

## КИНЕМАТИЧЕСКАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ НА ГРАНИЦЕ БИКРИСТАЛЛА АНИЗОТРОПНОГО МЕТАЛЛА

*С.Н.Бурмистров, Л.Б.Дубовский*

Рассматривается влияние структуры бикристалла анизотропного металла на электронный спектр вблизи границы. Предсказывается существование нового типа дискретных электронных состояний на двойниковой границе, лежащих в зоне проводимости.

В последнее время в металлических бикристаллах — совершенных кристаллах, состоящих из двух монокристаллов, обнаружены аномалии различных физических свойств<sup>1-3</sup>. Одной из возможных причин этих аномалий являются особенности решеточных свойств и фононных спектров, возникающие на границе бикристаллов. Другой альтернативной причиной указан-

---

1) Диаметр контакта при этом все же должен быть меньше глубины проникновения электрического поля в сверхпроводник  $\sim \lambda / \Gamma^{1/2}$ .

ных аномалий является перестройка электронного спектра, происходящая вблизи границы бикристалла. В работе на основе микроскопических соображений предлагается новый механизм возникновения аномалий электронного спектра вблизи границы бикристалла, носящий общий характер.

Для изотропного электронного спектра ( $\epsilon = p^2/2m$ ) никаких особенностей при прохождении электронами границы бикристалла не возникает. Ситуация коренным образом меняется при наличии анизотропии электронного спектра. Дело заключается в том, что в этом случае на границе бикристалла часть электронов испытывает отражение, связанное с тем, что в других частях бикристалла не могут быть выполнены законы сохранения энергии и параллельной поверхности границы составляющей квазиимпульса. В результате для вполне определенного типа границы бикристалла, а именно плоскости двойникования и только для нее, возникают дискретные электронные уровни, главной особенностью которых является то, что они полностью лежат в зоне проводимости, а также вносят вклад в плотность состояний на уровне Ферми.

Исследование электронного спектра проведем для квадратичного анизотропного закона дисперсии с массами  $m_1, m_2, m_3$  вдоль главных кристаллографических осей;

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{m_{11}} \frac{\partial}{\partial x} \right) - \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{m_{12}} \right) + \frac{1}{m_{12}} \frac{\partial}{\partial x} \right] \frac{\partial}{\partial y} - \frac{1}{2m_{22}} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{1}{2m_3} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1)$$

$x$  — координата нормали к поверхности бикристалла. Элементы тензора масс  $m_{ik}^{-1}$  следующим образом выражаются через  $m_1, m_2, m_3$ :

$$\begin{pmatrix} m_{11}^{-1} & m_{12}^{-1} \\ m_{21}^{-1} & m_{22}^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1^{-1} \cos^2 \varphi + m_2^{-1} \sin^2 \varphi & (m_1^{-1} - m_2^{-1}) \sin \varphi \cos \varphi \\ (m_1^{-1} - m_2^{-1}) \sin \varphi \cos \varphi & m_1^{-1} \sin^2 \varphi + m_2^{-1} \cos^2 \varphi \end{pmatrix} \quad (2)$$

$\varphi = \varphi(x)$  — угол поворота главных кристаллографических осей 1 и 2 относительно пространственных осей  $x$  и  $y$ .  $\varphi(x)$  плавно меняется на границе бикристалла от значения  $\varphi_-$  в левом полупространстве до значения  $\varphi_+$  в правом ( $\varphi_- \leq \varphi(x) \leq \varphi_+$ ) на расстоянии  $L$ , характеризующем перестройку кристаллографических осей вблизи границы бикристалла от одного моноблока к другому ( $L \gg a$ ,  $a$  — межатомное расстояние). Плавность изменения  $\varphi(x)$  позволяет пользоваться в гамильтониане (1) приближением эффективных масс. Частный случай бикристалла представляет собой двойниковый кристалл, для которого

$$\varphi_+ = -\varphi_- = \varphi_0. \quad (3)$$

Для исследования энергетического спектра гамильтониана (1) перейдем к компонентам Фурье по координатам  $y$  и  $z$  вдоль поверхности бикристалла. А затем проведем калибровочное преобразование фазы волновой функции  $\psi(x)$ :

$$\psi(x) = \tilde{\psi}(x) \exp \left\{ -ik_y \int_0^x dx' m_{11}(x') / m_{12}(x') \right\}.$$

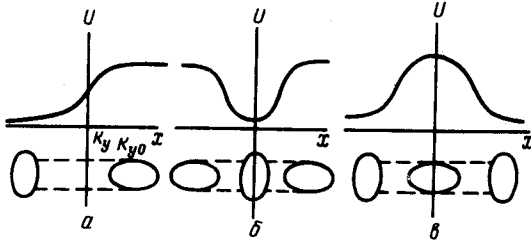
В этом случае гамильтониан (1) принимает вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{m_{11}(x)} \frac{d}{dx} \right) + \frac{1}{2} \frac{m_{11}(x)}{m_1 m_2} k_y^2 + \frac{1}{2m_3} k_z^2 \quad (4)$$

$k_y$  и  $k_z$  — сохраняющиеся компоненты импульса вдоль поверхности бикристалла. Член с кинетической энергией  $K(x) = \frac{1}{2} k_y^2 \frac{m_{11}(x)}{m_1 m_2}$  с переменной массой  $m_{11}(x)$  представляет

собой эффективную потенциальную энергию  $U(x)$ , в которой движется электрон. Для произвольного бикристалла имеет место одна из трех характерных ситуаций, представленных на рисунке в виде зависимости  $U(x)$  и соответствующего положения поверхности Ферми в различных частях пространства. Когда  $|\varphi(x)|$  меняется монотонно, то  $U(x)$  изображено на

рис. а. При этом если импульс электрона в левом полупространстве превышает  $k_{y0}$  ( $|k_y| > k_{y0}$ ), то в правое полупространство он проникнуть не может, поскольку в правом полупространстве нет состояния с импульсом, обеспечивающим как сохранение энергии так и сохранение компонент импульса  $k_y$  и  $k_z$  вдоль бикристаллической границы. Тем самым возникает потенциальный барьер, который связан с кинематикой движения электрона на границе бикристалла и по своему смыслу аналогичный центробежной энергии в центрально-симметрическом поле. Это явление совершенно аналогично явлению полного внутреннего отражения в оптике. Если же  $|\varphi(x)|$  меняется немонотонно, как, например, для плоскости двойникования — (3), то в зависимости от знака величины разности масс ( $m_1 - m_2$ ) имеет



место ситуация, изображенная на рис. б и в. При  $m_1 < m_2$  (рис. б)  $U(x)$  представляет собой потенциальную яму, и возникает дискретный спектр электронных состояний из-за невозможности электрону с импульсом  $|k_y| > k_{y0}$  уйти как на плюс, так и на минус бесконечность. При резкой границе, когда  $L \sim a$ , возникает мелкая симметричная яма, в которой имеется один дискретный уровень с масштабом локализации, много большим межатомного расстояния. При плавной границе ( $L \gg a$ ) число дискретных уровней увеличивается до  $\sim L/a$ , и для анализа спектра можно пользоваться квазиклассическим приближением. Для переменной массы  $m_{11}(x)$  правило квантования Бора — Зоммерфельда дает

$$\int \left[ 2m_{11}(x) \left( E_n - \frac{k_y^2}{2m_2} \frac{m_{11}(x)}{m_1} - \frac{k_z^2}{2m_3} \right) \right]^{1/2} dx = \pi(n + 1/2),$$

где интегрирование ведется по классически разрешенной области. Дискретные уровни определяются из соотношения

$$E_n = \frac{k_y^2}{2m_2} (1 + \xi_n(k_y)) + \frac{k_z^2}{2m_3} \quad (5)$$

$\xi_n$  удовлетворяет уравнению

$$\xi_n \int_0^1 dy \sqrt{1-y^2} \sqrt{1 + \xi_n y^2} = \frac{\pi}{2L} \frac{n + 1/2}{|k_y|} (\rho m_2/m_1)^{1/2}.$$

Переменная масса  $m_{11}(x)$  отлична от  $m_2$  в области размером  $L$ :

$$m_{11}(x) = m_1 [1 + \rho(x/L)^2], \quad |x| < L; \quad \rho = (m_2 - m_1)/m_1.$$

В пределе слабой анизотропии  $\rho \ll 1$  спектр является эквидистантным:

$$\xi_n = 2(n + 1/2)(\rho m_2/m_1)^{1/2} / |k_y| L, \quad (5a)$$

причем расстояние между уровнями (5) пропорционально  $|k_y|$ . В обратном предельном случае  $\rho \gg 1$ , характерном для полуметаллов и полупроводников, спектр становится неэквидистантным:

$$\xi_n = \left( \frac{3\pi}{2L} \right)^{2/3} (n + 1/2)^{2/3} |k_y|^{-2/3} (\rho m_2/m_1)^{1/3}. \quad (5b)$$

Поскольку расстояние между дискретными уровнями (5) плавно зависит от  $k_y$ , то плотность состояний дискретных уровней  $\nu_d(E)$  имеет особенности только в точках окончания спектра и на уровне Ферми:

$$\nu_d(E) = \frac{S}{2\pi^2} L (2m_1 m_2 m_3 E)^{1/2} \alpha(\rho) \quad (6)$$

$E$  – полная энергия электрона,  $S$  – площадь границы бикристалла,  $\alpha(\rho)$  – плавная функция:  $\alpha(\rho \rightarrow 0) = \rho^{1/2}$ ,  $\alpha(\infty) = 4/\pi$ .

Число уровней под поверхностью Ферми равно

$$N(\mu) = L(m_1 \mu \rho / 2)^{1/2} \tilde{\alpha}(\rho); \quad \tilde{\alpha}(0) = 1, \quad \tilde{\alpha}(\infty) = 2/3\pi. \quad (7)$$

Рассмотрение обобщается на неквадратичный анизотропный закон дисперсии. Для металлов, поверхность Ферми которых превышает ячейку Бриллюэна, электронный спектр является сильно анизотропным, и имеет место кинематическая локализация на двойниковых границах.

Особенности при прохождении электронами границы бикристалла, возникновение эффективного потенциала  $U(x)$  (рисунок) и дискретного спектра приводят к аномалиям в поведении системы в магнитном поле и прохождении электромагнитных волн. В частности, за счет дискретных уровней магнитная восприимчивость вблизи двойниковой границы на расстоянии  $\sim L$  возрастает до  $\chi \sim \chi_0 N^2$  ( $\mu$ ),  $\chi_0 \sim (v_F/c)^2$  – диамагнитная восприимчивость нормального металла. Наблюдающиеся на эксперименте аномалии именно на двойниковых границах, а не на бикристаллах общего вида <sup>1-3</sup>, могут быть связаны с описанным явлением.

Авторы выражают благодарность Ю.Кагану за многочисленные обсуждения вопросов, касающихся постановки задачи. Авторы глубоко признательны К.А.Кикоину, А.Н.Козлову, Л.А.Максимову, Н.В.Прокофьеву и В.А.Соменкову за интерес к работе и обсуждения, а Д.Е.Хмельницкому за критические замечания.

#### Литература

1. Хайкин М.С., Хлюстиков И.Н. Письма в ЖЭТФ, 1981, **33**, 167; Буздин А.И., Хлюстиков И.Н. Письма в ЖЭТФ, 1984, **40**, 140.
2. Бобров В.С., Зорин С.Н. Письма в ЖЭТФ, 1984, **40**, 345.
3. Винников Л.Я., Засавицкий Е.А. и др. ЖЭТФ, 1982, **83**, 2225.