Физика низких температур, 1995, т. 21, № 9, с. 966–970 УДК 538.911

Рассеяние и захват электронов дислокационными диполями

Э. П. Фельдман, Т. Н. Фурсова

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины, Украина, 340114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

Статья поступила в редакцию 31 октября 1994 г., после переработки 25 мая 1995 г.

Установлено, что энергетический спектр электрона в поле дислокационного диполя состоит из конечного числа серий уровней, поджатых к краю непрерывного спектра, с бесконечным числом уровней внутри каждой серии. Показано, что малоугловое рассеяние электронов на диполе вносит в величину полного поперечника рассеяния относительно небольшой вклад, сравнимый с вкладом рассеяния на большие углы. Выявлено, что дислокационные диполи значительно слабее подавляют осцилляции магнитной восприимчивости при низких температурах (эффект де Гааза—ван Альфена), чем одиночные дислокации.

Виявлено, що енергетичний спектр електрона в полі дислокаційного диполя складається з скінченної кількості серій рівнів, які підтиснуті до краю безперервного спектра, з нескінченною кількістю рівнів усередині кожної серії. Показано, що малокутове розсіяння електронів на диполі вносить в величину повного поперечника розсіяння відносно невеликий внесок, порівняний з внеском розсіяння на великі кути. Знайдено, що дислокаційні диполи значно слабкіше пригнічують осциляції магнітної сприйнятливості при низьких температурах (ефект де Гааза—ван Альфена), ніж поодинокі дислокації.

1. Введение

Задача о движении электронов в поле дислокационного диполя заслуживает внимания по нескольким причинам.

Во-первых, распределение дислокаций в кристалле нельзя считать полностью хаотическим по их положениям и изотропным по ориентациям их линий и векторов Бюргерса. Чаще всего наблюдается частичное упорядочение дислокационных структур и объединение дислокаций в группы. Минимизация свободной энергии кристалла по отношению к конфигурации системы дислокаций достигается в основном за счет объединения в пары параллельных дислокаций с противоположно направленными и равными по величине векторами Бюргерса. Эти пары называются дислокационными диполями.

Во-вторых, как будет видно из дальнейшего, задача о рассеянии электрона на деформационном потенциале дислокационного диполя, в отличие от рассеяния на отдельной дислокации, допускает разделение переменных и, как следствие, точное решение. Разумеется, речь идет о движении электрона на расстояниях, превышающих плечо дислокационного диполя (т.е. расстояние между дислокациями, образующими диполь).

В-третьих, решение задачи о рассеянии и захвате носителей заряда дислокационными диполями позволяет внести существенные коррективы в имеющиеся на сегодняшний день представления о влиянии дислокаций на теплоемкость и электропроводность металлов и полупроводников при низких температурах, а также об их влиянии на эффект де Гааза—ван Альфена.

2. Основные соотношения и расчетные формулы

Плечо дислокационного диполя d намного превосходит межатомное расстояние в кристалле. Поэтому в качестве потенциала взаимодействия электрона с дислокационным диполем вполне приемлемо использование деформационного потенциала. Расчет деформационного потенциала дислокационного диполя приводит к следующему результату:

$$U = \xi \frac{r_0^2}{r^2} \sin 2\varphi \ , \qquad (1)$$

где ξ — константа деформационного потенциала; r и φ — полярные координаты. При этом ориентация полярной оси и начало координат должны быть выбраны так, как указано на рисунке;

$$r_0^2 \equiv \frac{\mu b d}{\pi(\lambda + 2\mu)} \ , \qquad (2)$$

λ и μ — коэффициенты Ляме; b — величина вектора Бюргерса. Формула (1) справедлива для $r \gtrsim d$.

Поскольку дислокации, образующие диполь, прямолинейны (параллельны оси z), для решения

© Э. П. Фельдман, Т. Н. Фурсова, 1995

задачи о рассеянии и захвате электронов дислокационным диполем достаточно решить двумерное уравнение Шредингера. В приближении эффективной массы m_e это уравнение имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\psi}{dr} + \frac{1}{r^2}\frac{d^2\psi}{d\varphi^2} + \left(\frac{2m_e E}{\hbar^2} - \frac{2m_e \xi r_0^2}{\hbar^2 r^2}\sin 2\varphi\right)\psi = 0 \ . \qquad (3)$$

Потенциальная энергия в (3) зависит от полярного угла φ, поэтому z-компонента момента импульса электрона (в дальнейшем — момент) не сохраняется (задача не обладает осевой симметрией). Однако благодаря специальной зависимости потенциала от r (пропорционально r^{-2}) уравнение (3) допускает разделение переменных. Возникающая при этом константа разделения имеет размерность квадрата момента, поэтому для нее введено обозначение $\hbar^2\nu^2$. После выполнения стандартной процедуры разделения переменных приходим к уравнениям для радиальной части волновой функции

$$\frac{d^2\chi(y)}{dy^2} + \frac{1}{y}\frac{d\chi(y)}{dy} + \left(1 - \frac{\nu^2}{y^2}\right)\chi(y) = 0 \qquad (4)$$

и угловой

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} + (\nu^2 - \nu_0^2 \sin 2\varphi)\Phi(\varphi) = 0 \ . \qquad (5)$$

В уравнении (4) $y = kr$, $k = (2m_e E)^{1/2}/\hbar$. В уравнении (5) $\nu_0^2 = 2m_e \xi r_0^2/\hbar^2$ — параметр, определяющий интенсивность взаимодействия электрона с диполем.

Настоящая работа базируется на квантовомеханическом анализе движения электрона, взаимодействующего с дислокационным диполем. Решение соответствующей задачи в классической механике опирается на решение уравнения Гамильтона—Якоби. Для наглядности мы представляем в схематическом виде на рис. 1 классификацию траекторий движения электрона в зависимости от областей изменения параметров E и ν^2. Эти траектории можно назвать пролетными ($E > 0$; $\nu^2 > \nu_0^2$), пролетными с осцилляциями ($E > 0$, $0 < \nu^2 < \nu_0^2$), захватными ($E > 0$, $\nu^2 < 0$) и финитными с захватом ($E < 0$, $\nu^2 < 0$). Само же классическое рассмотрение мы не приводим ввиду того, что оно перекрывается квантовомеханическим рассмотрением.

Допустимые значения ν^2 определяются из требования периодичности решений уравнения (5). При отсутствии взаимодействия, когда $\nu_0^2 \to 0$, величина ν^2 принимает значения $\nu^2 = 0, 1, 4, \ldots, m^2, \ldots$, где m — целые числа. Спектр значений ν^2 можно конструктивно определить для $\nu_0^2 \gg 1$ и $\nu_0^2 \ll 1$. В ситуации, когда $\nu_0^2 \gg 1$, спектр разделяется на два участка, в первом из которых $\nu^2 \gg \nu_0^2$, а во втором $\nu^2 \ll \nu_0^2$.

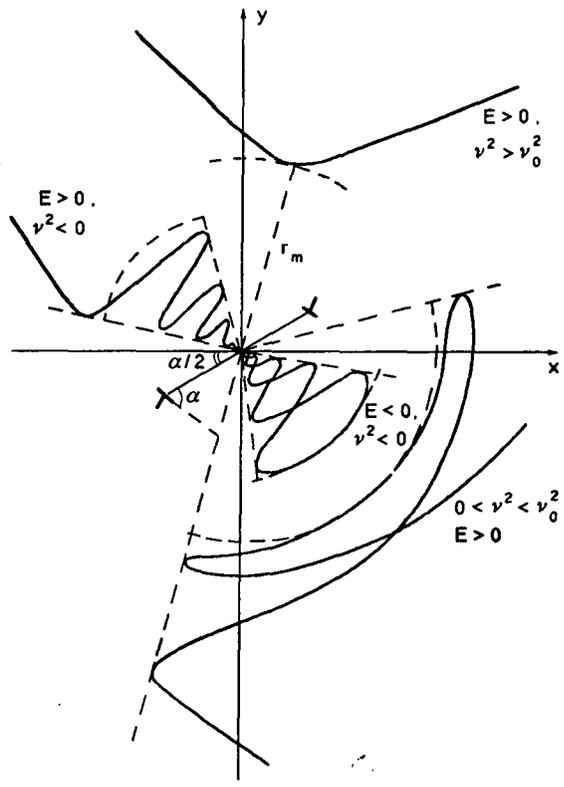

Рис. 1. Классические траектории движения электронов в поле дислокационного диполя.

Для первого участка можно применить теорию возмущений по малому параметру ν_0^2/ν^2. В результате получим

$$\nu_m^2 = m^2\left(1 + \frac{\nu_0^4}{8m^4}\right) \ , \quad m^2 \gg \nu_0^2 \ . \qquad (6)$$

Для второго участка спектр находим по аналогии с задачей о линейном осцилляторе:

$$\nu_m^2 = -\nu_0^2 + 2^{3/2}\nu_0(m + 1/2) \ , \qquad (7)$$

$$m^2 \ll \nu_0^2 \ , \quad m = 0, 1, 2, \ldots$$

Формулы (6) и (7) «сшиваются» при $m \sim \nu_0$.

Наиболее важно то, что, согласно (7), величина ν^2 может быть отрицательной. Количество отрицательных собственных значений ν^2 приблизительно равно $\nu_0/2\sqrt{2}$.

В случае $\nu_0^2 \ll 1$ формула (6) справедлива для $m \geq 2$. Для основного состояния расчет дает

$\nu_f^2 = -\nu_0^4/8$. Значение с $m = 1$ выделено потому, что только при этом m проявляется двукратное вырождение «уровней» нулевого приближения и соответствующее секулярное уравнение дает поправку первого приближения по ν_0^2:

$$\nu_1^2 = 1 \pm \nu_0^2/2 \ . \qquad (8)$$

Несмотря на малость ν_0^2, и в этом случае имеется одно (основное) состояние с отрицательным собственным значением ν^2.

Полезно отметить, что формула (6) может быть получена также из условия квазиклассического квантования момента:

$$\int_0^{2\pi} (\nu^2 - \nu_0^2 \sin 2\varphi)^{1/2} \, d\varphi = 2\pi m \ . \qquad (9)$$

Знание спектра допустимых значений константы разделения ν^2 позволяет получить ряд результатов из анализа уравнения (4). Линейно независимыми решениями этого уравнения являются функции Бесселя $J_\nu(kr)$ и $J_{-\nu}(kr)$. Аргументы и индексы этих функций могут быть как вещественными, так и чисто мнимыми; это зависит от знака энергии и константы разделения.

Рассмотрим сначала отрицательные энергии ($E < 0$). Аргумент функций Бесселя при этом является чисто мнимым. При положительных ν^2 и, следовательно, вещественных ν мы не можем удовлетворить физическому требованию ограниченности волновой функции при $r \to 0$. Это означает, что при отрицательных E, т.е. для финитного движения, величина ν^2 обязана быть отрицательной. В этом случае ν — чисто мнимая величина и подходящая линейная комбинация функций Бесселя при малых r осциллирует как $\sin [|\nu| \ln (|k|r)]$, а при больших r экспоненциально убывает. Как следует из теории бесселевых функций, граница r_c, при которой осцилляции переходят в экспоненциальное убывание, находится путем сравнения аргумента функции Бесселя с ее индексом:

$$|k| r_c = |\nu| \ , \qquad (10)$$

т.е.

$$r_c^2 = \frac{\hbar^2 |\nu|^2}{2m_e |E|} \ . \qquad (11)$$

Энергетический спектр электрона в этой задаче удобнее всего находить, применяя осцилляционную теорему. Для этого необходимо найти число нулей n волновой функции на интервале от d до r_c, поскольку на расстояниях меньших d неприменимо рассматриваемое выражение для потенциала, а на расстояниях бо́льших r_c осцилляции отсутствуют. Очевидно, что для функции $\sin [|\nu| \ln (|k|r)]$ число нулей на указанном интервале равно

$$n = \frac{|\nu|}{\pi} \ln \frac{r_c}{d} \ . \qquad (12)$$

Отождествляя n с квантовым числом, указывающим номер состояния, и имея в виду (11), находим, что

$$E_{n,\nu} = \frac{\hbar^2 \nu^2}{2m_e d^2} \exp\left(-\frac{2\pi n}{|\nu|}\right) \ . \qquad (13)$$

В формуле (13) $n = 0, 1, 2, \ldots$, а ν^2 принимает конечное число отрицательных значений. Если $\nu_0^2 << 1$, то имеется лишь одно отрицательное значение ν^2, равное ν_f^2; если же $\nu_0^2 >> 1$, то имеется приблизительно $\nu_0/2\sqrt{2}$ отрицательных значений ν^2, определяемых формулой (7).

Перейдем к рассмотрению инфинитного движения электронов в поле дислокационного диполя. В этом случае энергия положительна, и соответственно аргумент бесселевых функций вещественен. Набор функций $J_\nu(kr)$ при вещественных ν описывает рассеяние электронов на дислокационном диполе. Если же ν^2 отрицательно, то волновые функции осциллируют при $r \to 0$ и плотность вероятности нахождения электрона в сколь угодно малой окрестности точки $r = 0$ конечна, что соответствует «падению» частицы на центр [1]. Иными словами, набор функций $J_\nu(kr)$ и $J_{-\nu}(kr)$ при мнимых ν описывает захват электронов дислокационным диполем.

В рассматриваемой двумерной задаче речь пойдет об оценке поперечников рассеяния и захвата. Чтобы ее получить, сделаем предположение, что поперечники рассеяния и захвата определяются главным образом фазовыми сдвигами радиальных волновых функций и в меньшей мере зависят от изменения угловых частей волновых функций. Введем граничное значение момента m_*, такое, что если $|m| < m_*$, то ν_m — мнимая величина, а при $|m| > m_*$ параметр ν_m вещественен. Момент $m_* \approx \nu_0/2\sqrt{2}$ для $\nu_0^2 >> 1$ и $m_* = 1$ для $\nu_0^2 << 1$. Тогда выкладки, стандартные в двумерной теории рассеяния, приводят к следующим результатам для амплитуды захвата:

$$f_c(\varphi) = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2\pi k}} \sum_{|m| < m_*} e^{i(\varphi - \pi/2)m} \qquad (14)$$

и амплитуды рассеяния:

$$f_s(\varphi) = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2\pi k}} \sum_{|m|>m_*}^{\infty} \left[e^{i\pi(m-\nu_m)} - 1 \right] e^{im\varphi} . \quad (15)$$

Наибольший интерес в дислокационных задачах обычно представляют полные поперечники захвата и рассеяния:

$$D_c = \int_0^{2\pi} |f_c(\varphi)|^2 \, d\varphi = \frac{1}{k}(2m_* + 1) \approx \frac{1}{k}\left(\frac{\nu_0}{\sqrt{2}} + 1\right) , \quad (16)$$

$$D_s = \int_0^{2\pi} |f_s(\varphi)|^2 \, d\varphi = \frac{8}{k} \sum_{m \geq m_*}^{\infty} \sin^2\left(\frac{\pi(m-\nu_m)}{2}\right) . \quad (17)$$

Из (17) могут быть получены простые оценочные выражения для $\nu_0^2 >> 1$ и $\nu_0^2 << 1$. В первом из этих случаев воспользуемся формулой (6) и учтем, что $m_* \sim \nu_0$. Тогда

$$D_s \sim \frac{8}{k} \sum_{m>\nu_0}^{\infty} \sin^2\left(\frac{\pi\nu_0^4}{32m^3}\right) . \quad (18)$$

Интервал суммирования в (18) состоит из двух частей. В первой из них $\nu_0 << m << \nu_0^{4/3}$, во второй $m >> \nu_0^{4/3}$. В первой из этих частей квадрат синуса заменяется на 1/2, количество слагаемых в этой части порядка $\nu_0^{4/3}$; поэтому вклад этой части в сумму оценивается как $4\nu_0^{4/3}/k$. Во второй части синус заменяется его аргументом, а суммирование — интегрированием. В итоге вклад этой части оценивается как $\pi^2\nu_0^{4/3}/640k$, т.е. он того же порядка, что и вклад первой части, но с гораздо меньшим численным коэффициентом. Окончательно

$$D_s \sim \frac{4}{k}\nu_0^{4/3} , \quad (19)$$

если $\nu_0^2 >> 1$.

Для слабого потенциала рассеяния, когда $\nu_0^2 << 1$, суммирование в (17) начинается с $m = 1$, и именно это слагаемое дает основной вклад в сумму, так что, используя (8), получаем

$$D_s \sim \frac{\pi^2}{8k}\nu_0^4 . \quad (20)$$

Вклад остальных слагаемых в сумму (17) в этом случае порядка ν_0^8. Заметим, что в действительности захват может происходить только для электронов с малой энергией таким образом, чтобы было справедливо неравенство $r_c >> d$. Для этого необходимо, чтобы было справедливо

$$E << \xi \frac{r_0^2}{d^2} = \frac{\mu}{\pi(\lambda + 2\mu)} \xi \frac{b}{d} , \quad (21)$$

т.е. энергия электрона должна быть значительно меньше константы деформационного потенциала.

3. Обсуждение основных результатов

Первый из них выражается формулой (13). Из нее следует, что спектр электрона в поле дислокационного диполя состоит из конечного числа серий. Каждая серия определяется квантованным значением ν. Конструктивные правила нахождения этих значений указаны формулами (6) и (7). Количество серий равно единице для слабого взаимодействия электрона с дислокацией ($\nu_0^2 << 1$) и равно приблизительно $\nu_0/2\sqrt{2}$ для сильного взаимодействия ($\nu_0^2 >> 1$). Формально внутри каждой серии число линий в спектре бесконечно, с ростом квантового числа n уровни поджимаются экспоненциально близко к краю непрерывного спектра. В действительности, конечно, всегда существует фактор, «обрезающий» действие деформационного потенциала на некоторых больших расстояниях R (например, среднее расстояние между диполями или размер зерна). Поскольку размер области локализации волновой функции r_c не может превосходить R, из рассмотрения формулы (12) заключаем, что число линий в каждой серии спектра (формально бесконечное) в действительности конечно и по порядку величины равно $\pi^{-1}|\nu| \ln(R/d)$, так что минимальное (по модулю) значение энергии в данной серии равно $-\hbar^2|\nu|^2/(2m_e R^2)$. Кроме того, ниже наинизшей «дипольной» энергии $\sim -\hbar^2\nu_0^2/(2m_e d^2)$ располагаются уровни, локализованные вблизи отдельных дислокаций, образующих диполь. Количество этих уровней может быть найдено из условия, что радиус локализации соответствующих состояний (найденный в [2]) не превосходит d. Таким образом устанавливается, что число этих уровней порядка d/b. Эта величина в реальных объектах изменяется от 10 до 100.

Итак, даже, если дислокации объединены в диполи, в дискретном спектре электронных состояний имеется энергетический интервал (от приблизительно $-\xi$ до $-\xi b/d$), заполненный уровнями, формируемыми потенциалами отдельных дислокаций. Собственно же «дипольные» уровни расположены на интервале от $-\xi b/d$ до $-\xi bd/R^2$ и описываются формулой (13). При еще меньших по модулю энергиях начинается область размытия края непрерывного спектра. Отметим, что сериальный характер «дипольного» спектра существенно определяется возможностью разделения переменных в уравнении Шредингера. Этот результат невозможно получить путем вычисления классического

фазового объема частицы, движущейся в области $H(p, q) < E$ (q и p — соответственно обобщенные координаты и импульсы частицы), как это сделано для единичной дислокации в [2], а для дислокационного диполя — в [3]. Таким способом можно получить число состояний $N(E)$ с энергией, не превосходящей E, однако лишь с точностью до единицы. Поэтому такие результаты дают усредненную плотность состояний, но не описывают спектр в деталях. По-видимому, если переменные в уравнении Шредингера не разделяются, то расположение линий в спектре весьма хаотично, детерминировано лишь поведение усредненной плотности состояний.

Второй из основных результатов связан с оценкой полного поперечника рассеяния D_s. Быстрая сходимость при больших m ряда (17), определяющего полный поперечник рассеяния, показывает, что рассеяние на малые углы дает в поперечник вклад относительно небольшой, сопоставимый с вкладом рассеяния на большие углы. Это контрастирует с широко известным утверждением о преобладающей роли малоуглового рассеяния на дислокациях [4–6]. По-видимому, в случае одиночных дислокаций из-за медленного спадания потенциала на больших расстояниях ($\sim r^{-1}$), действительно, малоугловое рассеяние весьма существенно, и это сильно сказывается, в частности, на амплитуде осцилляций магнитной восприимчивости при низких температурах (эффект де Гааза—ван Альфена). Температура Дингла, описывающая подавление этих осцилляций, может быть оценена как $T_D \sim \hbar \rho D_s v$, где ρ — плотность дислокаций или диполей; D_s — поперечник рассеяния; v — скорость электрона. При записи оценочной формулы для температуры Дингла учтено, что эта оценка не зависит (см., например, [7]) от взаимной ориентации поля и дислокационных линий. Если принять $\rho \sim 10^8$ см$^{-2}$, а D_s, как следует из нашего расчета, для типичных металлов порядка 10^{-7} см, то $T_D \sim 10^{-2}$ К, т.е. роль диполей невелика. В то же время влияние на температуру Дингла одиночных дислокаций весьма значительно. Действительно, если считать, что в случае одиночных дислокаций интеграл (или сумма), определяющий полный поперечник рассеяния, расходится на малых углах, то в качестве оценки D_s можно взять среднее расстояние между дислокациями $\rho^{-1/2}$. Но тогда $T_D \gtrsim 10$ К, и осцилляции де Гааза—ван Альфена могут быть полностью подавлены.

Вполне вероятно, что длительный отжиг металлов с дислокациями, способствующий объединению дислокаций в пары, позволит наблюдать эффект де Гааза—ван Альфена в тех случаях, когда без отжига это наблюдение невозможно.

Эта работа была поддержана грантом фонда Сороса, присужденным Американским физическим обществом.

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1988).
2. И. М. Лифшиц, Х. И. Пушкаров, *Письма в ЖЭТФ* **11**, 456 (1970).
3. Л. Г. Потемина, *ФНТ* **5**, 261 (1979).
4. A. Seeger and H. Bross, *Z. Naturforsch.* **15a**, 663 (1960).
5. F. R. M. Nabarro and J. M. Ziman, *Proc. Phys. Soc.* **78**, 1512 (1961).
6. D. W. Tervilliger and R. J. Higgins, *Phys. Rev.* **B7**, 667 (1973).
7. А. И. Гутников, Э. П. Фельдман, *ЖЭТФ* **3**, 1054 (1972).

Scattering and capture of electrons by dislocation dipoles

E. P. Feldman and T. N. Fursova

It is shown that the energy spectrum consists of a finite number of level series. These level series are pressed to the continuous spectrum edge and have an infinite number of levels within each series. The value of the total electron scattering diameter is obtained. It is shown that small-angle scattering by the dipole makes a relatively small contribution to the total diameter of electron scattering. This contribution may be compared with the large-angle one. It is found that at low temperatures the dislocation dipoles suppress the amplitude of magnetic susceptibility oscillations more weakly than single dislocations do (the de Haas—van Alphen effect).