Low Temperature Physics/Физика низких температур, 2011, т. 37, № 9/10, с. 1011–1018

Осцилляции перегибов на дислокационных линиях в кристаллах и низкотемпературные транспортные аномалии как «паспорт» свежевведенных дефектов

Л.П. Межов-Деглин[1], С.И. Мухин[1,2]

[1]*Институт физики твердого тела РАН*
ул. Акад. Осипьяна, 2, г. Черноголовка, 142432, Россия

[2]*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»*
Ленинский пр., 4, г. Москва, 119049, Россия
E-mail: sergeimoscow@online.ru

Статья поступила в редакцию 28 марта 2011 г.

Обсуждается возможная интерпретация экспериментальных данных о низкотемпературных транспортных аномалиях в слабо деформированных металлических кристаллах, приготовленных из особо чистых свинца, меди и серебра, а также в кристаллах ^{4}He в свете представленной ранее теоретической картины дислокаций с динамическими перегибами. В случае чистых металлов теоретические предсказания дают общую картину взаимодействия электронов проводимости в образце со свежевведенными дислокациями, содержащими динамические перегибы («кинки») в потенциальном рельефе Пайерлса. В поле случайных напряжений, возникающих при пластической деформации образца, перегибы на дислокационной линии образуют набор одномерных осцилляторов в потенциальных ямах различной формы. В области низких температур, при достаточно малой плотности дефектов, пиннингующих перегибы, неупругое рассеяние электронов на перегибах должно приводить к отклонениям от закона Видемана–Франца. В частности, неупругое рассеяние на перегибах должно приводить к квадратичной зависимости от температуры теплопроводности металлического образца вдоль преимущественных направлений осей дислокаций. В нормальной к оси дислокации плоскости преобладает упругое рассеяние электронов на большие углы. Пиннинг перегибов точечными дефектами или дополнительными дислокациями, так же, как и отжиг образца, приводящий к исчезновению перегибов, должен вызывать подавление транспортных аномалий. Таким образом, интервал энергий для спектра колебаний перегибов, ограниченный характерной амплитудой рельефа Пайерлса, является «паспортом истории деформации» каждого конкретного образца. Например, в меди ему соответствует область температур/энергий порядка 1 К. Планируется также обсуждение в отдельной публикации применимости механизма рассеяния фононов на подвижных дислокационных перегибах и пиннинг перегибов примесями для объснения аномалий фононной теплопроводности кристаллов ^{4}He и деформированных кристаллов чистого свинца в сверхпроводящем состоянии.

Обговорюється можлива інтерпретація експериментальних даних щодо низькотемпературних транспортних аномалій в слабо деформованих металевих кристалах, які приготовано з особливо чистих свинцю, міді і срібла, а також в кристалах ^{4}He у світі поданої раніше теоретичної картини дислокацій з динамічними перегинами. У разі чистих металів теоретичні передбачення дають загальну картину взаємодії електронів провідності у зразку з тільки що введеними дислокаціями, що містять динамічні перегини («кінки») у потенціальному рельєфі Пайєрлса. У полі випадкових напруг, які виникають при пластичній деформації зразка, перегини на дислокаційній лінії утворюють набір одновимірних осциляторів у потенціальних ямах різної форми. У області низьких температур, при досить малій щільності дефектів, які пінінгують перегини, непружне розсіяння електронів на перегинах повинне призводити до відхилень від закону Відемана–Франца. Зокрема, непружне розсіяння на перегинах повинне призводити до квадратичної залежності від температури теплопровідності металевого зразка уздовж переважних напрямів осей дислокацій. У нормальній до вісі дислокації площині переважає пружне розсіяння електронів на великі кути. Пінінг перегинів точковими дефектами або додатковими дислокаціями, також, як і відпал зразка, який призводить до зникнення перегинів, повинен викликати пригнічення транспортних аномалій. Таким чином, інтервал енергій для спектра коливань перегинів, який обмежено характерною амплітудою рельєфу Пайєрлса, є «паспортом історії деформації» кожного конкретного зразка. Наприклад, в міді йому відповідає область температур/енергій близько 1 К. Планується також обговорення в окремій публікації придатності механізму розсіяння фононів на рухливих дислокаційних перегинах та пінінгу перегинів домішками для пояснення аномалій фононної теплопровідності кристалів ^{4}He і деформованих кристалів чистого свинцю у надпровідному стані.

PACS: **72.10.–d** Теория электронного переноса; механизмы рассеяния;
72.15.Eb Электропроводность и теплопроводность в кристаллических металлах и сплавах;
74.72.–h Купратные сверхпроводники;
75.10.–b Общая теория и модели магнитного упорядочения;
61.72.Lk Линейные дефекты: дислокации, дисклинации.

Ключевые слова: низкие температуры, кинки на дислокационных линиях, потенциальный рельеф Пайерлса, закон Видемана–Франца.

Введение

Эта статья подготовлена специально для номера журнала «Физика низких температур», посвященного юбилею выдающегося ученого В.Г. Песчанского, который внес существенный вклад в развитие современной теории кинетических явлений в металлах. Авторы благодарны Редколлегии журнала за приглашение принять участие в этом выпуске.

Измерения кинетических коэффициентов монокристаллов металлов высокой чистоты и с низким содержанием дефектов решетки при низких температурах открыли принципиальные возможности изучения взаимодействия электронов проводимости с дозированно вводимыми дефектами. Экспериментальные исследования разных лет [1–4] и более поздние работы [5–9] привели к обнаружению особенностей в поведении кинетических коэффициентов совершенных металлических образцов после введения в них относительно малого количества дислокаций (10^7–10^8 см$^{-2}$) при слабой пластической деформации. Существенное отклонение температурной зависимости теплопроводности образцов при гелиевых температурах от линейной зависимости свидетельствовало о проявлении неупругого рассеяния электронов на колебаниях с мягкой модой, которое подавлялось последующим отжигом образца либо повышением на порядок плотности введенных дислокаций до (10^9 см$^{-2}$) и более [3,4]. При этом электропроводность образцов при тех же температурах всегда ограничивалась упругим рассеянием электронов на примесях и дефектах и монотонно падала с повышением концентрации дислокаций [3–6]. Предложенное в работе [10] объяснение этого явления рассеянием электронов на связанных с дислокациями квазилокальных колебаниях требует допущения об аномальной малости величины линейного натяжения дислокационной линии.

В работе [11] был предложен иной механизм неупругого рассеяния электронов, вносимый мобильными перегибами (кинками) на свежевведенных дислокациях, в котором существование мягкой моды не связано с малостью линейного натяжения дислокационной линии, причем основная плотность колебательных состояний перегибов сконцентрирована в субкельвиновом диапазоне частот. Предложенные в [11] полуэвристические оценки динамических характеристик кинков, включая «легкую массу» и «субкельвиновый» порядок потенциальных барьеров для осциллирующих перегибов на дислокационных линиях в металле, позднее были заново рассчитаны и подтверждены в [12] методами классической молекулярной динамики для конкретного случая винтовых дислокаций в меди. Тем самым предсказываемое теорией [11] аномальное поведение кинетических коэффициентов металлических кристаллов со свежевведенными дислокациями, содержащими не запинингованные подвижные перегибы [11], получило еще одно косвенное подтверждение в дополнение к подробной экспериментальной проверке, произведенной в работе [5].

В реальном кристалле энергетический рельеф для дислокации в плоскости скольжения имеет вид гофрированной поверхности благодаря наличию потенциала Пайерлса, связанного с периодичностью решетки [13]. Это приводит к существованию перегибов на дислокационной линии, когда различные части дислокации лежат в разных параллельных долинах потенциала Пайерлса [13]. В металлах типа меди в отсутствие внутренних напряжений уединенные перегибы могут двигаться вдоль дислокационной линии как квазичастицы с некоторой эффективной массой, определяемой высотой барьера Пайерлса, линейной плотностью и линейным натяжением дислокационной линии [14]. Упругая энергия отдельного перегиба в таких кристаллах составляет сотни градусов Кельвина [13]. Поэтому при гелиевых температурах термодинамически равновесные перегибы в кристалле без напряжений должны отсутствовать. Однако могут существовать неравновесные перегибы, захваченные потенциальными ямами, которые образуются в местах смены знака случайных напряжений на дислокационной линии. При низких температурах вероятность туннелирования перегиба из такой ямы экспоненциально мала [15].

В следующем разделе работы рассмотрены колебания отдельных перегибов, а также перегибов на участках дислокационных линий, не параллельных направлению долин потенциала Пайерлса. На таких участках может быть энергетически выгодно образование последовательностей перегибов одного знака с линейной плотностью n_k, удовлетворяющей условию [13,16] $an_k \approx \theta$, где a — период следования долин потенциала Пайерлса, θ — угол между направлением вдоль долины и данным отрезком дислокационной линии.

Электроны проводимости неупруго рассеиваются на деформационном потенциале, создаваемом колеблющимися перегибами.

Существенно, что, как показано в разд. 1, частоты колебаний перегибов в металле (в температурных единицах) не превышают величину ω_m порядка одного градуса Кельвина. Частота колебаний перегиба определяется модулем градиента локального напряжения. Наибольшие частоты колебаний имеют близко расположенные перегибы на наклонных участках дислокационных линий. Частота $\omega_m \sim 1$ К достигается при наиболее плотной «упаковке» перегибов, когда масштаб изменения поля напряжений порядка ширины отдельного перегиба l_k — вдоль дислокационной линии [17].

В разд. 2 приводится сделанный ранее [11] вывод теплопроводности металлического кристалла с перегибами на дислокационных линиях, идущих вдоль преимущественного направления в кристалле, в области температур $T \gg \omega$, где ω — верхняя граница частот колебаний перегибов. В таких условиях последовательные акты неупругого рассеяния электрона перегибами приводят к диффузионному изменению его энергии. В вычислениях учитывается также упругое рассеяние электронов на деформационном потенциале перегибов и прямолинейных участков дислокаций. Температура считается достаточно низкой, чтобы можно было пренебречь электрон-фононным рассеянием.

Сопоставление полученных результатов с экспериментальными данными [1–4], а также оценки значений параметров образцов, при которых влияние перегибов должно быть наиболее отчетливым, производятся в последнем разделе работы.

1. Колебания перегибов на дислокационной линии в кристалле

Для описания перегибов на дислокационной линии используем модель упругой струны в периодическом потенциале [14]. Для дислокации (краевой) вдоль оси z с вектором Бюргерса вдоль оси x (т.е. плоскость скольжения совпадает с плоскостью xz) имеем следующее уравнение движения:

$$E_0\partial^2 x/\partial z^2 = (2\pi\alpha/a)\sin(2\pi x/a) - b\sigma_{xz}(z) + m_0\partial^2 x/\partial t^2, \quad (1)$$

где $x(z,t)$ — координата дислокации в плоскости скольжения как функция от времени и от координаты вдоль оси z; E_0 — энергия дислокации на единицу длины («жесткость» дислокационной линии); m_0 — линейная плотность эффективной массы; $\sigma_{xz}(z)$ — компонента тензора случайных напряжений в окрестности дислокационной линии (указана явно лишь ее зависимость от z); α — высота барьера Пайерлса (размерность — энергия на единицу длины); a — период следования долин потенциала Пайерлса; b — модуль вектора Бюргерса дислокации. В (1) используется простейшее приближение для потенциала Пайерлса, пригодное для меди [14]. При условии $\sigma_{xz} = 0$ перегиб описывается стационарным решением (1):

$$x(z) = \frac{2a}{\pi}\operatorname{arctg}\left\{\exp\left[\pm\frac{2\pi}{a}(z-z_0)\nu^{1/2}\right]\right\}, \quad (2)$$

где $\nu = \alpha E_0^{-1}$ является малой величиной (для меди $\nu \sim 10^{-4}$ [13,14]). Функционал энергии для дислокации в потенциале Пайерлса в принятой модели имеет вид [14]

$$W = \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{m_0}{2}\left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)^2 + \frac{1}{2}E_0\left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)^2 + \alpha\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right) - b\sigma_{xz}x\right]dz, \quad (3)$$

где уже введен член с полем напряжений $\sigma_{xz}(z)$. Считая поле $\sigma_{xz}(z)$ плавно изменяющимся на масштабах порядка ширины перегиба $l_k \sim a/\nu^{1/2}$, которая определяется формулой (2), получаем из (3) эффективный гамильтониан для перегиба в поле напряжений $\sigma_{xz}(z)$ в окрестности точки z_0 на оси дислокации, где $\sigma_{xz}(z)$ изменяет знак*

$$H = -\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{M\omega^2}{2}(z-z_0)^2, \qquad M = (4am_0/\pi)\nu^{1/2}; \qquad \omega^2 = abM^{-1}\,|\partial\sigma_{xz}(z_0)/\partial z|. \quad (4)$$

Рассмотрим случай дислокаций, ориентированных преимущественно вдоль одного направления долин потенциала Пайерлса (направим вдоль него ось z системы координат). В такой системе градиент $\sigma_{xz}(z)$ по z создается дислокациями, идущими под углом к оси z (концентрация других дефектов в кристалле предполагается достаточно малой). Если этот угол не превышает некоторой величины θ, то наименьший масштаб изменения поля $\sigma_{xz}(z)$ (создаваемого другими дислокациями в окрестности данной) вдоль оси z

* далее использована система физических единиц, в которой $\hbar = 1$ и $k_B = 1$.

имеет порядок величины $l \sim n_d^{-1/2}/\theta$, где n_d — плотность дислокаций. Характерная величина $\sigma_{xz}(z)$ равна [13] $\sigma_{xz} \sim Gbn_d^{1/2}$, где G — упругий модуль сдвига кристаллической решетки. Поэтому для частоты колебаний уединенного перегиба согласно (4) получаем оценку

$$\omega \sim [M^{-1} Gabn_d\theta]^{1/2}. \qquad (5)$$

Стабильность дислокационной линии с перегибами достигается при следующем условии [13]: $Gbn_d^{1/2} < \tau_p$, где τ_p — напряжение Пайерлса (равное $2\pi\alpha/ab$ в модели (1)–(4), так что $\tau_p/G \sim \nu$). Следовательно, $n_d < \nu^2 b^{-2} \sim 10^8$ см$^{-2}$, что соответствует экспериментальной ситуации [3,4]. Теперь из (5) находим

$$\omega \sim \theta^{1/2}\nu^{3/4}\Theta_D \sim \theta^{1/2}\, 0{,}1\,\text{К}, \qquad (6)$$

где Θ_D — характерная дебаевская частота кристаллической решетки. Как ясно из Введения, в системе дислокаций, близкой к равновесию, где отклонения от направления долин Пайерлса связаны лишь с наличием перегибов на дислокационной линии, $\theta \lesssim \theta_m \sim a/l_k \sim \nu^{1/2}$.

Рассмотрим теперь колебания последовательно расположенных перегибов одного знака с линейной плотностью n_k на данном участке дислокации. Из равенства (3) находим выражение для силы F_z, действующей на перегиб вдоль оси z в области плавного изменения поля $\sigma_{xz}(z)$:

$$F_z = \mp ab\sigma_{xz}(z), \qquad (7)$$

где выбор знака зависит от знака в показателе экспоненты в формуле (2). Сила отталкивания между перегибами одного знака на краевой дислокации равна [13]

$$\begin{aligned} &F_{12} = Sa^2/2l_{12}^2,\\ &S = Gb^2(1-2\sigma)/4\pi(1-\sigma),\\ &l_{12} = |z_1 - z_2|, \end{aligned} \qquad (8)$$

где σ — коэффициент Пуассона. Используя равенства (7) и (8), получаем систему уравнений для равновесных координат z_n последовательно расположенных перегибов одного знака на участке дислокационной линии в области, где величина поля $\sigma_{xz}(z)$, создаваемого всеми другими дислокациями в окрестности данной, проходит через нуль $(\sigma_{xz}(z) = \sigma_0 z/l)$:

$$ab\sigma_0 z_n/l = Sa^2[(z_n - z_{n-1})^{-2} - (z_{n+1} - z_n)^{-2}]/2, \qquad (9)$$

где $\sigma_0 \sim Gbn_d^{1/2}/\theta$. В (9) не выписаны уравнения для крайних перегибов в последовательности $(n = -N, N)$, поскольку предполагается, что $1 \ll N \ll n_k$. Решение уравнений (9) имеет вид

$$\begin{aligned} &z_n - z_{n-1} = z_0[1 - (z_0^3\sigma_0 b/2Sal)n^2]^{-1},\\ &1 \ll n \ll (Sal/z_0^3\sigma_0 b)^{1/2},\\ &z_n - z_{n-1} = 1/2\, z_0[2/3 - (z_0^3\sigma_0 b/2Sal)^{1/2}\,|n|]^{-1/2},\\ &n < 2/3(Sal/z_0^3\sigma_0 b)^{1/2}, \end{aligned} \qquad (10)$$

где $z_0 = \lim_{n\to\infty}|z_n - z_{n-1}|$. Для оценки максимальной величины N положим в (10) $z_0 \gtrsim l_k$. Тогда находим

$$\begin{aligned} N_{\max} &\sim (Sal/l_k^3\sigma_0 b)^{1/2} \sim \nu^{3/4}/a(n_d\theta)^{1/2} >\\ &> \nu^{-1/4}\theta^{-1/2} \sim 10\,\theta^{-1/2}, \end{aligned} \qquad (11)$$

где для n_d использована оценка: $n_d < \nu^2 b^{-2}$, полученная выше. Максимальная длина отдельной последовательности перегибов одного знака оказывается при этом равной

$$L_{\max} \sim N_{\max} l_k \sim n_d^{-1/2}\nu^{1/4}\theta^{-1/2}. \qquad (12)$$

В случае, если максимальный угол отклонения дислокационных осей от оси z есть $\theta_m \sim a/l_k$, из (11) и (12) получаем

$$N_{\max} \sim \nu^{-1/2} \sim 10^2, \qquad L_{\max} \sim n_d^{-1/2}.$$

Заметим, что оценки (11), (12) подтверждают справедливость неравенства $N \ll ln_k$, позволяющего линеаризовать $\sigma_{xz}(z)$ в левой стороне уравнения (9). Из (10)–(12) следует также, что на большей части последовательности перегибов расстояние между соседними перегибами можно считать постоянным, $z_0 \sim n_k^{-1}$.

Линеаризуя (9) по малым отклонениям перегибов u_n от их положений равновесия, получаем уравнения колебаний:

$$M\frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = \frac{Sa^2}{l_0^3}(u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n) - \frac{ab\sigma_0}{l}u_n, \qquad (13)$$

где $l_0 = n_k^{-1}$, а M определена в (4). Отсюда находим спектр колебаний длинной цепочки перегибов:

$$\omega_k^2 = \frac{2Sa^2}{Ml_0^3}(1 - \cos k) + \frac{ab\sigma_0}{Ml}, \quad -\pi \le k \le \pi. \qquad (14)$$

Из формулы (14) с учетом (8) следует оценка для максимальной частоты колебаний перегибов [18,19] $(n_k \sim l_k^{-1})$:

$$\omega_m \sim (Sa^2/Ml_k^3)^{1/2} \sim \nu^{1/2}\Theta_D \sim 1\,\text{К}. \qquad (15)$$

В разд. 2 показано, что при выполнении условия $\omega \ll T$ для частот колебаний уединенных перегибов и перегибов в последовательностях вклад в теплопроводность, обусловленный рассеянием на них электронов, зависит лишь от полной средней линейной плотности перегибов $\bar{n}_k$ на дислокационной линии. Эта плотность определяется как частотой следования на дислокационной линии наклонных участков дислокации, так и вероятностью обнаружения уединенного перегиба. Далее $\bar{n}_k$ фигурирует в настоящей работе в качестве феноменологического параметра, величина которого зависит, по-видимому, от режима приготовления и обработки образца. Таким образом, $\bar{n}_k$ входит в «паспорт» образца в определенном выше смысле.

2. Теплопроводность вдоль осей дислокаций и в поперечной плоскости

Кинетическое уравнение для функции распределения n_p электронов проводимости, которые рассеиваются на дислокациях с перегибами, при наличии градиента температуры ∇T имеет вид

$$-\frac{\varepsilon_{\mathbf{p}}}{T}\nabla T\frac{\partial n_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}}=\int\frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}w(\mathbf{p},\mathbf{p}')K(\varepsilon_{\mathbf{p}}-\varepsilon_{\mathbf{p}'};q_x,q_z)\times$$

$$\times\{n_{\mathbf{p}'}(1-n_{\mathbf{p}})-\exp[(\varepsilon_{\mathbf{p}}-\varepsilon_{\mathbf{p}'})/T]n_{\mathbf{p}}(1-n_{\mathbf{p}'})\},\qquad(16)$$

где

$$w(\mathbf{p},\mathbf{p}')=n_d a(\mathbf{p},\mathbf{q}),\qquad \mathbf{p}'=\mathbf{p}+\mathbf{q},\qquad(17)$$

$$K(\omega;q_x,q_z)=L^{-1}\int dzdz'dt\exp[iq_z(z-z')+i\omega t]\times$$

$$\times\langle\langle\exp(-iq_x x(z,0))\exp(iq_x x(z',t))\rangle\rangle.\qquad(18)$$

В (16)–(18) использованы обозначения: $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ — энергия электрона, отсчитанная от уровня химического потенциала; $a(\mathbf{p},\mathbf{q})$ определяется фурье-образом деформационного потенциала, создаваемого дислокацией в металле [20], причем в изотропной модели для $q\ll p\sim p_F a(\mathbf{p},\mathbf{q})$ имеет вид $F(\mathbf{p};q_x,q_y)/q^4$, где $F(\mathbf{p};q_x,q_y)$ есть квадратичная форма по q_x,q_y, коэффициенты которой зависят от компонент единичного вектора $\mathbf{p}/p$; L — длина дислокации. Знак $\langle\langle...\rangle\rangle$ в (18) означает усреднение по Гиббсу, а также по конфигурациям перегибов; форма дислокационной линии в плоскости скольжения $x(z,t)$ зависит от времени благодаря колебаниям перегибов.

Для оценки электронной теплопроводности кристалла вдоль преимущественного направления дислокационных линий $\chi_{\|}$ и в нормальной к нему плоскости $\chi_{\perp}$ линеаризуем правую сторону в (16) по малой добавке к равновесной функции распределения электронов $n^0(\varepsilon_{\mathbf{p}})$:

$$\delta n_{\mathbf{p}}=-[\partial n^0(\varepsilon_{\mathbf{p}})/\partial\varepsilon_{\mathbf{p}}]\Psi_{\mathbf{p}}.$$

Используя вариационный принцип [21], получаем

$$\chi_i^{-1}=\left\{m^2\int d\omega\,d\varepsilon\,dq_z\,dp_z\,d\varphi\,d\varphi' w(1-n^0(\varepsilon))n^0(\varepsilon-\omega)\times\right.$$

$$\left.\times(\Psi_{\mathbf{p}}-\Psi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})^2K(\omega;q_x,q_z)\right\}\times$$

$$\times\left\{m\int v_{\mathbf{p}}^i\varepsilon\Psi_{\mathbf{p}}\frac{\partial n^0(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}2d\varepsilon\,dp_z\,d\varphi\right\}^{-2},\qquad(19)$$

где $\chi_i^{-1}=\chi_{\|}^{-1},\chi_{\perp}^{-1}$, причем в первом случае выбираем пробную функции $\Psi_{\mathbf{p}}\sim\varepsilon_{\mathbf{p}}p_z$ и заменяем $v_{\mathbf{p}}^i$ в (19) на $v_{\mathbf{p}}^z$, во втором случае используем пробную функцию $\Psi_{\mathbf{p}}\sim\varepsilon_{\mathbf{p}}p_x$ и подставляем $v_{\mathbf{p}}^i=v_{\mathbf{p}}^x$. В (19) произведен также переход от интегрирования по $d^3\mathbf{p}d^3\mathbf{p}'$ к интегрированию по dp_zdq_z, по энергиям $\varepsilon,\varepsilon'=\varepsilon-\omega$ — до столкновения и после, а также по полярным углам φ и φ' соответственно в плоскостях $\langle p_xp_y\rangle$ и $\langle p_{x'}p_{y'}\rangle$; $w=w(\mathbf{p},\mathbf{p}+\mathbf{q})$, — эффективная масса электрона на поверхности Ферми в изотропной модели.

Неупругий вклад в $\chi_{\perp}^{-1}$ и $\chi_{\|}^{-1}$ получается из общего выражения (19):

$$\chi_i^{-1}=\left\{m^2\int d\omega\,d\varepsilon\,dq_z\,dp_z\,d\varphi\,d\varphi' w(1-n^0(\varepsilon))n^0(\varepsilon-\omega)\times\right.$$

$$\left.\times p_z^2\omega^2K(\omega;q_x,q_z)\right\}\left\{\int p_z^2\varepsilon^2\frac{\partial n^0(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}2d\varepsilon\,dp_z\,d\varphi\right\}^{-2}.\qquad(20)$$

Для вычисления (20) удобно ([10]) сначала вычислить величину $\tilde{K}(\omega,q_x)$:

$$\tilde{K}(\omega,q_x)=\int K(\omega;q_x,q_z)dq_z=$$

$$=(2\pi/L)\int dzdt\exp(i\omega t)\langle\langle\exp(-iq_x x(z,0))\exp(iq_x x(z,t))\rangle\rangle.\qquad(21)$$

В (21) использовано определение (18). Выражение для $x(z,t)$ при условии $n_k\ll l_k^{-1}$ имеет вид

$$x(z,t)=\sum_n x_n(z-z_n(t)),\qquad(22)$$

где n-перегиб в момент t описывается одной из функций (2) в зависимости от его ориентации на дислокационной линии, центрированной в точке $z_n(t)=z_{0n}+u_n(t)$, где $u_n(t)$ — отклонение от положения равновесия. Для вычисления (21) выражение (22) представляем в виде

$$x(z,t)=\sum_n\int\frac{dk}{2\pi}\tilde{x}_n(k)\exp\{ik(z-z_{0n})-iku_n(t)\},\qquad(23)$$

где $\tilde{x}_n(k)$ — фурье-образ $x_n(z)$. Уравнения для $u_n(t)$ в случае уединенных перегибов получаются из (4), а для перегибов в цепочке одного знака задаются соотношениями типа (13). Ниже $\tilde{K}(\omega,q_x)$ вычисляется на двух возможных интервалах значений ω_0 — верхней границы частот колебаний перегибов в конкретной конфигурации: а) $\omega_0 \ll \omega_T \equiv (T/Ml_k^2)^{1/2}$ ($\sim 0{,}1$ К при $T \sim 1$ К) и б) $\omega_T \ll \omega_0 \ll T$. На интервале а) любой перегиб рассеивает электрон как «свободная частица» с массой M, причем максимальный передаваемый импульс $q_m \sim l_k^{-1}$, а передаваемая энергия $|\delta\varepsilon| \sim \omega_T$. Поэтому в случае а) получаем

$$\tilde{K}(\omega, q_x) = 2\pi^2 (M / 2\nu^{1/2} n_k^a a q_x^2 T)^{1/2} \times$$
$$\times \exp\left[-\frac{q_x^2 a n_k^a \nu^{1/2}}{2\pi M T} \left(\frac{\pi M \omega}{2\nu^{1/2} n_k^a a q_x^2} + 1 \right)^2 \right], \qquad (24)$$

где n_k^a означает среднюю линейную плотность перегибов на дислокационной линии, частоты колебаний которых не превышают величину ω_0, удовлетворяющую неравенству а) (при этом учитываются как перегибы в цепочках одного знака, так и уединенные перегибы).

В случае б) имеем

$$\tilde{K}(\omega, q_x) = (2\pi)^2 \delta(\omega) + \frac{8\pi\nu^{1/2} q_x^2 a}{ML} \left\{ \sum_i n_i \int_0^{2\pi} \frac{1}{\omega_{ik}} \times \right.$$
$$\left. \times [(N_{ik}+1)\delta(\omega_{ik}+\omega) + N_{ik}\delta(\omega_{ik}-\omega) - (2N_{ik}+1)\delta(\omega)] \frac{dk}{2\pi} \right\}. \qquad (25)$$

В выражении (25) $\sum_i$ означает суммирование по различным последовательностям перегибов одного знака на дислокационной линии; n_i — число перегибов в i-й последовательности; ω_{ik} дается формулой (14), где l_0 заменяется на l_i — расстояние между соседними перегибами в i-й последовательности; $N_{ik} \equiv N(\omega_{ik})$, где

$$N(\omega) = [\exp(\omega / T) - 1]^{-1}.$$

При подстановке $\tilde{K}(\omega, q_x)$ в виде (25) в формулу (20) все частоты колебаний перегибов входят в результат лишь в комбинациях: $\omega_{ik} / \mathrm{sh}(\omega_{ik} / 2T)$, так что в силу условия $\omega_{ik} \ll T$ в главном приближении по ω_{ik}/T вклады в χ_u^{-1} от рассеяния электронов на перегибах из различных последовательностей и уединенных перегибах отличаются лишь полным числом перегибов этих двух типов. Таким образом, получаем

$$\chi_u^{-1} = A_0 n_d \bar{n}_k T^{-2}, \quad A_0 \sim a^2 (\nu^{1/2}) / M, \qquad (26)$$

где $\bar{n}_k$ — средняя линейная плотность перегибов на дислокационной линии. Помимо (26) $\chi_\perp^{-1}$ содержит еще одно слагаемое, $\tilde{\chi}_\perp^{-1}$, которое также получается непосредственно из общего соотношения (19) и определяется рассеянием электронов на большие углы в перпендикулярной к дислокационным осям плоскости:

$$\tilde{\chi}_\perp^{-1} = \left\{ m^2 \int d\omega\, d\varepsilon\, dq_z\, dp_z\, d\varphi\, d\varphi' w(1 - n^0(\varepsilon)) n^0(\varepsilon - \omega) \times \right.$$
$$\left. \times q_x^2 \varepsilon^2 K(\omega; q_x, q_z) \right\} \left\{ \int (p_x^2 / m) \varepsilon_{\mathbf{p}}^2 (\partial n^0 / \partial \varepsilon_{\mathbf{p}}) 2 d^3\mathbf{p} \right\}^{-2} =$$
$$= B n_d T^{-1} - A_0' n_d \bar{n}_k T^{-2}, \quad B \sim a^3, \qquad (27)$$

где $A_0' \sim A_0$, $A_0'/A_0 < 1$. При получении результата (27) опять использованы выражения (24), (25) для $\tilde{K}(\omega, q_x)$. Складывая (20) и (27), находим

$$\chi_\perp^{-1} = B n_d T^{-1} + A n_d \bar{n}_k T^{-2}, \quad A = A_0 - A_0'. \qquad (28)$$

При температуре $T \sim 1$ К отношение второго слагаемою к первому в (28) порядка: $a\bar{n}_k \Theta_D^2 / \varepsilon_F T < \nu^{1/2} \sim \sim 10^{-2}$.

В направлении вдоль дислокаций рассеяние на большие углы отсутствует. Максимальное изменение z-компоненты импульса электрона q_m определяется шириной перегиба вдоль дислокационной линии: $q_m \sim l_k^{-1}$. Соответствующий вклад в $\chi_\parallel^{-1}$ также получается из (19) и равен

$$\tilde{\chi}_\parallel^{-1} = \left\{ m^2 \int d\omega\, d\varepsilon\, dq_z\, dp_z\, d\varphi\, d\varphi' w(1 - n^0(\varepsilon)) n^0(\varepsilon - \omega) \times \right.$$
$$\left. \times q_z^2 \varepsilon^2 K(\omega; q_x, q_z) \right\} \left\{ \int p_z^2 \varepsilon^2 (\partial n^0 / \partial \varepsilon) 2 d\varepsilon\, dp_z\, d\varphi \right\}^{-2}. \qquad (29)$$

Для оценки $\tilde{\chi}_\parallel^{-1}$ воспользуемся определением (18), в котором будем считать перегибы неподвижными. Тогда находим

$$K_e(\omega; q_x, q_z) \approx 2\pi\delta(\omega) \frac{1}{L} \int dz dz' \exp[i q_z (z - z')] \times$$
$$\times \langle\langle \exp\{i q_x [x(z', 0) - x(z, 0)]\} \rangle\rangle. \qquad (30)$$

Записывая $x(z, 0)$ в виде (23) и проводя конфигурационное усреднение, находим

$$K_e(\omega; q_x, q_z) \approx 2\pi\delta(\omega) \times$$
$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-q_x^2 a^2 z^2 (\bar{n}_k^2 + 2\bar{n}_k \nu^{1/2} / a) - i q_z z] dz \approx$$
$$\approx 2\pi\delta(\omega) (\pi / 2a\bar{n}_k q_x^2 \nu^{1/2})^{1/2} \exp[-q_z^2 / 8\nu^{1/2} a \bar{n}_k q_x^2]. \qquad (31)$$

Подставляя (31) в (29), находим

$$\tilde{\chi}_\parallel^{-1} = \tilde{B} n_d \bar{n}_k T^{-1}, \qquad \tilde{B} \sim a^4 \nu^{1/2}. \qquad (32)$$

Вклад $\Delta\chi_\parallel^{-1}$ в $\chi_\parallel^{-1}$ благодаря упругому рассеянию на дислокациях с плотностью $\tilde{n}_d$, идущих под углом θ: $\theta_m < \theta \ll 1$, можем оценить, воспользовавшись результатом (27):

$$\Delta\chi_\parallel^{-1} \sim B \tilde{n}_d T^{-1} \theta^2.$$

Дополнительный множитель θ^2 возникает вследствие малости изменения p_z-компоненты импульса электрона при одном акте рассеяния на наклонной дислокации:

$\Delta p_z \sim p_F\theta \ll p_F$, так что процесс изменения p_z носит диффузионный характер. Оценим соотношение между найденными вкладами в $\chi_{\|}^{-1}$ (p_F, ε_F — импульс и энергия Ферми):

$$\Delta\chi_{\|}^{-1} / \chi_u^{-1} \sim \theta^2 \varepsilon_F T / \nu^{1/2}\Theta_D^2, \quad \tilde{\chi}_{\|}^{-1} / \chi_u^{-1} \sim \varepsilon_F T \nu^{1/2} / \Theta_D^2.$$

Из этих соотношений следует, что в области низких температур $T \lesssim 1$ К, когда максимальный угол θ отклонения дислокационных линий от выделенного направления достаточно мал:

$$\theta \ll (\nu^{1/2}\Theta_D^2 / \varepsilon_F T)^{1/2} \sim 10^{-1}, \tag{33}$$

теплопроводность вдоль дислокационных линий определяется «диффузионным» изменением энергии электрона на интервале шириной $\sim T$, происходящим благодаря неупругому рассеянию на деформационном потенциале колеблющихся перегибов:

$$\chi_{\|}^{-1} \approx A_0 n_d \bar{n}_k T^{-2}. \tag{34}$$

3. Обсуждение результатов расчетов рассеяния электронов на свежевведенных дислокациях

Из (28), (34) следует, что неупругое рассеяние электронов на перегибах существенно влияет на теплопроводность образца, когда рассеяние на большие углы является слабым. К рассеянию электронов на большие углы помимо дислокационных остовов приводит наличие примесей. Оценим необходимую чистоту образца для соблюдения (34). Обратное время энергетической релаксации электронов при рассеянии на деформационном потенциале перегибов, τ_ε^{-1}, можно получить из (26) или непосредственно из (16):

$$\tau_\varepsilon^{-1} \sim n_d \bar{n}_k a^3 \Theta_D^2 / T. \tag{35}$$

Время упругой релаксации при рассеянии электронов на примесях — $\tau_i \sim (n_i a^3 \varepsilon_F)^{-1}$, где n_i – плотность примеси. Требование $\tau_i^{-1} \ll \tau_\varepsilon^{-1}$ приводит к условию

$$n_i \ll n_d \bar{n}_k \Theta_D^2 / \varepsilon_F T \lesssim 10^{14}\ \text{см}^{-3}, \tag{36}$$

где положено $T \sim 1$ К, $\bar{n}_k < l_k^{-1}$ и $n_d < \nu^2 b^{-2}$.

В работах [3,4] сообщается о наблюдении зависимостей $\chi(T)$ (n = 1,5–2,7) для теплопроводности чистых кристаллов меди и серебра со свежевведенными дислокациями в области температур и значений плотности дислокаций, рассматриваемых в данной работе: $T \sim 1$ К, $n_d \sim 10^7$–10^8 см$^{-2}$. Однако для сопоставления экспериментальной ситуации [3,4] с описанной выше модельной, помимо преодоления известного расхождения [20] между экспериментальным и расчетным значением транспортного сечения рассеяния электронов на дислокации, к которому приводят простые формулы типа (27), необходима информация об угловом распределении дислокаций, вводимых при пластической деформации изгибом–разгибом [3,4], а также сведения о спектре возникающих при этом низкоэнергетических возбуждений.

В дальнейшем мы планируем обсудить применимость механизма рассеяния фононов подвижными дислокационными перегибами и пиннинг перегибов примесями для интерпретации аномалий в фононной теплопроводности слабо деформированных кристаллов ^{4}He, в том числе наблюдавшееся подавление эффекта в результате повышения плотности введенных изгибом дефектов, отжиги образцов и введения примесей ^{3}He в чистый ^{4}He, а также особенностей в поведении теплопроводности деформированных кристаллов свинца в сверхпроводящем состоянии [1,22–26].

1. Л.П. Межов-Деглин, *Письма в ЖЭТФ* **27**, 520 (1978).
2. Л.П. Межов-Деглин, *ЖЭТФ* **77**, 734 (1979).
3. А.О. Федотов, Л.П. Межов-Деглин, А.Ю. Касумов, *ФТТ* **23**, 311 (1981).
4. А.О. Федотов, Л.П. Межов-Деглин, *ФТТ* **24**, 207 (1982).
5. D. Fonteyn and G. Pitsi, *J. Low Temp. Phys*. **80**, 325 (1990).
6. K. Gloos, C. Mitschka, F. Pobell, and P. Smeibidl, *Cryogenics* **30**, 14 (1990).
7. В.М. Дмитриев, И.Л. Лебедева, Н.Н. Пренцлау, *ФНТ* **27**, 657 (2001) [*Low Temp. Phys*. **27**, 484 (2001)].
8. В.М. Дмитриев, Н.Н. Пренцлау, В.Н. Светлов, В.Б. Степанов, *ФНТ* **31**, 94 (2005) [*Low Temp. Phys*. **31**, 73 (2005)].
9. В.Н. Светлов, В.Б. Степанов, *ФНТ* **32**, 919 (2006) [*Low Temp. Phys*. **32**, 700 (2006)].
10. А.Е. Кошелев, *ФТТ* **26**, 3190 (1984).
11. С.И. Мухин, *ЖЭТФ* **91**, 140 (1986).
12. Tejs Vegge, James P. Sethna, Siew-Ann Cheong, Karsten W. Jacobsen, Christopher R. Myers, and Daniel C. Ralph, *Phys. Rev. Lett*. **86**, 1546 (2001).
13. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций,* Атомиздат, Москва (1972), гл. 3, 8.
14. A. Seeger, *Philos. Mag*. **1**, 651 (1956).
15. Б.В. Петухов, В.Л. Покровский, *ЖЭТФ* **63**, 634 (1972).
16. А.Ф. Андреев, *ЖЭТФ* **68**, 2341 (1975).
17. Модель близко расположенных перегибов на дислокационной линии применима при условии $n_k \ll l_k^{-1}$ [18].
18. У. Мэзон, *Физическая акустика*, Мир, Москва (1969), т. 3, ч. А.
19. В уравнениях движения перегибов, использованных выше, не учтен периодический потенциальный рельеф для движения перегиба вдоль дислокационной линии в металле, поскольку связанные с ним частоты колебаний перегиба весьма малы [18]: $\omega_{\|} \sim \nu^{1/2}\omega_m$.
20. В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон, *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*, Наука, Москва (1984), гл. 10.

21. Дж. Займан, *Электроны и фононы*, ИИЛ, Москва (1962), гл. 7, 9.
22. Л.П. Межов-Деглин, А.А. Левченко, *ЖЭТФ* **82**, 278 (1982).
23. Л.П. Межов-Деглин, А.А. Левченко, *ЖЭТФ* **86**, 2123 (1984).
24. Л.П. Межов-Деглин, В.Б. Ефимов, А.И. Голов, *ФНТ* **10**, 99 (1984) [*Low Temp. Phys*. **10**, 53 (1984)].
25. А.А. Левченко, Л.П. Межов-Деглин, *ФНТ* **10**, 1110 (1984) [*Low Temp. Phys*. **10**, 581 (1984)].
26. А.А. Левченко, Л.П. Межов-Деглин, *ФНТ* **11**, 1124 (1985) [*Low Temp. Phys*. **11**, 617 (1985)].

Oscillations of kinks on dislocation lines in crystals and low-temperature transport anomalies as “passport” of freshly induced defects

L.P. Mezhov-Deglin and S.I. Mukhin

A possible interpretation of experimental data on low-temperature transport anomalies in weakly deformed ultra-pure metal crystals of lead, copper and aluminum and in ^{4}He crystals is discussed in light of the proposed earlier theoretical picture of dislocations with dynamic kinks. The theoretical predictions give an overall picture of interaction of conduction electrons in ultrapure crystals with freshly introduced dislocations containing dynamic kinks in the Peierls potential relief. At random stresses caused by plastic deformation of the specimen, the kinks in the dislocation line form a set of one-dimensional oscillators in the potential wells of different shapes. At low temperatures, for sufficiently low density of defects that pin the kinks, the inelastic electron scattering by the kinks should lead to deviations from the Wiemann–Franz law. In particular, the inelastic scattering on the kinks should rezult in a quadratic temperature dependence of electronic thermal conductivity of a metallic sample along the predominant directions of the axes of dislocations. In the normal to dislocation axis plane dominanat is an elastic scattering of electrons at large angles. Pinning of kinks by point defects or additional dislocations, as well as annealing of the crystal that leads to the disappearance of the kinks, should lead to the suppression of the transport anomalies. Thus, the energy interval accommodating the vibrational spectrum of kinks is a “passport of deformation history” of each particular sample. It lies in the range bound by the characteristic value of the Peierls relief. For example, for copper it corresponds to temperatures / energies of 1 K. Next time we plan to discuss the applicability of the mechanism of phonon scattering by mobile dislocation kinks and pinning of kinks by impurities and thus to explane the anomalies in phonon thermal conductivity of ^{4}He crystals and deformed crystals of pure lead in superconducting state.

PACS: **72.10.–d** Theory of electronic transport; scattering mechanisms;
72.15.Eb Electrical and thermal conduction in crystalline metals and alloys;
74.72.–h Cuprate superconductors;
75.10.–b General theory and models of magnetic ordering;
61.72.Lk Linear defects: dislocations, disclinations.

Keywords: low temperatures, kinks on the dislocation lines, Peierls potential relief, Wiedemann–Franz law.