Письма в ЖЭТФ, том 11, стр. 456 – 459 *5 мая 1970 г.*

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ С ДИСЛОКАЦИЯМИ

И.М.Лифшиц, Х.И.Пушкаров

Вопрос о локализации возбуждений вблизи линейного дефекта в кристалле (дислокации) многократно рассматривался в литературе. Обычно его анализ связывается с ролью сильных искажений структуры кристалла в ядре дислокации, которые в случае длинных (по сравнению с постоянной решетки) волн мо-

гут быть описаны δ-функциональным возмущением на ее оси. Возникновение локальных фононных состояний в этом случае обусловлено знаком такого возмущения и приводит к появлению уровней, отделенных экспоненциально малой щелью от соответствующего участка непрерывного спектра [1]. Однако, наряду с сильным искажением кристалла в ядре дислокации, существует медленно спадающее поле деформаций на больших расстояниях от ее оси. Как было указано в обзоре Лифшица и Косевича [1], такое поле оказывается, вообще говоря, "ловушкой" для коротковолновых фононов, что также должно привести к появлению спектра дискретных состояний в некоторой области вокруг дислокации. В настоящей работе находится спектр этих состояний.

Как известно, квазичастицы (фононы, экситоны, магноны) характеризуются своим законом дисперсии $\epsilon = \epsilon(\mathbf{k})$, вид которого зависит от симметрии кристаллической решетки и представляется Фурье-образом матрицы соответствующего взаимодействия $M(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Вблизи краев зоны

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + (\hbar^2 k^2 / 2m^*) ,$$

где m^* – эффективная масса квазичастицы, которая может быть как положительной, так и отрицательной.

Если ось z выбрана по направлению дислокации, то k_z является хорошим квантовым числом и удобно работать в смешанном представлении k_z, $\vec{\rho}$, где $\vec{\rho}$ – радиус-вектор в плоскости $z = \mathrm{const}$.

Вдали от дислокации, когда деформация решетки $u_{i\ell}(\vec{\rho})$ медленно меняется на расстояниях, бо́льших по сравнению не только с постоянной решетки, но и длиной волны квазичастицы, к гамильтониану идеального кристалла $\hat{H}_0$ надо добавить член

$$g_{i\ell}(k_z)\, u_{i\ell}(\vec{\rho}) .$$

Для того, чтобы учесть влияние ядерной части дислокации, в гамильтониан дефектного кристалла $\hat{H}$ надо включить еще член типа $g_0(k_z) f(\vec{\rho})$, где $f(\vec{\rho})$ – быстро спадает по мере удаления от оси дислокации. Если выполняются условия $\kappa a \ll 1 \ll \kappa\rho$ (a – постоянная решетки, $\kappa = (k_x, k_y)$), то ввиду сказанного выше

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + g_{i\ell}(k_z)\, u_{i\ell}(\vec{\rho}) + g_0(k_z)\, \delta(\vec{\rho}) , \qquad (1)$$

$$\hat{H}_0 = \epsilon(\hat{\kappa}, k_z) \equiv \epsilon_0 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_{\vec{\rho}} .$$

В случае упруго-изотропного кристалла второй член в (1) принимает форму $g(k_z)\, u(\rho)$, где теперь $u \equiv u_{\ell\ell} \sim (\cos\phi)/\rho$ (ϕ – угол в плоскости $z = \mathrm{const}$). Таким образом, $g(k_z)\, u(\vec{\rho})$ – знакопеременная величина, причем интеграл от нее взятый по области, где этот член отрицателен, расходится. Это означает, что существует бесконечное число дискретных уровней с точкой сгущения в "нуле" (мы отсчитываем от уровня с фиксированным k_z). Эти уровни могут быть рассмотрены квазиклассически, т. е. при их анализе можно опустить последний член в (1).

Если $S(E)$ – площадь, на которой

$$U \equiv g(k_z)\,u(\rho) < E \equiv \epsilon - \epsilon_0 - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} ,$$

а $\nu_0(E)$ – спектральная плотность на единицу площади при $U = 0$, то спектральная плотность на единицу площади $\nu(E)$ для достаточно плавной потенциальной ямы U будет

$$\nu(E) \equiv dN/dE = \int\limits_{(V<0)} \nu_0(E-U)\,dS(U) .$$

Поскольку в плоском случае

$$\epsilon(\vec{\kappa}) = \hbar^2\kappa^2/2m^* \quad \text{и} \quad \nu_0(E) = 2\pi m^*/\hbar^2 ,$$

то

$$dN/dE = (2\pi m^*/\hbar^2)S(E) .$$

Для определения $S(E)$ заметим, что границы области $S(E)$ определяются из уравнения $U = E$, что дает

$$\rho = g(k_z)\,\frac{\cos\phi}{E} ,$$

откуда

$$S(E) = \int \frac{\rho^2}{2}\,d\phi = \frac{g^2(k_z)}{2E^2}\int\limits_0^{\pi} \cos^2\phi\,d\phi = \frac{\pi g^2(k_z)}{4E^2} ,$$

где интегралы берутся по области, где $\cos\phi > 0$.

Таким образом для спектральной плотности $\nu(E)$ находим:

$$\nu(E) \equiv dN/dE = A(k_z)/E^2, \text{ где } \quad A(k_z) = \pi^2 m^* g^2(k_z)/\hbar^2$$

и

$$N(E) = -A(k_z)/E .$$

Следовательно, дискретные уровни образуют последовательность, убывающую как

$$E_N = -\frac{A(k_z)}{N} + 0\left(\frac{1}{N^2}\right) . \qquad (2)$$

О возникновении локализованных состояний вблизи самой дислокации можно сказать следующее. Если возмущение, вызванное ядром дислокации достаточно велико, то обусловленные им уровни являются "глубокими" и лежат ниже первого уровня определяемого (2). Вблизи границы спектра идеального кристалла возникает локальный уровень с энергией

$$E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m^*} \exp\left(-\frac{2\pi\hbar^2}{m^* g_0(k_z)}\right)$$

(κ_0 – константа, порядка предельного волнового вектора квазичастицы). Поскольку ширина зоны идеального кристалла

$$\Delta E_{ид} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2|m^*|},$$

то выделение "глубокого" уровня E_0 из уровней (2) имеет место при условии

$$2\left(\frac{\kappa_0}{\pi^3}\right)^2 \left(\frac{\Delta E_{ид}}{g(k_z)}\right)^2 << \exp\left(-\frac{4}{\pi}\frac{\Delta E_{ид}}{g_0(k_z)}\right).$$

Физический факультет
Московского
государственного университета
им. М.В. Ломоносова

Институт физических проблем
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
28 марта 1970 г.

Литература

[1] И.М.Лифшиц, А.М.Косевич. Динамика кристаллической решетки с дефектами. Препринт ФТИ АН УССР, Харьков, 1965.