"АНОМАЛЬНЫЙ" МЮОНИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

В.А.Гордеев

Введение

С запуском в строй в 1976 году мюонного канала на синхроциклотроне ПИЯФ ведется широкая программа исследований на пучках медленных мюонов. В исследованиях на мюонных пучках ПИЯФ решены важные вопросы физики мюония. Проведены систематические исследования условий образования и взаимодействия с решеткой вещества "нормального" (Mu) и "аномального" (Mu*) мюония, диамагнитной фракции в монокристаллах кремния n- и p-типа проводимости в широком диапазоне температур. Проведено сопоставление основных экспериментальных данных, которые характеризуют состояние Mu* и водородосодержащий центр Si–AA9, обнаруженный в кремнии методом ЭПР, и показано, что центр Si–AA9 подобен Mu* и является водородным аналогом Mu*. Предложена качественная микроскопическая модель взаимодействия мюона и мюония в веществе мишени, в которой существенную роль играют надтепловые процессы взаимодействия мюона и мюония с частично ионизованной решеткой монокристалла. Впервые проведено экспериментальное исследование параметров квадрупольного взаимодействия мюония в монокристаллах α-кварца. Установлено изменение величины и знака квадрупольной постоянной мюония, обусловленного быстрой диффузией мюония в кристаллической решетке образца. Исследование квадрупольных осцилляций мюония в веществе открывает новые возможности в мюонном методе, связанные с изучением неоднородных внутрикристаллических электрических полей. Предложен и реализован новый прямой и независимый метод исследования конверсии мюония в антимюоний ($M \rightarrow \bar{M}$), основанный на регистрации высокоэнергичных электронов от распада мюона антимюония широкоугольным магнитным спектрометром. Проведен совместный ПИЯФ–ОИЯИ эксперимент по исследованию вероятности процесса конверсии $M \rightarrow \bar{M}$ на пучке "поверхностных" мюонов фазотрона ЛЯП ОИЯИ с помощью аппаратуры, разработанной и изготовленной в ОФВЭ ПИЯФ.

Ниже обсуждаются результаты исследований характеристических состояний атома мюония в полупроводниках, где получен наиболее значимый результат – установлена природа "аномального" мюония. Исследования проводились объединенными усилиями сотрудников ПИЯФ (Гатчина), ИТЭФ (Москва), ОИЯИ (Дубна), ФТИ (Алма-Ата), НИИЯП (Минск).

"Аномальный" мюоний

В 1973 году в работе J.H.Brewer et al. при исследовании частот прецессии атомов мюония в кремнии при низкой температуре (77 K) обнаружено две, а в нескольких случаях и большее число частот, не связанных с поведением "нормального" мюония. Тщательные исследования "аномальных" частот прецессии были выполнены B.D.Patterson et al. (1978). Авторы показали, что при температурах ниже 85 K "аномальные" частоты наблюдаются для образцов кремния n- и p-типа проводимости при концентрации легирующей примеси от 10^{12} до 10^{16} см$^{-3}$. Установлено, что при низких температурах в кремнии одновременно могут существовать три различные системы, включаюшие в себя мюон: "нормальный" мюоний (Mu), "аномальный" мюоний (Mu*), диамагнитная фракция (μ). При высоких температурах (295 K) наблюдается только диамагнитная фракция. Наиболее полно авторы исследовали образец кремния p-типа проводимости с концентрацией примеси $\sim 10^{13}$ см$^{-3}$ при $T = 30$ K. Показано, что как величина, так и количество наблюдаемых "аномальных" частот зависят от ориентации образца. Наблюдаемые эффекты авторам удалось описать гамильтонианом с аксиально-симметричным сверхтонким взаимодействием:

$$\mathcal{H}^* = A_{\perp}(S_x I_x + S_y I_y) + A_{\|} S_z I_z - g_e m_e S H - g_\mu m_\mu I H$$

с параметрами $A_{\perp} = 92.1 \pm 0.3$ МГц, $A_{\|} = 17.1 \pm 0.3$ МГц; z — ось симметрии кристалла (ось [111]).

В работах Ю.М.Белоусова и др. (1978) получены аналитические решения для уровней энергии "аномального" мюония для всех возможных случаев и приведены рабочие формулы для поляризации в зависимости от времени. Возможно несколько физических причин появления "аномальных" частот прецессии мюонов в кремнии. Одна из них состоит в том, что мюон может иметь в кристаллической решетке кремния два положения равновесия. В одном из них — октапоре монокристалла – мюоний окружен ближайшими атомами с гексагональной ориентацией, благодаря чему сферическая симметрия сверхтонкого взаимодействия нарушается. Другая схема [1] основана на предположении о существовании парамагнитной химической связи мюония с решеткой кремния. Экспериментальные основания в пользу того или иного механизма проявления трех состояний мюонов в кремнии могут быть получены при изучении зависимости заселенности каждого состояния от температуры, поскольку, как показывает опыт, при этом возможно исследование характеристик переходов между различными состояниями.

Модель молекулярного радикала для "аномального" мюония

С целью исследования механизма взаимодействия атома мюония в монокристаллах атомарных полупроводников на мюонном канале синхроциклотрона ПИЯФ были проведены систематические исследования слаболегированных образцов кремния разного типа проводимости в широком диапазоне температур (60÷730) K [1,2]. В экспериментах определялись амплитуды каждого из трех состояний мюонов в кремнии при различных температурах, скорость релаксации указанных состояний и возможные переходы между ними. Эксперименты проводились как в перпендикулярных, так и в продольных магнитных полях. В условиях быстрой релаксации системы спинов мюонов такая постановка опытов более информативна, поскольку продольное магнитное поле в значительной степени предотвращает действие деполяризующих факторов.

Наиболее подробно исследованы два образца кремния, один из которых p-типа проводимости с концентрацией примесных атомов $\sim 5 \cdot 10^{12}$ см$^{-3}$, а другой n-типа проводимости с концентрацией электронов проводимости $1.6 \cdot 10^{13}$ см$^{-3}$. Мишени представляли собой мозаику, составленную из ориентированных одинаковым образом монокристаллов, электропроводности и постоянные Холла которых были предварительно измерены.

Подробное описание и анализ экспериментального материала приведены в работе [3]. Здесь сформулируем только основные факты, вытекающие из проведенных исследований.

1. Доля Mu-компоненты β(Mu) слабо зависит от температуры в обоих образцах: β(Mu)=const в интервале температур 78 K $< T <$ 400 K. Амплитуда Mu-компоненты вычислена из измеренных в экспериментах значений поляризации в продольном магнит-

ном поле $H = 200$ Э ($P = 0.73 \pm 0.02$ для p-кремния и $P = 0.67 \pm 0.03$ для n-кремния) по известным формулам теории в предположении малой скорости спин-обменных (частота ν) и химических (характерное время мюониевой стадии τ) взаимодействий в сравнении с частотой сверхтонкого взаимодействия ω, $\nu \ll \omega$ и $\omega\tau \gg 1$: β(Mu)=0.56±0.05 и β(Mu)=0.69±0.06 для p- и n-кремния, соответственно.

2. Характер "восстановления" поляризации мюонов в Mu*-состоянии продольным магнитным полем согласуется с выводами теории. Эксперимент свидетельствует, что Mu*-компонента существует в интервале температур (78÷204) К и при более высоких температурах переходит в μ-компоненту. Доля Mu*-компоненты $\beta(\mathrm{Mu}^*) = 0.39 \pm 0.03$ рассчитана в соответствии с экспериментальными данными, полученными с p-кремнием при температуре 78 К (в условиях, когда прецессионные частоты Mu*-состояния наблюдались на опыте).

3. Мюонная компонента поляризации при низких температурах практически отсутствует в n-кремнии, а в p-кремнии ее доля $\beta(\mu)$=0.11±0.03. В области температур (300÷400) К доля мюонной компоненты $\beta(\mu)$=0.50±0.02 и $\beta(\mu)$=0.42±0.03 для p- и n-кремния, соответственно. Эти значения, сопоставленные с приведенными выше значениями β(Mu), свидетельствуют о том, что состояние μ возникло из Mu*-компоненты.

4. В области температур $T > 400$ К скорость релаксации поляризации резко возрастает с увеличением температуры в обоих образцах кремния как в перпендикулярном, так и в продольном магнитных полях. Это свидетельствует о том, что при $T > 400$ К стабильность мюонной компоненты нарушается. Сопоставление скоростей релаксации поляризации в продольных и перпендикулярных полях (продольное поле не предотвращает релаксацию, лишь уменьшает ее скорость в $1.5 \div 3$ раза) свидетельствует о том, что продуктом распада мюонной компоненты обязательно являются атомы мюония, причем имеют место как цепь последовательных переходов $\mu \Rightarrow \mathrm{Mu} \Rightarrow \mu \Rightarrow ...$, так и спин-обменные взаимодействия электрона мюония с электронами проводимости. На основании этих фактов была предложена модель химической связи [1], в которой картину взаимодействия мюонов с кремнием можно представить в виде следующих схем:

а) $\mu^+ + e^-$ (из валентной зоны) $\Rightarrow$ Mu;

б) $\mathrm{Mu} + [Si^+e^-e^-Si^+] \Rightarrow [\mu^+e^-e^-Si^+]Si^+ + e^-$ (из зоны проводимости);

в) $[\mu^+e^-e^-Si^+]Si^+ + e^-$ (из зоны проводимости) $\Rightarrow [\mu^+e^-e^-Si^+](Si^+e^-)$.

Процесс а) есть образование мюония, что энергетически возможно, если потенциал ионизации мюония превышает ширину запрещенной зоны полупроводника. Процесс б) интерпретируется как переход Mu $\Rightarrow$ μ; активационный барьер в кремнии равен 0.18 эВ. Процесс в) соответствует переходам $\mu \Leftrightarrow \mathrm{Mu}^*$, то есть под символом Mu* подразумевается радикальная система $[\mu^+e^-e^-Si^+](Si^+e^-)$, в которой электрон локализован на одном из соседних атомов кремния.

С целью проверки модели молекулярного радикала для Mu*-состояния нами проведено исследование влияния радиационных нарушений монокристалла кремния и последующего их отжига на соотношение амплитуд "нормального" и "аномального" мюония и диамагнитной фракции [4].

Известно, что атомы водорода, внедренные в кремний при ионной имплантации, активно взаимодействуют с радиационными нарушениями решетки с образованием связи типа Si-H . Аналогом атома водорода в кремнии является свободный атом мюония, который быстро находит точечный дефект и вступает во взаимодействие с ним, аналогично атому водорода. Что касается поведения "аномального" мюония в зависимости от числа радиационных дефектов в образце, то оно во многом зависит от структуры этого состояния. Если мы будем рассматривать Mu* как свободный атом мюония, отличающийся от Mu только своей сверхтонкой структурой, то условия взаимодействия этой системы с радиационными дефектами образца не должны сильно отличаться от взаимодействия атома Mu. Если же рассматривать систему Mu* как комплекс, жестко закрепленный в кристаллической решетке, то, наоборот, из-за отсутствия диффузии по образцу радиационные дефекты не смогут изменить динамику поведения системы Mu* в кремнии.

Для выяснения этого вопроса подробно исследованный нами ранее образец кремния p-типа проводимости был подвергнут облучению быстрыми нейтронами реактора. Первоначально были проведены три серии облучений различными дозами нейтронов, которые создали, по оценкам, концентрации дефектов (смещенных атомов), равные: $2 \cdot 10^{18}$; 10^{17} и 10^{16} см$^{-3}$. После каждого облучения проводились μSR-исследования с облученным образцом и с тем же образцом после полного термического отжига радиационных дефектов [4]. Показано:

1) начальная (при $t = 0$) поляризация мюонов как в перпендикулярном, так и в продольном магнитных полях не зависит от концентрации дефектов в образце, что указывает на то, что радиационные дефекты не изменяют вероятность образования трех состояний Mu, Mu* и μ в начальный момент времени;

2) образующиеся радиационные дефекты различным образом влияют на "нормальный" и "аномальный" мюоний в кремнии (при t > 0). При концентрации радиационных дефектов в пределах $(10^{16} \div 2 \cdot 10^{18})$ см$^{-3}$ "нормальный" мюоний по прецессии на мюониевой частоте экспериментально не наблюдается. В то же время амплитуда и скорость релаксации поляризации мюона в составе "аномального" мюония практически не изменились. Этот факт свидетельствует о существенно разной подвижности "нормального" и "аномального" мюония в кристаллической решетке кремния. Последующий температурный отжиг образца приводит к восстановлению исходной скорости релаксации поляризации мюона в составе "нормального" мюония.

Дальнейшие исследования, проводимые с этим же образцом кремния [3], показали, что исчезновение частот прецессии Mu наблюдается даже при концентрации дефектов на уровне 10^{13} см$^{-3}$. Последующий ступенчатый изохронный отжиг приводит к появлению релаксирующего Mu, скорость релаксации которого экспоненциально падает с увеличением времени отжига. При полном отжиге дефектов происходит восстановление μSR-параметров Mu. Параметры состояния Mu* по-прежнему остаются неизменными.

Таким образом, проведенные в ПИЯФ эксперименты указывают, что подвижность состояний Mu и Mu* в образце различна. Состояние Mu быстро диффундирует по решетке, в то время, как состояние Mu* представляет собой объект, жестко связанный с решеткой образца, что находится в согласии с приведенной выше моделью молекулярного радикала для описания Mu*-компоненты.

С целью проверки универсальности механизма взаимодействия мюона и мюония в веществе нами проведены исследования более сложных полупроводников [5,6]. Впервые было показано наличие состояний Mu и Mu* в бинарном полупроводниковом соединении GaAs. Исследования проводились с монокристаллическим полуизолирующим образцом арсенида галлия, легированного хромом ($\rho > 10^8$ Ом $\cdot$ см, $[p] = 2 \cdot 10^{12}$ см$^{-3}$ при $T = 500$ К с энергией активации 0.69 эВ), в интервале температур $(60 \div 560)$ К. Исследовалась температурная зависимость начальной амплитуды и скорости релаксации мюонной компоненты поляризации в перпендикулярном и продольном магнитных полях.

Показано, что характер зависимости доли мюонной компоненты поляризации от температуры в GaAs позволяет выделить четыре температурные области с различными значениями начальной поляризации P [6]: I.($60 \div 160$ K) – поляризация неизменна и составляет $P = 0.12 \pm 0.02$; II.($160 \div 200$ K) – резкое возрастание P до значения $P = 0.30 \pm 0.02$; III.($200 \div 300$ K) – монотонное уменьшение значения P до величины $P = 0.20 \pm 0.02$; IV.($300 \div 500$ K) – $P \simeq 0.2$; V.($T > 500$ K) – резкое увеличение значений начальной поляризации и скорости релаксации мюонной прецессии. Анализ этих данных в сопоставлении с аналогичными результатами для кремния позволяет предположить, что характерный рост мюонной компоненты поляризации в области II и V связан с переходами между состояниями: $\mathrm{Mu}^* \Rightarrow \mu$ (II) и $\mathrm{Mu} \Rightarrow \mu$ (V). Отсутствие плато в зависимости начальной поляризации в области III связано, по-видимому, с тем, что образующееся состояние μ в бинарных полупроводниках не является устойчивым.

Эксперименты с образцом GaAs в продольных полях в сравнении с аналогичными данными для кремния указывают, что "аномальный" мюоний существует в GaAs при $T < 170$ K и обладает более сильной сверхтонкой связью (фактор усиления $\sim 2 \div 3$), чем аналогичное состояние в Si.

Прямое измерение частот сверхтонкого расщепления уровней Mu^* в монокристаллах GaAs и GaP проведено J.W.Schneider et al. (1986). Сравнение данных для GaAs, GaP с аналогичными данными для Si и Ge говорит об универсальности механизма взаимодействия мюонов в кристаллических решетках атомарных и бинарных полупроводников.

Сравнительный анализ свойств "аномального" мюония и "аномального" водорода

В работе Ю.В.Горелкинского и Н.Н.Невинного (1987) методом ЭПР в кремнии впервые обнаружено парамагнитное состояние с разрешенной сверхтонкой структурой от ядер водорода (центр Si-AA9), имплантированных в образец при $T = 80$ K. ЭПР-измерения в режиме поглощения проводились на спектрометре Q-диапазона на образцах кремния после имплантации в них водорода. Для имплантации образцы облучались протонами с энергией 7 МэВ (дозы облучения $5 \cdot 10^{14} \div 5 \cdot 10^{15}$ прот/см^2) через алюминиевый поглотитель. Исследовались образцы зонного кремния высокой очистки p-типа, ρ=6 кОм $\cdot$ см и образцы, выращенные по методу Чохральского, p- и n-типа, ρ=10 Ом $\cdot$ см, толщиной $\sim$ 300 мкм. Осуществлялась подсветка образцов от вольфрамовой лампы через световод и ИК-фильтр из кремния. Центр Si-AA9 наблюдается только при освещенных образцах ($W \sim 0.2 \div 0.3$ Вт/см^2). Центр Si-AA9 является стабильным образованием в решетке кремния и устойчиво наблюдается в течение длительного времени после имплантации водорода при условии хранения образцов при температурах ниже 180 K. Проведенный изохронный отжиг показывает [7], что в области температур ($190 \div 210$) K относительная доля центров Si-AA9 уменьшается, а при $T > 210$ K необратимо исчезает, что связано, по-видимому, с распадом (аннигиляцией) парамагнитной конфигурации (диффузией водорода с образованием молекулы водорода или образованием стабильных Si-H связей). В работе [7] проведен сравнительный анализ эксперментальных данных для образований Mu^* и Si-AA9. Показано, что характер симметрии сверхтонкого взаимодействия одинаков для Mu^* и Si-AA9. Кроме того, главные значения тензора сверхтонкого взаимодействия центра Si-AA9 соответствуют ожидаемым значениям этих констант для "аномального" водорода H^* (они получены делением экспериментальных значений для Mu^* на отношение $A_{\mathrm{Mu}}/A_{\mathrm{H}} = 3.14$ и равны

$A_\perp = \pm 29.3$ МГц; $A_{||} = \pm 5.4$ МГц). Практически совпадают экспериментальные величины констант суперсверхтонкого взаимодействия между ядром ^{29}Si и электроном Mu* и Si-AA9. Для Mu* в Si (Si-AA9 в Si) получено:

$A_\perp(^{29}\mathrm{Si}) = -73.96(72.9)$ МГц; $A_{||}(^{29}\mathrm{Si}) = -137.5(128.9)$ МГц.

Совпадают также температурные области, где происходит переход Mu* $\Rightarrow \mu$ и аннигиляция центра Si-AA9. Таким образом, по своим свойствам центр Si-AA9 подобен "аномальному" мюонию. Это дает основание утверждать, что в кристаллическом кремнии указанные центры имеют эквивалентные структуры, отличающиеся лишь тем, что в структуру Mu* входит мюон, а не протон, как в случае Si-AA9.

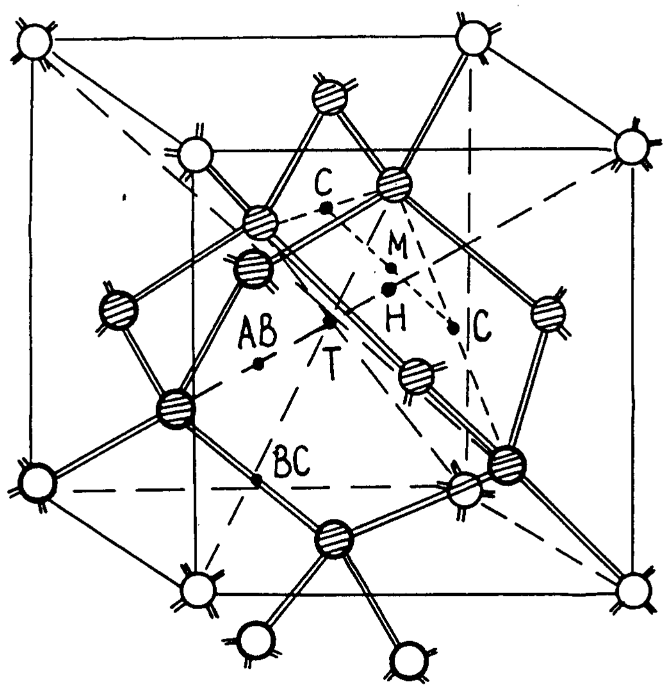

Рис. 1. Элемент кристаллической решетки кремния. Жирные кружки – атомы кремния кластера Si_8H_{16}, кружки со штриховкой – кластера $Si_{10}H_{16}$. Точки C, M, H, T, AB, BC — возможные положения междоузельного водорода.

В литературе известно несколько физических моделей Mu* в кристаллической решетке полупроводника. Как уже указывалось, одной из первых была предложена модель, в которой Mu* рассматривался как мюоний, находящийся в гексагональном междоузлии (Mu в точке H, рис.1) кристалла (Ю.М.Белоусов и др., 1978). В другой модели [1] Mu* представляется как парамагнитный комплекс, образованный в решетке образца в результате химического взаимодействия атома мюония с атомами кристаллической решетки образца. В рамках модели комплекса Mu* с локализацией Mu на середине связи между соседними атомами кристалла (точка BC, рис.1) удалось объяснить некоторые особенности параметров сверхтонкого взаимодействия Mu* в кремнии и алмазе (S.F.J.Cox and M.C.R.Symons, 1986). Аналогичные результаты получил S.Estreicher (1987), рассматривая Mu* как вакансионный комплекс. Однако, на наш взгляд, кажется маловероятным связывать состояние

Mu* с комплексом на дефектах структуры образца, поскольку, например, мюон в процессе термализации создает незначительное число радиационных дефектов (основная часть выделяющейся энергии идет на ионизацию окружения). Кроме того, комплекс Mu* образуется с вероятностью $\sim 40\%$ в сверхчистых образцах кремния. Наконец, как показано в работе [4], искусственное введение радиационных дефектов в образец вплоть до концентрации 10^{18} $см^{-3}$ не увеличивает вероятность образования состояния Mu*. D.D.Patterson (1984) на основе анализа экспериментов по каналированию мюонов от $\pi \to \mu$-распадов и позитронов от $\mu \to e$-распадов предположил, что Mu в Mu* находится на оси [111] в антисвязывающем местоположении (точка AB, рис.1). Таким образом, мы имеем несколько вариантов местоположения атома Mu в комплексе Mu*.

С целью получения новых данных о возможной локализации водородоподобного атома в полупроводниках нами с помощью квантовохимических методов были проведены исследования электронной структуры Mu, помещенного в точки H, AB, и BC кристаллической матрицы Si и алмаза (C). В расчетах использовалась программа "Спин-гамильтониан", позволяющая в рамках принятых приближений получать не только тензор сверхтонкого взаимодействия, но и электронный g-тензор примесного атома. Вычисления констант сверхтонкого взаимодействия и g-тензора проводились в равновесной геометрии кластеров, моделирующих состояния Mu в решетке. Для Mu в точках H и AB рассчитывались кластеры $MuX_{10}H_{16}$ (X=Si, C), центрированные в тетраэдрическом междоузлии (точка T, рис.1), тогда как для Mu в точке BC – кластеры MuX_8H_{18} с центром в этой же точке. Подробно результаты этих исследований приведены в работах [8,9]. Показано, что имеет место качественное соответствие между расчетными свойствами Mu в точке BC и экспериментальными характеристиками Mu* и, следовательно, Mu (H), расположенные в точке BC решетки, подходят для описания "аномального" мюония (водорода). При этом нельзя исключить динамический вариант комплекса, в котором смещенный от оси X-X связи атом мюония (водород) быстро вращается (или туннелирует) вокруг этой оси. Подтверждение справедливости этих представлений дают результаты экспериментальных исследований суперсверхтонкого взаимодействия с ядром ^{29}Si для Si-AA9 (Ю.В.Горелкинский и Н.Н.Невинный, 1987) и Mu* (R.F.Kiefl et al., 1988), где показано, что в структуру центра Si-AA9 (H*) и Mu* входят два эквивалентных атома кремния, расположенных вдоль оси [111] на одинаковом расстоянии от ядра водорода и мюона.

Анализ электронной структуры комплексов, моделирующих атом мюония (водорода) в BC-междоузлиях кристаллов кремния и алмаза, показывает, что во всех случаях появляется донорный уровень в запрещенной зоне; этот факт позволяет естественным образом объяснить необходимость подсветки для наблюдения "аномального" водорода (Si-AA9) в кремнии. В самом деле, "аномальный" водород (H в точке BC), являясь донором, отдает электрон акцепторам, и его уровень (парамагнитный) становится пустым (диамагнитным). Для его заполнения необходима подсветка, которая поставляет электроны из валентной зоны на этот пустой уровень. Возможными акцепторами в Si могут быть примесные атомы, а также структурные дефекты, которые вводятся в процессе низкотемпературной имплантации.

Следует отметить, что имеется слабая изотопическая зависимость констант сверхтонкого и суперсверхтонкого взаимодействий для "аномальных" мюония и водорода. Для понимания природы этой изотопической зависимости важным являлось бы более подробное исследование "аномальных" дейтерия D* и трития T*. Исследование изотопических эффектов в области низких (< 10 K) температур позволит, на наш взгляд, выяснить, статический или динамический вариант модели "аномальных" водородоподобных центров имеет место в полупроводниках.

Экспериментальное наблюдение водородного аналога "аномального" мюония – центра Si-AA9 – позволяет по-новому взглянуть на богатую μSR-информацию, полученную в течение последних 20 лет по исследованию характеристических состояний мюония в полупроводниках. Действительно, до недавнего времени считалось, что эти состояния характерны только для взаимодействия мюонов в полупроводниках. Приведенные выше данные показывают общность картины взаимодействия в кристаллической структуре вещества мюония, водорода и других водородоподобных систем.

О физической картине взаимодействия мюона и мюония в веществе

В литературе имеются работы (S.F.J.Cox and M.C.R.Symons, 1986; T.L.Estle et al., 1986), в которых делается попытка обобщить существующий экспериментальный материал и построить реалистическую модель взаимодействия мюонов в веществе. С точки зрения поведения Mu*, общепринятой становится модель, связанная с представлением Mu* как молекулярного радикала, впервые рассмотренная в наших работах [1]. Предложенные модели в большинстве случаев подкреплены данными неэмпирических квантовомеханических расчетов. Однако эти модели, скорее, объясняют отдельные свойства "аномального" мюония, чем дают решение общей проблемы. В частности, не нашел объяснения и тот экспериментальный факт (см. раздел 3), что свойства Mu* не связаны с дефектами материала, введенными в образец облучением.

Ниже дана качественная микроскопическая модель взаимодействия мюонов с веществом мишени с момента начала термализации до момента распада мюона, как это представляется сегодня автору на основе приведенного выше материала. В рассматриваемой модели существенную роль играют надтепловые процессы, происходящие за времена, меньшие 10^{-10} с, в течение которых происходит образование всех наблюдаемых состояний, включающих мюон, и их термализация. Важной частью в предлагаемой картине является взаимодействие с треком за времена $\sim 10^{-12}$ с до полной остановки мюона.

Для того, чтобы остановиться в исследуемом образце мишени, мюон должен на своем пути растратить энергию в столкновениях, при которых она теряется в основном на ионизацию. Отрывая электрон, мюон отдает часть своей энергии электронам валентных оболочек, связь между атомами нарушается, и в этом случае возможен захват мюона (аналога водорода) связью. Разделим условно временну́ю шкалу взаимодействия мюонов в веществе на четыре зоны относительно времени $t = 0$ – момента полной остановки мюона: I. $-10^{-10} \div -10^{-12}$, II. $-10^{-12} \div 5 \cdot 10^{-11}$, III. $5 \cdot 10^{-11} \div 5 \cdot 10^{-9}$, IV. $5 \cdot 10^{-9} \div 10^{-5}$ с (I – зона отрицательного времени, связанная с процессами образования трека мюона и термализации; II – зона канала горячей химии, протекающей без потери поляризации мюона; III – зона быстрой деполяризации мюонов в состоянии Mu за счет сверхтонкого взаимодействия и процессов спин-спинового обмена электрона Mu с электронами среды; IV – зона медленной деполяризации мюонов). В эксперименте доступны измерению только состояния поляризации мюонов во временной зоне IV, которые существенно зависят от процессов, происходящих в зонах I – III.

Поведение мюонов в зоне I в значительной степени определяется тем, что за этот промежуток времени в узкой области пространства с линейными размерами $\sim 10^{-6}$ *м* в процессе термализации выделяется большая энергия (~ 30 *кэВ*), что приводит к наличию в окрестности положения мюона электронных дефектов типа разрыва связи. Это благоприятствует образованию в процессе многократной перезарядки мюона $\mu^+ \Leftrightarrow$ Mu устойчивого комплекса внутри молекулярной решетки кристалла. Дальнейшее поведение спина мюона в составе комплекса существенно зависит от зарядового состояния комплекса, типа связи, энергии активации, а также от спинового окружения. В зоне I и происходит первоначальное формирование характеристических состояний, включающих в себя мюон (Mu – свободный атом мюония, Mu* – парамагнитный молекулярный комплекс, μ – диамагнитный молекулярный комплекс либо свободный мюон в междоузлии кристаллической решетки). Состояния Mu* и доля состояний μ, связанная с диамагнитным комплексом, закреплены в определенных узлах решетки кристалла. Атомы Mu закреплены в междоузлиях только при достаточно низких температурах (ниже 40÷120 K в зависимости от структуры вещества мишени), а при высоких температурах свободно диффундируют по междоузлиям решетки. Диффузия свободного мюона существенно зависит от чистоты образца и подробно изучена для большого числа материалов мишени. Поляризация мюона во всех первоначальных состояниях совпадает с поляризацией пучка мюонов.

Временна́я зона II существенна для состояния Mu и свободного мюона в области температур, где скорости диффузии Mu и мюона по кристаллу достаточно высоки, и ответственна за возможные переходы между состояниями Mu $\Leftrightarrow$ Mu*, Mu $\Leftrightarrow \mu$, $\mu \Leftrightarrow$ Mu*, причем переходы в Mu* в значительной степени зависят от структуры проводящей и валентной зон вещества мишени. Последние, в свою очередь, зависят от температуры образца и числа остаточных электронных дефектов в процессе рассасывания трека. При этом состояние поляризации мюона не изменяется.

Временна́я зона III характерна наличием процесса деполяризации мюона в атоме Mu за счет сверхтонкого взаимодействия в состоянии с m = 0 (m – магнитное квантовое число) и в Mu* за счет сверхтонкого и суперсверхтонкого взаимодействий (при наличии в составе молекулярной решетки ядер с ненулевым спином). Степень деполяризации мюонов существенно зависит от характера зоны проводимости и дефектной структуры образца и может меняться от $P/2$ до 0 (P – начальная поляризация пучка μ^+).

Таким образом, измеряемая экспериментально начальная поляризация мюонов в различных состояниях зависит от процессов, происходящих во временны́х зонах I-III. Дальнейшее ее временно́е развитие (зона IV) существенно зависит от наличия внутренних магнитных и неоднородных электрических полей, их ориентации относительно осей симметрии кристалла и в настоящее время хорошо исследована для большинства образцов, содержащих долгоживущий мюоний.

Для проверки энергетической устойчивости парамагнитных комплексов в решетке монокристалла при посадке водорода (мюония) на разорванную связь нами были проведены расчеты равновесных конфигураций водорода в кремнии [10]. Для расчета был использован самосогласованный дискретно-вариационный X_α-метод (ДВМ-X_α), предназначенный для численного интегрирования одноэлектронных уровней Хартри-Фока-Слэтера. В одноэлектронный гамильтониан системы h входит оператор кинетической энергии Δ, V_n – взаимодействие электронов с ядрами системы, V_c – межэлектронное и межъядерное кулоновские взаимодействия, V_{X_α} – локальный обменный потенциал:

$$h = -\frac{1}{2}\Delta + V_n + V_c + V_{X_\alpha}$$

Расчеты проведены с использованием оригинальной версии программы ДВМ-X_α (Г.Л.Гуцев и Г.С.Мякенькая, 1988) в базисе численных хартри-фоковских функций основного состояния атомов Si и H. Кластер Si_5H_{12}, моделирующий фрагмент решетки кремния, имел структуру алмаза с длиной связи d = 2.35 Å. В такой идеальный кластер Si_5H_{12} помещался атом водорода на разорванную связь в центр Si-Si связи (рис.2). Симметрия дефекта в этом случае C_{3v} , а ось симметрии [111]. Изменение полной энергии при различных сме-

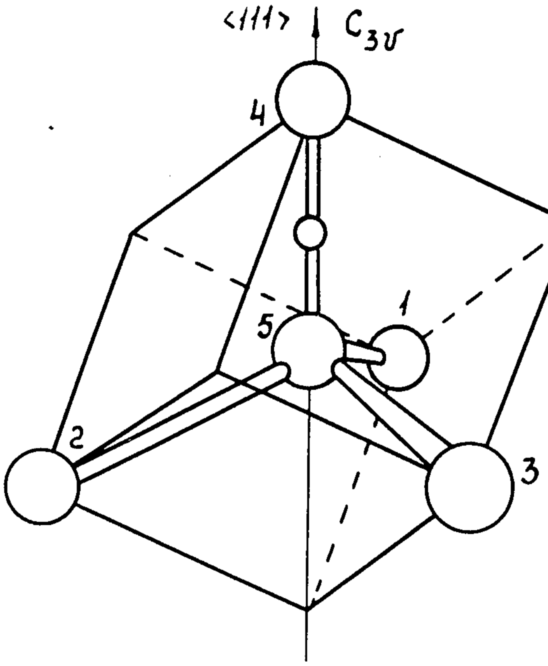

Рис. 2. Элемент кристаллической решетки кремния кластера Si_5H_{12}. 1,2,3,4,5 – атомы Si. Три разорванные связи атомов 1,2,3,4 замыкают атомы H.

щениях междоузельного связецентрированного водорода приведено на рис.3. Видно, что на середине связи водород занимает устойчивое положение по отношению к смещению по линии связи, что согласуется с данными, приведенными выше для центра Si-AA9. Другая ситуация возникает в решетке в том случае, если происходит возбуждение и ионизация двух и более связей между атомами кремния. Такое возбуждение ведет к смещению узельного атома кремния в междоузлие. Подобный механизм образования вакансии в допороговой области энергий в полупроводниках подтвержден несколькими методами регистрации радиационного эффекта: с помощью радиоактивных изотопов, измерением вольтемкостных, вольтамперных и спектральных характеристик диодных структур, измерением проводимости и подвижности . Оценка сечения образования дефектов за счет ионизации при допороговом облучении дает значение порядка 1 бн для германия, что сравнимо с сечением дефектообразования под действием надпороговой радиации. Энергия, необходимая для образования такой вакансии в кремнии, составляет (2÷4) эВ.

Естественно, что возникающая вакансия захватывает атом водорода. Поведение атома водорода моделировано с использованием того же кластера Si_5H_{12}, из которого удалялся центральный атом кремния, а на одну из оборванных связей нейтральной вакансии (p) в направлении [111] помещался атом водорода [10]. Симметрия системы осталась прежней C_{3v}. В расчете использовалась спин-ограниченная версия программы ДВМ-X_α. На кривой полной энергии как функции смещения атома H видны два минимума, соответствующие стабильным конфигурациям водорода в кластере H + □ Si_4H_{12} (рис.4).

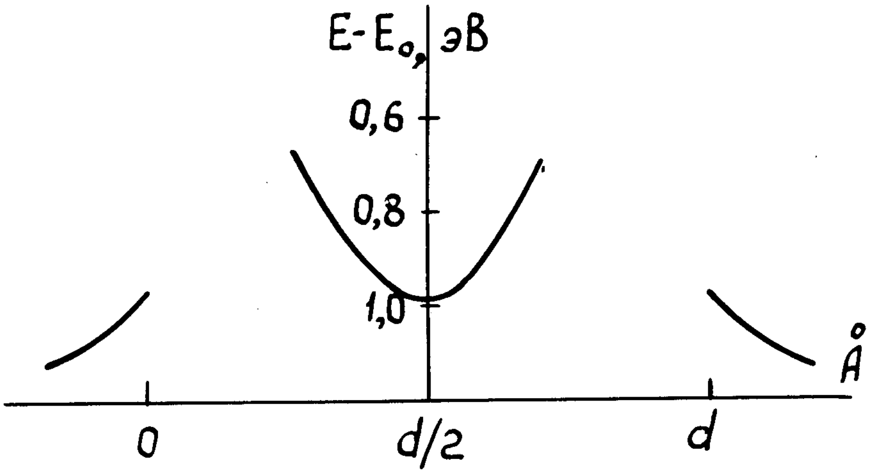

Рис. 3. Полная энергия кластера $SiHSi_4H_{12}$ как функция смещения водорода от положения равновесия (d/2) в междоузельной связецентрированной конфигурации, а также атомов Si (4 и 5) при синхронном смещении в разные стороны ($E_0 = -1450$ ат.ед. (1 ат.ед.=27.2 эВ), d = 2.35 Å).

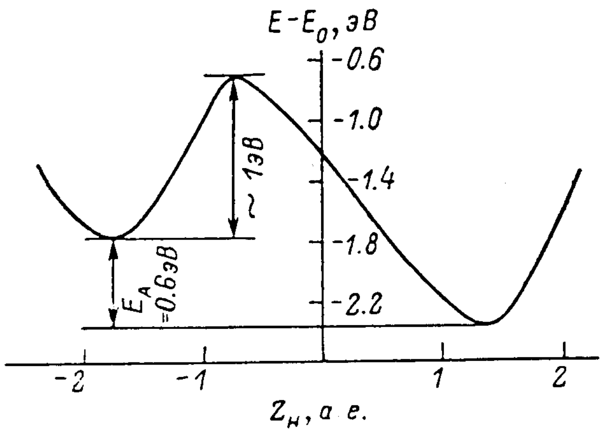

Рис. 4. Полная энергия кластера H + □ Si_4H_{12} при вариации положения H ($E_0 = -1162$ ат.ед.).

Легко видеть, что приведенные здесь рассуждения связаны с одним из возможных механизмов возникновения вакансионной модели. Однако вероятность такого процесса мала, и он не может рассматриваться как основной при рассмотрении моделей "аномального" мюония. Следует также отметить, что приведенные выше расчеты для вакансии □ Si_4H_{12} следует рассматривать только как оценочные, т.к. кластера Si_5H_{12} явно не достаточно для рассмотрения вакансионной модели и в расчет необходимо включать атомы кремния соседней координационной сферы монокристалла.

Список литературы

[1] *С.Г.Барсов, А.Л.Геталов, В.А.Гордеев, С.П.Круглов, Р.Ф.Коноплева, В.И.Кудинов, Л.А.Кузьмин, С.М.Микиртычьянц, Е.В.Минайчев, Г.Г.Мясищева, Ю.В.Обухов, Г.И.Савельев, В.Г.Фирсов, Г.В.Щербаков.* // ЖЭТФ, 1979. Т.76. С.2198; ЖЭТФ, 1980. Т.79. С.1462.

[2] *S.G.Barsov, A.L.Getalov, V.A.Gordeev, R.F.Konopleva, S.P.Kruglov, V.I.Kudinov, L.A.Kuz'min, S.M.Mikirtychyants, E.V.Minaichev, G.G.Myasishcheva, Yu.V.Obukhov, G.I.Savel'ev, V.G.Firsov, G.V.Shcherbakov.* // Hyperf.Inter., 1981. V.8. P.409.

[3] *В.А.Гордеев.* Спин-резонансная спектроскопия мюона и мюония. Докторская диссертация, 1990. 231с.

[4] *С.Г.Барсов, А.Л.Геталов, В.А.Гордеев, В.А.Евсеев, Р.Ф.Коноплева, С.П.Круглов, В.И.Кудинов, Л.А.Кузьмин, С.М.Микиртычьянц, Е.В.Минайчев, Г.Г.Мясищева, Ю.В.Обухов, Г.И.Савельев, В.Г.Фирсов, Г.В.Щербаков.* // Письма в ЖЭТФ, 1983. Т.37. С.40.

[5] *S.G.Barsov, V.G.Firsov, A.L.Getalov, V.A.Gordeev, S.P.Kruglov, V.I.Kudinov, L.A.Kuz'min, S.M.Mikirtychyants, E.V.Minaichev, G.G.Myasishcheva, Yu.V.Obukhov, G.I.Savel'ev, G.V.Shcherbakov.* // Hyperf.Inter., 1984. V.17-19. P.635.

[6] *С.Г.Барсов, А.Л.Геталов, В.А.Гордеев, В.А.Евсеев, Р.Ф.Коноплева, С.П.Круглов, В.И.Кудинов, Л.А.Кузьмин, С.М.Микиртычьянц, Е.В.Минайчев, Г.Г.Мясищева, Ю.В.Обухов, Г.И.Савельев, В.Г.Фирсов, Г.В.Щербаков.* // Письма в ЖЭТФ, 1985. Т.42. С.424.

[7] *V.A.Gordeev, Yu.V.Gorelkinskii, R.F.Konopleva, N.N.Nevinnyi, Yu.V.Obukhov, V.G.Firsov.* Preprint LNPI–1340, Leningrad, 1987. 29p.

[8] *Р.Б.Гельфанд, В.А.Гордеев, Ю.В.Горелкинский, С.А.Кутень, А.В.Мудрый, Н.Н.Невинный, А.Л.Пушкарчук, В.И.Рапопорт, А.Г.Ульяшин.* Препринт ЛИЯФ–1474, Ленинград, 1989. 36с.

[9] *Р.Б.Гельфанд, В.А.Гордеев, Ю.В.Горелкинский, Р.Ф.Коноплева, С.А.Кутень, А.В.Мудрый, Н.Н.Невинный, Ю.В.Обухов, В.И.Рапопорт, А.Г.Ульяшин, В.Г.Фирсов.* // ФТТ, 1989. Т.31. С.176.

[10] *В.А.Гордеев, Г.Л.Гуцев, Г.С.Мякенькая.* // ФТП, 1989. Т.23. С.493.