

## К ВОПРОСУ О МЕХАНИЗМЕ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ ДЕФЕКТОВ В РЕШЕТКЕ ИОННОГО КРИСТАЛЛА

А. А. ВОРОБЬЕВ, С. А. ВОРОБЬЕВ

В последнее время разрабатываются схемы возможных процессов разрушения центров окраски с участием вакансий. Некоторые способы возникновения и распространения вакансий в решетке кристалла рассматриваются в теории дислокаций и теории спекания.

Наиболее распространенной является гипотеза Я. И. Френкеля, рассматривающего перескоки катиона или аниона из одного узла решетки в другой, следствием чего является возникновение вакансии и ее перемещение по решетке в направлении, обратном движению иона.

Ниже излагается гипотеза перемещения вакансий, основанная на рассмотрении поведения несимметричного диполя в решетке, состоящего из иона в узле решетки и фиктивного заряда вакансии в соседнем узле. Несимметричность диполя обусловлена разностью масс иона и вакансии, причем эффективная масса вакансии меньше массы иона и, вероятно, зависит от некоторых условий, в частности, от кристаллографического направления, по которому происходит ее перемещение.

Ион и его вакансия будут вращаться вокруг общего центра тяжести, одновременно совершая колебания вдоль линии, соединяющей центры этих частиц. Колебания такой системы ограничены размерами свободного объема в решетке, деформированного при образовании вакансии. Когда вакансия и ион переместятся от своего исходного положения на  $180^\circ$ , тогда вакансия, в процессе линейного колебания, может перейти в положение крайнего удаления от своего партнера — иона и приблизиться к другому одноименному иону. В таком случае вакансия может потерять связь со своим прежним партнером — ионом и вновь образовать диполь с другим соседним ионом, то есть вакансия перемещается на место иона, а ион занимает место вакансии в решетке.

Но решетка кристалла существует, когда концентрация вакансии во много раз меньше концентрации ионов, поэтому мы будем наблюдать именно перемещение вакансий, а не ионов, обмен местами которых в соседних узлах не дает наблюдаемого переноса массы. Следовательно, в некоторых случаях ионные процессы нужно рассматривать как процессы, обусловленные перемещением вакансий в решетке.

Аналогичную картину можно представить и для описания перемещения электрона в решетке в некоторых случаях. Вакансия электрона, называемая дыркой, образует с электроном связанную систему, определяемую с помощью понятия экситон. Свободный электрон и дырка

не присущи нормальной, невозбужденной решетке щелочно-галогидного кристалла и являются дефектами решетки. В отличие от ионных процессов, где дефектом являлась только вакансия, в электронно-дырочных процессах следует говорить о перемещении электрона и дырки или экситона, если электрон и дырка представляют одно состояние возбуждения кристалла.

Переход вакансии от одного иона к другому обуславливает возникновение обменных сил связи в решетке между ионами. При действии рассматриваемого обменного механизма передачи вакансий вдоль направления, по которому расположены ионы одинакового знака, то есть диагоналями грани или диагоналями куба, происходит не только перемещение вакансии, но и возникновение обменных сил связи, усиливающих структуру. В одноатомных структурах рассматриваемый обменный процесс может происходить по любому кристаллографическому направлению.

Наличие градиента температуры или электрического поля создает необходимые условия для рассматриваемого процесса перемещения ионов в одну сторону, а их вакансий в другую сторону. Процесс обмена вакансиями будет затруднен при нарушении решетки примесями, дислокациями, границами блоков и другими искажениями решетки.