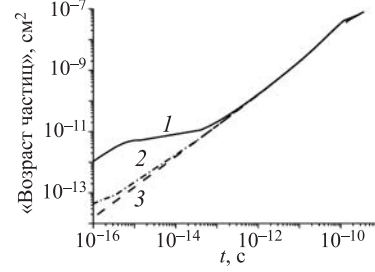


Рис. 7. Временная зависимость «возраста» оже-электронов для разных значений их начальной энергии $\varepsilon(k)$; 1 — $k = 5$; 2 — $k = 8$; 3 — $k = 30$

Вторичный электрон с энергией $\varepsilon_s \sim 10$ эВ ведет себя так же, как и оже-электрон. Любой из них может ионизовать примеси, однако только электроны с энергией больше ширины запрещенной зоны будут эффективно создавать электронно-дырочные пары. При не слишком больших концентрациях примеси ($n_{\text{imp}} \ll \frac{\sigma_i(\varepsilon)n}{\sigma_{i\text{-imp}}(\varepsilon)}$, $\sigma_i, \sigma_{i\text{-imp}}$ — сечения ионизации атомов решетки и примеси соответственно) вклад от их ионизации в число свободных носителей невелик, и полное число носителей каждого знака в окрестности АЦ остается равным N , полученным в предыдущем разделе.

Каждый такой носитель за время dt создаст dN_{imp} ионизированных примесей

$$dN_{i\text{-imp}} = n_{\text{imp}} \sigma_{i\text{-imp}}(\varepsilon) \sqrt{\frac{2\varepsilon'}{m_e}} dt, \quad (17)$$

$$N_{i\text{-imp}}(J_{\text{imp}}, \varepsilon_0) = \int_{J_{\text{imp}}}^{\varepsilon_0} n_{\text{imp}} \frac{\sigma_{i\text{-imp}}(\varepsilon')}{g(\varepsilon')} \sqrt{\frac{2\varepsilon'}{m_e}} d\varepsilon'.$$

Здесь убыль энергии в единицу времени в приближении непрерывных потерь связана с потерями на ионизацию примесей и рождение фононов

$$g(\varepsilon) = g_{\text{imp}}(\varepsilon) + g_{ph}(\varepsilon) \approx n_{\text{imp}} \Delta\varepsilon_s \sigma_{i\text{-imp}}(\varepsilon) \sqrt{2\varepsilon/m_e} + \varepsilon \nu_{\varepsilon-ph}(\varepsilon), \quad (18)$$

где среднюю потерю энергии при ионизации $\Delta\varepsilon_s$ и сечение $\sigma_{i\text{-imp}}(\varepsilon)$ можно оценить по формулам Томсона (2) и (3), а частоту потери энергии за счет излучения фононов $\nu_{\varepsilon-ph}(\varepsilon)$ — по формулам для однофононного процесса,

обсуждавшегося в [8]. Качественное представление о роли обоих механизмов потерь можно получить из рис.8. При энергиях $\varepsilon < 5$ эВ потери идут, в основном, за счет ионизации примеси, если ее концентрация больше $n_{\text{imp}} = 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

Фононный механизм потерь энергии для принятой здесь $T = 50$ К оказывается эффективным только при энергиях меньше потенциала ионизации примеси. При энергиях $\varepsilon > 10$ эВ фононный механизм следует интерпретировать как столкновения носителя с отдельными атомами решетки (газовая модель). На рис.8 кривая для газовой модели построена по сечению рассеяния на атоме неона. Для углерода в решетке это сечение, вероятно, несколько больше. Кроме того, при $\varepsilon \gg T$ в электрон-фононном взаимодействии должна стоять эффективная масса, близкая к массе свободного электрона. Если учесть эти факторы, то кривые 3 и 4 практически совпадут во всем интересующем нас интервале энергий, поэтому приведенные здесь оценки процессов не очень чувствительны к выбору модели релаксации на фононах и достаточно надежны.

Если электрон с начальной энергией $\varepsilon_0 \approx 5$ эВ ионизует несколько примесей, то концентрация свободных носителей на АЦ будет в итоге определяться концентрацией ионизованных примесей. Для алмаза эта ситуация, как видно из рис.9, реализуется при концентрации нейтральных примесей (бор) больше 10^{16} см^{-3} . При этом основную роль играют примеси с малой энергией ионизации, поэтому влияние на оценки присутствия примеси азота не слишком велико. Для простоты оценок будем считать также, что каждый электрон с $\varepsilon_0 \approx 5$ эВ порождает только одно «поколение» электронов ионизации. Это вполне допустимо, поскольку средняя энергия порожденного электрона (дырки) от ионизации примеси не превосходит 0,65 эВ и произведенное им число ионизаций $N_{i\text{-imp}}(0,37; 0,65) = 0,32$, в то время как число ионизаций электроном энергии 5 эВ есть $N_{i\text{-imp}}(0,37; 5) = 3,27$. Оценка приведена для типичных концентраций нейтральных примесей (бор) $n_{\text{imp}} \approx 10^{17} \text{ см}^{-3}$. При других концентрациях могут измениться только сами значения, но не их отношение.

3.2. Распределение ионизованных примесей. В момент t' электрон с начальной энергией $\varepsilon_{1s}(0) \approx 5$ эВ рождает электрон следующего поколения с энергией $\varepsilon(t')$. Таким образом, помимо «первичных» электронов, распределенных с плотностью (15) и обладающих примерно одной энергией, которая является решением уравнения

$$t - \int_{\varepsilon}^{\varepsilon_1(0)} d\varepsilon' / g(\varepsilon') = 0 \quad (19)$$

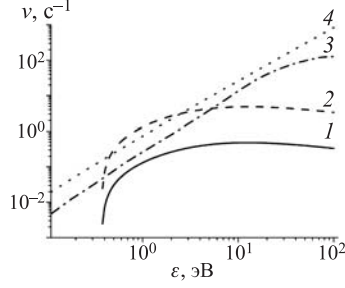


Рис. 8. Энергетическая зависимость частоты потерь энергии носителей: 1, 2 — при ионизации примеси В для $n_{\text{imp}} = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и $n_{\text{imp}} = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ соответственно; 3 — в газовой модели; 4 — за счет рассеяния на фонах

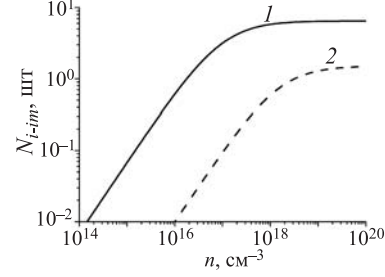


Рис. 9. Зависимость от концентрации примеси числа ионизаций при торможении в алмазе носителя с начальной энергией 5 эВ: 1 — бор, 2 — азот

на отрезке $\varepsilon \in (5T, \varepsilon_1(0))$, рождаются носители зарядов от ионизации примесей. Плотность источников этих носителей можно записать как

$$q(\vec{r}, \varepsilon, t) = w(\varepsilon | \varepsilon_1(t)) n_{\text{imp}} \sigma_{i\text{-imp}}(\varepsilon_1(t)) n(r, t) \sqrt{2\varepsilon_1(t)/m_e}, \quad (20)$$

где $n(r, t)$ — плотность электронов, w — плотность вероятности рождения вторичного электрона с энергией ε при ионизации атома примеси электроном энергии ε_1 .

Если подставить эту функцию в правую часть уравнения (9), то оно будет описывать изменение распределения носителей заряда от ионизации до тех пор, пока они не затормозятся до энергий порядка $2T$ или не начнут чувствовать электрические поля. После подстановки входящих в него выражений источник (20) приобретает вид

$$q(\vec{r}, \varepsilon, t) = \frac{J_{\text{imp}} n_{\text{imp}} \sigma_{i\text{-imp}}(\varepsilon_1(t))}{(\varepsilon + J_{\text{imp}})^2} \times \frac{(\vec{r}^2 + r_0^2)}{e^{-2\tau(\varepsilon_1(t), \varepsilon_1(0))} \text{sh}\left(\frac{rr_0}{\tau(\varepsilon_1(t), \varepsilon_1(0))}\right)} N \frac{\sqrt{2\varepsilon_1(t)}}{rr_0 \sqrt{\tau(\varepsilon_1(t), \varepsilon_1(0))} (\sqrt{2\pi})^3} \sqrt{\frac{2\varepsilon_1(t)}{m_e}}, \quad \varepsilon_1(0) \approx 5 \text{ эВ}. \quad (21)$$

Решение кинетического уравнения записывается через его функцию Грина в соответствии с (13). В рассматриваемом здесь случае пренебрегать влиянием электрических полей нельзя.

Существенным для решения вопросов, обсуждаемых в данной работе, является распределение концентрации ионизованных примесей около мюонного АЦ, поскольку примеси неподвижны и удерживают свободные носители с энергиями, близкими к тепловым, около себя. Эти носители ответственны за процессы, влияющие на поведение поляризации спина мюона в образованном им АЦ.

Интеграл по энергиям от плотности источников, задаваемой формулами (20) или (21), связывает скорость образования ионизованных примесей $n_{\text{imp}}^-(\vec{r}, t)$ с текущей концентрацией нейтральных примесей $n_{\text{imp}} - n_{\text{imp}}^-(t)$ в данной точке пространства

$$\frac{dn_{\text{imp}}^-(\vec{r}, t)}{dt} = \sigma_{i,\text{imp}}(\varepsilon_1(t)) n(\vec{r}, t) (n_{\text{imp}} - n_{\text{imp}}^-(\vec{r}, t)) \sqrt{2\varepsilon_1(t)/m_e}; \quad (22)$$

здесь, как и ранее, n_{imp} — начальная, не зависящая от времени концентрация примесей. После подстановки плотности электронов $n(r, t)$, заданной выражением (15), уравнение (22) превращается в обыкновенное дифференциальное уравнение относительно плотности ионизованных примесей $n_{\text{imp}}^-(\vec{r}, t)$, решение которого удобно записать в виде соотношения для вероятности ионизации примеси

$$W_{\text{ion,imp}}(\vec{r}, t) = \frac{n_{\text{imp}}^-(\vec{r}, t)}{n_{\text{imp}}} = 1 - \exp \left\{ -N \int_{J_{\text{imp}}}^{\varepsilon_1(t)} \sigma_{i,\text{imp}}(\varepsilon') \frac{e^{-\frac{(\vec{r}^2 + \vec{r}_0^2)}{2\tau(\varepsilon', \varepsilon_0)}} \operatorname{sh} \left(\frac{r r_0}{\tau(\varepsilon', \varepsilon_0)} \right)}{r r_0 \sqrt{\tau(\varepsilon', \varepsilon_0)} (2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{2\varepsilon'}{m_e}} \frac{d\varepsilon'}{g(\varepsilon')} \right\}. \quad (23)$$

На рис. 10 представлена сетка кривых рассчитанного по формуле (23) пространственного распределения вероятности ионизации примесей в различные моменты времени. До времен порядка 10^{-14} с концентрация $n_{\text{imp}}^-(0, t) = n_{\text{imp}} \cdot W_{\text{ion,imp}}(0, t)$ на АЦ значительно меньше концентрации нейтральных примесей. К моменту $2,5 \cdot 10^{-14}$ с вблизи АЦ практически все примеси ионизованы, а к $t = 2,5 \cdot 10^{-12}$ с, когда заканчивается ионизация, практически все примеси в области радиуса $r \approx 1,5 \cdot 10^{-5}$ см оказываются ионизованными. Примечательно, что с ростом концентрации примесей в образце, как видно из рис. 11, концентрация ионизованных примесей около АЦ меняется не монотонно. С ростом концентрации примеси от 10^{19} см $^{-3}$ до 10^{20} см $^{-3}$ электрон начинает терять на ионизацию примесей столь много,

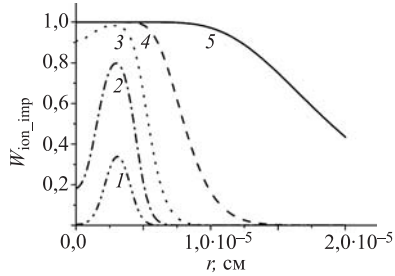


Рис. 10. Пространственное распределение вероятности ионизации примеси вблизи мюонного АЦ ($r = 0$) в различные моменты времени: 1 — $t = 5 \cdot 10^{-15}$ с; 2 — $t = 10^{-14}$ с; 3 — $t = 2,5 \cdot 10^{-14}$ с; 4 — $t = 10^{-13}$ с; 5 — $t \geq 2,5 \cdot 10^{-12}$ с. Концентрация примеси — 10^{17} см^{-3}

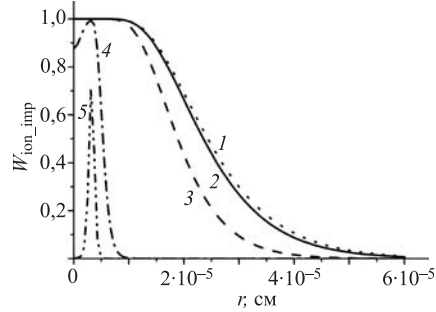


Рис. 11. Вероятность ионизации примеси $W_{\text{ion_imp}}(\vec{r}, \infty)$ при различных значениях ее концентрации: 1 — $n_{\text{imp}} = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, 2 — 10^{16} см^{-3} , 3 — 10^{17} см^{-3} , 4 — 10^{19} см^{-3} и 5 — 10^{20} см^{-3}

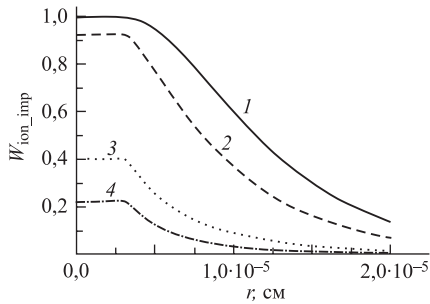


Рис. 12. Асимптотические распределения вероятности ионизации примеси $W_{\text{ion_imp}}(\vec{r}, \infty)$ при разном значении начального числа электронов N . Кривые 1–3 — для примеси бора $n_{\text{imp}} = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $N = 800, 400, 80$ соответственно; 4 — для примеси азота $n_{\text{imp}} = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $N = 800$

что до момента окончания ионизации, когда его энергия становится равной J_{imp} , не успевает достигнуть АЦ с расстояния $r_0 \approx 3,3 \cdot 10^{-6}$ см. При концентрациях примесей 10^{17} см^{-3} и 10^{20} см^{-3} концентрация ионизованных примесей практически одинаковая, а при промежуточных значениях возрастает более, чем на два порядка. Не исключено, что при таких промежуточных концентрациях может стать возможным быстрое образование $\mu\text{В}^-$ за счет эффекта Оже на свободных носителях, образованных при ионизации примесей, концентрация которых, в отличие от изображенной на рис. 5, будет сохраняться на больших временах и определяться процессами рекомбинации, рассматриваемыми в следующем разделе.

На рис. 11 представлено асимптотическое при $t \rightarrow \infty$ распределение вероятности ионизации примеси $W_{\text{ion_imp}}(\vec{r}, \infty)$ при различных значениях кон-

центрации примеси. Вероятность ионизации примеси вблизи АЦ (при $r = 0$) стремится к единице и ее пространственное распределение перестает зависеть от концентрации примеси, если $n_{\text{imp}} < 10^{16} \text{ см}^{-3}$. В этом случае все примеси внутри сферы с центром на АЦ и радиусом $R_{i,\text{imp}}$, приблизительно равным 10^{-5} см , оказываются ионизованными.

Еще раз напомним, что все кривые построены для потенциала ионизации примеси бора $J_{\text{imp}} = 0,37 \text{ эВ}$. Приведенные до сих пор результаты пригодны как для p - типа, так и для n - типа алмазов с учетом соответствующих электронам и дыркам параметров.

Существенным для оценок было предположение о захвате мюона на высокие орбиты (большие k), что приводило к оценке общего числа электронов, ионизирующих примеси, $N \approx 800$. Указать точно, до какого максимального числа k_{max} следует вести суммирование, пока невозможно, поэтому полезно оценить влияние величины N на концентрацию свободных носителей. Интуитивно можно предположить, что эти величины примерно пропорциональны. Результаты вычислений, представленные на рис. 12, свидетельствует, однако, что концентрация носителей значительно слабее реагирует на изменение числа N . На этом же рисунке нижняя кривая построена для глубокой примеси азота с $J_{\text{imp}} = 1,7 \text{ эВ}$ при тех же остальных параметрах, что у верхней сплошной кривой для бора. Из их сравнения видно, что наличие плохо контролируемой концентрации примеси азота, сопоставимой с концентрацией легирующей примеси бора, не должно сильно влиять на концентрацию носителей около мюонного АЦ.

4. ПРОЦЕССЫ В ОКРЕСТНОСТИ μ В-АКЦЕПТОРА НА МАСШТАБЕ ВРЕМЕН БОЛЬШЕ 10^{-10} с ПРИ $T > 50 \text{ К}$

4.1. Изменение плотности носителей около мюонного АЦ. При $t > t_{th} \sim 10^{-10} \text{ с}$ носители уже практически термализованы и скорость их рекомбинации диктуется температурой среды. До этого момента рекомбинация может происходить, но она обычно более медленная, чем после термализации. Расчет этапа термализации носителей в алмазе на временах $10^{-11} \text{ с} < t < 10^{-10} \text{ с}$ достаточно сложен, и он проведен в работе [23]. Этот интервал не вносит существенного вклада в процесс рекомбинации.

В отсутствие явления абсолютной отрицательной подвижности свободные заряды, противоположные по знаку ионизованным примесям, не смогут уйти из области ионизованных примесей на расстояния порядка длины термализации $R(t_{th}) \sim 10^{-4} \text{ см} > R_{i,\text{imp}} \sim 10^{-5} \text{ см}$. В противном случае нарушится электронейтральность и создадутся такие электрические поля, что выполнится неравенство $\varepsilon(t_{th}) \sim T \ll Ne^2/[5,7 \cdot R(t_{th})] \approx 10^3 \text{ К}$, и при $T \sim 10 \text{ К}$ под действием возникшего электрического поля подвижные заряды

восстановят электронейтральность. Избыточные заряды уйдут из области ионизованных примесей вследствие амбиполярной диффузии.

Концентрация ионов примеси равна средней концентрации свободных носителей n , которые к рассматриваемому моменту времени уже термализованы, поэтому рекомбинацию можно описать уравнением

$$\frac{dn(t)}{dt} = -K(n(t), T) \cdot n(t)^2, \quad t(n_0, n(t)) = \int_{n(t)}^{n_0} \frac{dn'}{K(n', T) \cdot n'^2}. \quad (24)$$

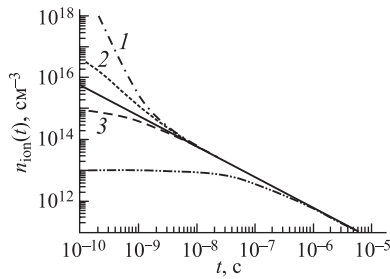


Рис. 13. Зависимость концентрации носителей около точки остановки мюона от времени при различной их начальной концентрации n_0 ; 1 — $n_0 = 10^{20}$; 2 — 10^{17} ; 3 — 10^{15} ; 4 — 10^{13} см^{-3} ; $T = 50$ К

Расчеты зависимости концентрации от времени, аналогичные проделанным для кремния в работе [6], приведены на рис. 13. «Константа» рекомбинации $K(n, T)$ была уточнена в работах [19, 24]. Зависимость «константы» рекомбинации $K(n(t), T)$ от концентрации носителей рассматривалась в [6] по результатам работ [25–27]. Все кривые выходят на асимптоту, изображенную на рисунке штриховой прямой $1/(K(T)t)$, где $K(T) \approx K(n < 10^{12} \text{ см}^{-3}, T)$ — «настоящая» константа рекомбинации, которая не зависит от концентрации, поскольку к моменту $t > 10^{-8}$ с концентрация носителей уменьшилась настолько, что стала применима обычная теория рекомбинации в газе.

При $T = 50$ К константа рекомбинации $K(T) \approx 10^{-6}$ $\text{см}^3/\text{с}$. Таким образом, практически во всем интервале времен, доступных исследованию с помощью μ^- SR-метода (10^{-9} с $< t < 10^{-5}$ с), рекомбинация в образцах с различной концентрацией примесей происходит сходным образом. Это утверждение согласуется, как мы увидим, с результатами μ^- SR-экспериментов для температур выше 50 К, когда эффекты, связанные с неупругостью рассеяния на фононах, взаимодействия с примесями и возможной абсолютной отрицательной подвижностью [8, 9] не столь существенны.

Существенное влияние на величину амплитуды поляризации спина мюона может оказать интеграл по времени от концентрации носителей. Действительно, этот интеграл в формуле (16) определяет возможность образования μ^-V^- за счет передачи энергии свободному носителю. Его величина для типичной концентрации примесей $n_{\text{имп}} = 10^{17}$ см^{-3} равна $1,9 \cdot 10^7$ с/ см^3 , причем на интервале интегрирования по времени до $t \sim 10^{-10}$ с эта величина уже порядка 10^7 с/ см^3 . Соответственно, оценка вероятности образования μ^-V^- при использовании грубых оценок для K_3 , приведенных в разделе 1, ле-

жит в пределах 0,05–1, что не позволяет исключить возможность протекания такого процесса.

4.2. Зависимость амплитуды поляризации спина мюона от времени.

Если скорость релаксации электронного момента АЦ меньше или порядка константы сверхтонкого взаимодействия $\sim 10^8 \text{ с}^{-1}$, то в момент образования парамагнитного центра с точки зрения наблюдателя, ведущего наблюдение на мюонной частоте, поляризация исчезает, поэтому амплитуда прецессии $a_D(t)$ просто совпадает с вероятностью $w(t)$ носителю не быть захваченным на заряженный центр. Последняя повторяла бы поведение графиков для концентрации носителей n_h , если бы отрицательно заряженный центр образовывался мгновенно. Уравнение для $w(t)$ то же самое, что и уравнение (24),

$$\begin{aligned} \frac{dw(t)}{dt} &= -K(T, n_h(t)) \cdot n_h(t) w(t), \\ w(t) = a_D(t) &= \exp \left[- \int_0^t K(T, n_h(t')) \cdot n_h(t') \cdot dt' \right] = \\ &= \exp \left[\int_0^t K(T, n_h(t')) \cdot n_h(t') \cdot \frac{dn}{K(T, n) \cdot n^2} \right] = \\ &= \exp \left[\int_0^t \frac{dn}{n} \right] = \frac{n_h(t)}{n_h(0)}. \end{aligned} \quad (25)$$

Решение его выглядит аналогично, однако в качестве начального момента времени нужно брать момент образования заряженного акцепторного центра, а в качестве $n_h(0)$ — концентрацию носителей в этот момент времени.

Экспериментально наблюдалась затухающая поляризация спина мюона в алмазе. На рис. 14 и 15 точками обозначены результаты аппроксимации μSR -данных с экспоненциальной функцией [12, 13]

$$p(t) = a_D \cos(\omega t + \varphi) = p_0 e^{-\lambda t} \cos(\omega t + \varphi). \quad (26)$$

Оказалось, что начальная фаза $\varphi \approx 0$, а ω совпала с частотой прецессии спина мюона во внешнем магнитном поле, при этом для скорости затухания λ и начальной амплитуды p_0 получились зависимости, представленные на рис. 14, 15 соответственно.

Факт наблюдения заметной поляризации на временах порядка 10^{-8} с, свидетельствует о том, что акцепторный центр к этому моменту еще не захватил дырку. Отсутствие заметного парамагнитного сдвига также согласуется с этим заключением. Альтернативой этому могла бы быть большая скорость релаксации момента электронной оболочки нейтрального АЦ, например, из-за обменного рассеяния.

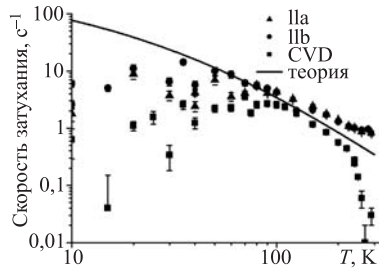


Рис. 14. Скорость затухания поляризации λ (в единицах 10^6 с^{-1}); экспериментальные данные — точки, результаты теоретических расчетов $\Lambda(T)$ — сплошная кривая

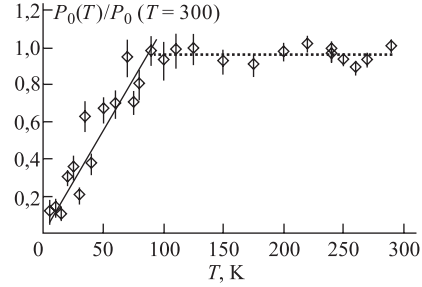


Рис. 15. Температурная зависимость начальной амплитуды прецессии спина мюона

Как показали оценки, начальная концентрация носителей в экспериментальных образцах должна превосходить 10^{15} см^{-3} . При такой концентрации и сечении обменного рассеяния $\sigma_{\text{exc}} \sim 10^{-12} \text{ см}^2$ (оценка для водородоподобного атома имеется в [6]) для температуры $T \sim 10 \text{ К}$ частота обменного рассеяния $\nu_{\text{exc}} \sim \sigma_{\text{exc}} n(t) v (\varepsilon \geq T)$ превосходит 10^9 с^{-1} и может быть больше сверхтонкой константы $\sim 10^8 \text{ с}^{-1}$. Однако к моменту времени $t \sim 10^{-8} \text{ с}$ концентрация носителей согласно рис. 13, падает до 10^{13} см^{-3} , сверхтонкая константа и частота обмена становятся одного порядка, и должна происходить полная потеря поляризации. Поскольку на таких временах наблюдается заметная поляризация, эту альтернативу следует отбросить, однако при более высоких температурах в CVD-алмазах роль обменного взаимодействия, вероятно, окажется существенной. Таким образом, из экспериментов следует, что независимо от количества примесей в образце к моменту времени $t \sim 10^{-8} \text{ с}$ АЦ еще находится в ионизованном состоянии. Это обстоятельство может свидетельствовать о том, что образование отрицательно заряженного акцепторного центра μB^- происходит сравнительно (по отношению к атомным масштабам времени) медленно, за времена порядка 10^{-8} с . Такое время образования μB^- согласуется со сделанными оценками. При $t \sim 10^{-8} \text{ с}$ концентрация носителей во всех образцах, согласно рис. 13, примерно одинаковая и составляет величину порядка 10^{13} см^{-3} . Из этого следует, что затухание поляризации, измеренное μSR -методом, обусловлено захватом дырки на μB^- , а амплитуда поляризации должна описываться формулой (25).

Из формулы (25) и представленных на рис. 13 зависимостей концентрации носителей от времени следует, что для доступных μSR -экспериментам

времен поляризация от времени падает не экспоненциально, а гиперболически:

$$a_D(t) = \frac{p_0}{1 + \Lambda(T) \cdot t} = \frac{p_0}{1 + K(T, n_h(0)) \cdot n_h(0) \cdot t}, \quad (27)$$

где величина $n_h(0) \sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$, как теперь можно достаточно уверенно утверждать, соответствует концентрации носителей в момент времени $t \sim 10^{-8} \text{ с}$.

Сравнивая на рис. 14 сплошную кривую $\Lambda(T)$ гиперболического затухания с полученными $\lambda(T)$ при экспоненциальном фите экспериментальных данных (точки), можно убедиться, что при $50 \text{ К} < T < 200 \text{ К}$ эти величины хорошо совпадают, хотя экспоненциальный закон затухания некорректен и должен быть заменен гиперболическим. При $T > 200 \text{ К}$ различие теории и эксперимента объясняется тем, что начинает сказываться неучтенная в теории концентрация равновесных носителей, которая зависит от сорта примеси. Концентрация ионизованных примесей бора, к примеру, с ростом температуры экспоненциально растет и может сравниться с концентрацией неравновесных носителей ($\sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$) при $T \approx 200 \text{ К}$. При низких температурах $T < 50 \text{ К}$ различие между $\Lambda(T)$ и $\lambda(T)$ становится качественным и отношение этих величин может достигать порядка, однако в этом диапазоне температур из-за эффекта отрицательной подвижности [8] не работает, скорее всего, ни гиперболический, ни экспоненциальный закон затухания.

В связи с тем, что в основе зависимости скорости затухания поляризации от температуры лежит закон рекомбинации носителей на заряженном АЦ, по температурному поведению скорости затухания поляризации можно, в частности, проверить расчет скорости рекомбинации по теории [25] и справедливость предложенной в [19, 24] энергетической зависимости скорости захвата носителя на заряженный центр.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ кинетических процессов в окрестности АЦ, образованного при захвате отрицательного мюона углеродом в алмазе, дал ряд неожиданных результатов. Оказалось, что плотность вторичных электронов, созданная оже-электронами от каскадных переходов, в области локализации АЦ имеет глубокий минимум во временном интервале $10^{-15} < t < 8 \cdot 10^{-14} \text{ с}$. Электроны быстро улетают от АЦ на расстояние $3,3 \cdot 10^{-6} \text{ см}$ и только потом диффузно возвращаются к нему. Возникает пространственная и временная немонотонность поведения суммарной плотности электронов около АЦ. Немонотонной оказалась и зависимость плотности ионизованных примесей от их полной концентрации.

Около мюонного атома (АЦ) в образцах алмаза с обычной концентрацией примесей $n_{\text{имп}} = 10^{15} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$ за время $2,5 \cdot 10^{-12} \text{ с}$ образуется область размера 10^{-5} см , где примеси полностью ионизованы. При больших концентрациях $n_{\text{имп}} \approx 10^{20} \text{ см}^{-3}$ вероятность ионизации примеси резко падает, что, вероятно, может быть обнаружено в эксперименте.

Согласно проведенным расчетам временного поведения плотности носителей около мюонного атома, состояние $\mu\text{В}^-$ не может образоваться быстрее, чем за 10^{-8} с , поскольку из-за высокой концентрации носителей произошел бы захват дырки и образовался бы нейтральный АЦ. В этом случае была бы быстрая деполяризация или, как это имеет место в кремнии, наблюдался бы заметный парамагнитный сдвиг частоты прецессии мюона. Поскольку это противоречит результатам μ^- SR-экспериментов в алмазе ($n_{\text{имп}} = 10^{17} \text{ см}^{-3}$), то независимо от механизма образования иона $\mu\text{В}^-$ скорость его образования не может быть заметно выше 10^8 с^{-1} .

Из этого факта следует ограничение на константу трехчастичного процесса оже-типа с передачей энергии свободному носителю $K_3 < 10^{-31} \text{ см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$, а также оценка частоты радиационного перехода (прилипания) электрона из валентной зоны на нейтральную примесь в решетке алмаза $\nu_r \approx 10^8 \text{ с}^{-1}$. Эффективное сечение прилипания по порядку величины согласуется с экспериментально известными сечениями прилипания к атомам с одним недостающим (до полного заполнения внешней оболочки) электроном, например, к атому фтора или хлора. Естественно, в дальнейшем необходимо подтвердить эту оценку квантово-механическим расчетом.

Измеренная температурная зависимость при $T > 50 \text{ К}$ для скорости затухания амплитуды поляризации мюона вполне согласуется со скоростью захвата дырки ионизованным акцепторным центром $\mu\text{В}^-$, рассчитанной по модифицированной теории работы [25], что подтверждает правомерность выбранной в данной работе модели. Показано, что затухание поляризации мюона во времени не подчиняется обычному экспоненциальному закону, а соответствует гиперболическому закону $1/(1 + \Lambda t)$. Настоящие расчеты не позволяют объяснить экспериментально наблюдавшиеся резкие скачки в температурной зависимости поляризации мюона при низких температурах. Такие скачки вполне могут быть связаны с проявлением других явлений, влияющих на кинетику носителей заряда вблизи АЦ, например, эффекта абсолютной отрицательной подвижности (см. [8]).

Благодарности. Авторы выражают благодарность Министерству образования и науки РФ (грант РНП.2.1.1.9451) за финансовую поддержку работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мамедов Т. Н., Стойков А. В., Горелкин В. Н. // ЭЧАЯ. 2002. Т. 33(4). С. 1005.
2. Mamedov T. N., Duginov V. N., Grebennik V. G. et al. // Нур. Int. 1994. V. 86. P. 717.

3. Горелкин В. Н., Гребенник В. Г., Грицай К. И. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1996. Т. 63(7). С. 539.
4. Mamedov T. N., Chaplygin I. L., Duginov V. N. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 1999. V. 11. P. 2849.
5. Mamedov T. N., Gritsaj K. I., Stoykov A. V. et al. // Physica B. 2000. V. 289–290. P. 574.
6. Батури́н А. С., Горелкин В. Н., Соловьев В. Р. // ЖЭТФ. 2004. Т. 126 2(7). С. 385.
7. Mamedov T. N., Adnreika D., Baturin A. S. et al. // Physica B. 2006. V. 374–375. P. 390.
8. Baturin A. S. et al. // Physica B. 2006. V. 374–375. P. 340.
9. Батури́н А. С. и др. // ЖЭТФ. 2007. Т. 131. С. 155.
10. Смирнов Б. М. Ионы и возбужденные атомы в плазме. М.: Атомиздат, 1974.
11. Frank H. et al. // Proc. of 9th Intern. Conf. on Ioniz. Phenomena in Gases. Vienna, 1969. P. 4.
12. Мамедов Т. Н., Дутов А. Г., Герлах Д. и др. Сообщение ОИЯИ Р14-2004-104, Дубна, 2004.
13. Мамедов Т. Н., Батури́н А. С., Бланк В. Д. и др. Препринт ОИЯИ Р14-2007-12. Дубна, 2007.
14. Батусов Ю. А. и др. // Ядерная физика. 1980. Т. 32(5). С. 1154.
15. Kirch K. et al. // Phys. Rev. A. 1999. V. 59(5), P. 3375.
16. Вайсенберг А. О. Мю-мезон. М.: Наука, 1964.
17. Физические величины. Справочник / Под ред. Григорьева И. С., Мейлихова Е. З. М.: Энергоатомиздат, 1991.
18. Гантмахер В. Ф., Левинсон И. Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М.: Наука, 1984.
19. Батури́н А. С. и др. Направлено в журнал «Физика плазмы».
20. Ким Е. Мезонные атомы и ядерная структура. М.: Атомиздат, 1975.
21. Евсеев В. С., Мамедов Т. Н., Роганов В. С. Отрицательные мюоны в веществе. М.: Энергоатомиздат, 1985.
22. Ферми Э. Научные труды. Т. 2. М.: Наука, 1972.
23. Gorelkin V. N. et al. // Physica B. 2000. V. 289–290. P. 409.
24. Батури́н А. С., Горелкин В. Н., Соловьев В. Р. // Электронный журнал «Исследовано в России». 2006. Т. 253. С. 2423.
<http://zhurnal.aep.relarn.ru/articles/2006/253.pdf>.
25. Абакумов В. Н., Перель В. И., Ясиевич И. Н. // Физика и техника полупроводников. 1978. Т. 12. С. 3.
26. Lax M. // Phys. Rev. 1960. V. 119. P. 1502.
27. Абакумов В. Н., Ясиевич И. Н. // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. С. 657.

Получено 24 декабря 2007 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 28.03.2008.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,62. Уч.-изд. л. 1,91. Тираж 280 экз. Заказ № 56121.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/