

94-399



объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P17-94-399

С.Е.Красавин, В.А.Осипов

О ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНА
НА КЛИНОВОЙ ДИСКЛИНАЦИИ

Направлено в журнал «Физика твердого тела»

1994

Вопрос о локализации электронов на линейных дефектах достаточно хорошо исследован как теоретически [1-8], так и экспериментально [9-11] в случае дислокаций, прежде всего прямолинейных винтовой и краевой, в металлах и полупроводниках. В настоящей работе в рамках калибровочного подхода [12] представлен теоретический анализ локализации электронных состояний в упругих материалах с ротационными топологическими дефектами - клиновыми дисклинациями. Мы рассматриваем частичную клиновую дисклинацию с малым значением индекса Франка ν , для описания которой пригодна линейная модель теории упругости.

Как было отмечено в [13], имеется существенное отличие в описании электронной структуры дисклинаций по сравнению с аналогичной задачей в теории дислокаций. А именно, в случае дисклинаций в уравнении Шредингера появляется зависимость углового момента электрона от величины индекса Франка. В приближении деформационного потенциала и эффективной массы стационарное уравнение Шредингера в потенциале, обусловленном деформационным взаимодействием, принимает вид [14]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}(\partial_A - iW_A)^2 + V(\vec{r})\right]\Psi_E(\vec{r}) = E\Psi_E(\vec{r}), \quad (1)$$

где W_A - калибровочные поля, которые прямо связаны с полями дисклинаций [12], m^* - эффективная масса электрона, и $V(\vec{r})$ - деформационный потенциал. Если линия дисклинации ориентирована вдоль оси z , то в плоскости xy задача изотропна, так что калибровочная группа есть $SO(2)$. При этом $W_A = (W_x, W_y, 0)$. Соответственно, деформационный потенциал принимает вид $V(\vec{r}) = -\frac{G}{2}SpE_{AB}$. Здесь $SpE_{AB} = E_{xx} + E_{yy}$, и G - константа деформационного взаимодействия. В (1) энергия E отсчитывается от дна зоны проводимости.

Нас интересует локализация электрона в плоскости xy , поляривационный член в (1) опущен. В работе [15] получено статическое решение полевых уравнений динамики дефектов для клиновой дисклинации с малыми значениями ν . В частности, для калибровочного поля решение имеет вихревой характер $W_x = -\nu y/r^2$, $W_y = \nu x/r^2$, $W_z = 0$. В

этом случае уравнение (1) приводится к виду

$$\left(-\frac{1}{r}\frac{d}{dr}r\frac{d}{dr} + \frac{(j-\nu)^2}{r^2} - \frac{m^*G}{\hbar^2}SpE_{AB}\right)u_E^j(r) = k^2u_E^j(r), \quad (2)$$

где мы положили $\Psi_E(\vec{r}, z) = \Psi_E(\vec{r})\Psi_E(z)$, вектор $\vec{r} = (r, \theta)$ лежит в плоскости xy , и использовали стандартное представление

$$\Psi_E(\vec{r}) = \sum_j u_E^j(r) \frac{e^{ij\theta}}{\sqrt{2\pi}}, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

где $k^2 = 2m^*E/\hbar^2$.

Для детального анализа электронных состояний в присутствии дисклинации необходимо знать явный вид деформационного потенциала. Мы рассмотрим физически интересную классическую задачу о дисклинации в цилиндре с внешним радиусом R и внутренним R_c . Для топологически неустойчивой клиновой дисклинации с $\nu \ll 1$ имеем (см., например, [16])

$$SpE_{AB} = -\frac{\nu(1-2\sigma)}{1-\sigma} \left(2 \ln \frac{r}{R} + 1 + \frac{2R_c^2}{R^2 - R_c^2} \ln \frac{R_c}{R} \right). \quad (3)$$

Здесь σ - коэффициент Пуассона. Ясно, что при $\nu < 0$ (что соответствует положительной дисклинации) эффективный потенциал в (2) является отталкивающим и локализованных состояний не возникает. Нас интересует случай $\nu > 0$ (отрицательная дисклинация).

Мы решили уравнение (2) с потенциалом (3) при $\nu > 0$ численно в широком диапазоне модельных параметров задачи ($R, G, \nu, m^*, \sigma, j$). Несмотря на то, что наличие потенциальной ямы обуславливает существование дискретных уровней в электронном спектре (задача двумерная), оказалось, что локализованные состояния возникают только при определенном выборе параметров, который обеспечивает достаточную глубину ямы. При этом имеет место сильная локализация электронных состояний вблизи линии дисклинации (происходит захват электрона ядром дефекта). В связи с этим необходимо отметить, что,

строго говоря, при описании сильно локализованных состояний перестает работать приближение эффективной массы. Поэтому мы рассматриваем наши расчеты прежде всего как качественную оценку и не решаем (2) для конкретных материалов. Тем не менее, анализ дислокационных задач показал [6], что использование данного приближения даже в тех случаях, когда оно формально не работает (в области ядра дефекта), иногда дает и количественное согласие с экспериментом.

Физически интересная область по R есть область с размерами кристаллита $R \sim 10^{-6} - 10^{-5}$ см., что соответствует мезоскопическому структурному уровню пластической деформации. Проведенные оценки показывают [16], что в этой области рождение малоугловых (частичных) одиночных дисклинаций становится энергетически выгоднее рождения дислокаций аналогичной геометрии. Отметим, что в этом случае $R/R_c \sim 10^2$, так что роль последнего члена в (3) незначительна. Наиболее характерные результаты численного расчета представлены на Рис.1 и Рис.2. Интересно отметить, что, как показал расчет, во всех случаях первое возбужденное состояние есть состояние с $j = 1$. А именно, при $\nu = 0.1$ мы получили $E_0^{j=0} = -0.66$ эВ, $E_0^{j=1} = -0.57$ эВ, $E_1^{j=1} = -0.13$ эВ, $E_1^{j=0} = 0.06$ эВ. При $\nu = 0.08$ $E_0^{j=0} = -0.48$ эВ, при $\nu = 0.06$ $E_0^{j=0} = -0.34$ эВ. В заключение подчеркнем, что если в случае дислокации наличие притягивающего деформационного потенциала всегда приводит к локализации электрона с $j = 0$ [2], то в случае дисклинации вопрос о локализации требует дополнительного анализа, поскольку согласно (2), даже при $j = 0$ имеется компенсирующий положительный вклад в эффективный потенциал.

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку данного исследования в рамках гранта N 94-02-05867. Исследование, представленное в данной публикации, частично финансировано Международным научным фондом, грант N RFR000.

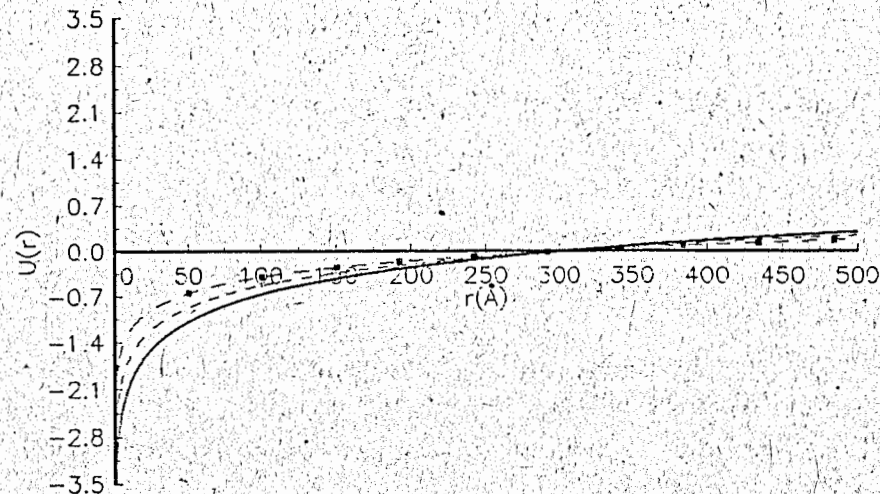


Рис.1 Эффективный потенциал в (2) как функция r : $\nu = 0.1$ - сплошная линия, $\nu = 0.08$ - штрихованная линия, $\nu = 0.06$ - помечена квадратами. Набор параметров: $R = 5 \times 10^{-6}$ см, $m^* = 5 \times 10^4$ эВ, $G = 10$ эВ, $\sigma = 0.41$, $j = 0$.

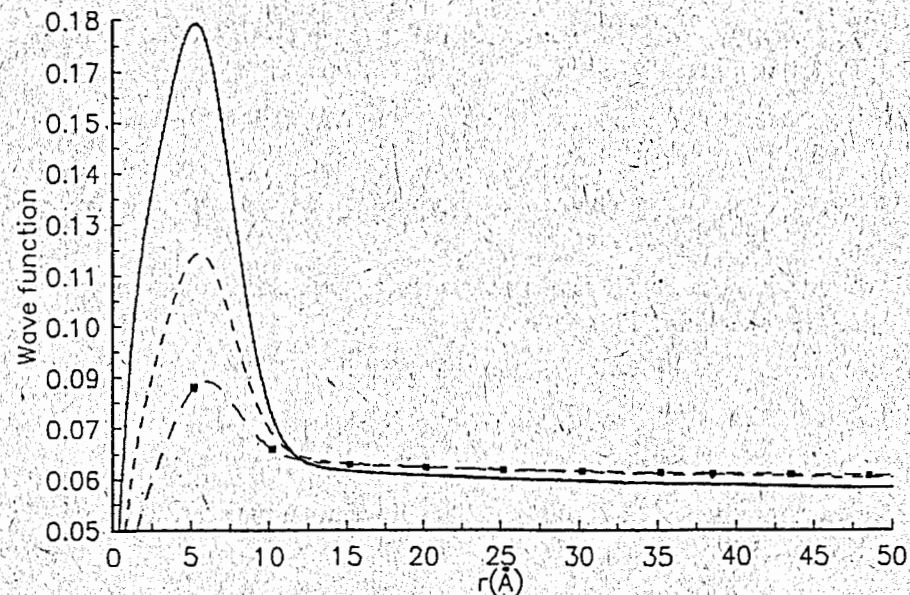


Рис.2 Нормированные волновые функции основного состояния при $\nu = 0.1$ - сплошная линия, $\nu = 0.08$ - штрихованная линия, $\nu = 0.06$ - помечена квадратами. Набор параметров, как и на рис.1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лифшиц И.М., Пушкарров Х. // Письма в ЖЭТФ. 1970. Т.11. В.9. С.456-459.
2. Косевич А.М. // ФНТ. 1978. Т.4. N7. С.902-913.
3. Воронов В.П.; Косевич А.М. // ФНТ. 1980. Т.6. N3. С.371-375.
4. Молоцкий М.И., Ростовцев В.С. // ФТТ. 1982. Т.24. В.9. С.2564-2568.
5. Варданян Р.А., Киракосян Г.Г., Кравченко В.Я. // ФТТ. 1988. Т.30. В.12, С.3565-3570.
6. Гольдфарб М.В., Молоцкий М.И., Шмурак С.З. // ФТТ. 1990. Т.32. В.8, С.2398-2402.
7. Шикин В.Б., Шикина Н.И. // ФТТ. 1988. Т.30, В.5, С.1297-1304.
8. Кусов А.А., Клингер М.И., Закревский В.А. // ФТТ. 1989. Т.31. В.7, С.67-69.
9. Коллюбякин А.И., Осипьян Ю.А., Шевченко С.А. // ЖЭТФ. 1979. Т.77. В.3 (9), С.975-988.
10. Коллюбякин А.И., Осипьян Ю.А., Шевченко С.А. // ЖЭТФ. 1987. Т.93. В.7, С.248-254.
11. Гончаров В.А., Осипьян Ю.А., Шевченко С.А. // ФТТ. 1987. Т.29. В.7, С.1928-1936.
12. Кадич А., Эделен Д. Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций. М.: Мир. 1987. 168С.
13. Osipov V.A. // Physica A. 1991. V.175. P.369-382.
14. Osipov V.A. // J.Phys.A:Math.Gen. 1993. V.26. P.1375-1383.
15. Osipov V.A. // Physics Letters A. 1994. V.193. N1. P.97-101.
16. Владимиров В.И., Романов А.Е. // Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука. 1986. 223С.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 октября 1994 года.