

О ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНА НА КЛИНОВОЙ ДИСКЛИНАЦИИ

С.Е.Красавин, В.А.Осинов

Объединенный институт ядерных исследований,
141980, Дубна, Московская обл., Россия
(Поступило в Редакцию 3 ноября 1994 г.
В окончательной редакции 3 марта 1995 г.)

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]

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

где W_A — калибровочные поля, которые прямо связаны с полями дисклинаций [12], m^* — эффективная масса электрона, $V(\mathbf{r})$ — 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 $V(\mathbf{r}) = -G\text{Sp}E_{AB}$. Здесь E_{AB} — тензор деформации, $\text{Sp}E_{AB} = E_{xx} + E_{yy}$, G — константа деформационного взаимодействия. В (1) энергия E отсчитывается от дна зоны проводимости.

Нас интересует локализация электрона в плоскости xy , поляризационный член в (1) опущен. В [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

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

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

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

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 клиновидной дисклинации с $\nu \ll 1$ имеем (см., например, [16])

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

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 волновая функция электрона имеет локализованный пик только при определенном выборе параметров, который обеспечивает достаточную глубину ямы. Как правило, истинно локализованное состояние характеризуется экспоненциальным спадением волновой функции с ростом r . Однако в случае малоугловой клиновидной дисклинации логарифмический потенциал (3) обуславливает довольно медленную асимптотику волновой функции (рис. 1). Таким образом, строго говоря, наличие пика у волновой функции означает образование не локализованного, а резонансного состояния вблизи оси дисклинации. Необходимо также отметить, что при описании состояний в области ядра дефекта 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

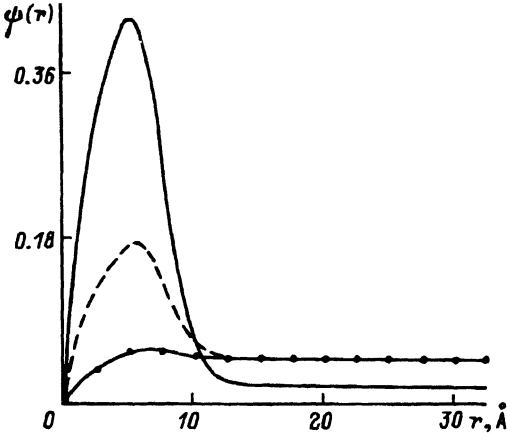


Рис. 1. Волновые функции основного состояния при $\nu = 0.15$ (сплошная линия), 0.1 (штриховая линия), 0.05 (квадраты).

Набор параметров: $R = 5 \cdot 10^{-6}$ см, $m^* = 5 \cdot 10^4$ eV, $G = 10$ eV, $\sigma = 0.41$, $j = 0$.

структурному уровню пластической деформации. Проведенные оценки показывают [16], что в этой области рождение малоугловых (частичных) одиночных дисклинаций становится энергетически выгоднее рождения дислокаций иной 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, 2. Интересно отметить, что, как показал расчет, во всех случаях первое возбужденное состояние есть состояние с $j = 1$, а именно при $\nu = 0.15$ мы получили $E_0^{j=0} = -1.1$ eV, $E_0^{j=1} = -0.96$ eV, $E_1^{j=0} = -0.38$ eV. При $\nu = 0.1$ $E_0^{j=0} = -0.41$ eV, $E_0^{j=1} = -0.38$ eV, $E_1^{j=0} = -0.07$ eV, при $\nu = 0.05$ $E_0^{j=0} = -0.13$ eV, $E_0^{j=1} = -0.11$ eV. Отметим также, что высота резонансного пика быстро уменьшается с понижением ν .

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. Как показано в настоящей работе, в зависимости от выбора параметров задачи либо возможно образование резонансного электронного состояния вблизи оси отрицательной клиновой дисклинации, либо электрон остается делокализованным.

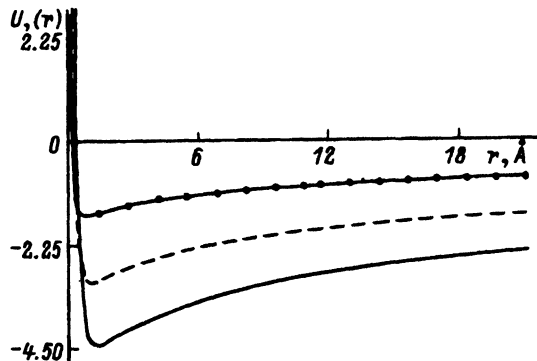


Рис. 2. Эффективный потенциал в (2) как функция r при $\nu = 0.15$ (сплошная линия), 0.1 (штриховая линия), 0.05 (квадраты). Набор параметров тот же, что и на рис. 1.

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку данного исследования в рамках гранта № 94-02-05867. Исследование, представленное в данной публикации, частично финансировано Международным научным фондом (грант N RFR000).

Список литературы

- [1] Лифшиц И.М., Пущкаров Х. Письма в ЖЭТФ 11, 9, 456 (1970).
- [2] Косевич А.М. ФНТ 4, 7, 902 (1978).
- [3] Воронов В.П., Косевич А.М. ФНТ 6, 3, 371 (1980).
- [4] Молоцкий М.И., Ростовцев В.С. ФТТ 24, 9, 2564 (1982).
- [5] Вардамян Р.А., Киракосян Г.Г., Кравченко В.Я. ФТТ 30, 12, 3565 (1988).
- [6] Гольдфарб М.В., Молоцкий М.И., Шмурак С.З. ФТТ 32, 8, 2398 (1990).
- [7] Шикин В.Б., Шикина Н.И. ФТТ 30, 5, 1297 (1988).
- [8] Кусов А.А., Клиnger М.И., Закревский В.А. ФТТ 31, 7, 67 (1989).
- [9] Колюбякин А.И., Осипьян Ю.А., Шевченко С.А. ЖЭТФ 77, 3(9), 975 (1979).
- [10] Колюбякин А.И., Осипьян Ю.А., Шевченко С.А. ЖЭТФ 93, 7, 248 (1987).
- [11] Гончаров В.А., Осипьян Ю.А., Шевченко С.А. ФТТ 29, 7, 1928 (1987).
- [12] Кадич А., Эделен Д. Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций. М. (1987). 168 с.
- [13] Osipov V.A. Physica A175, 369 (1991).
- [14] Osipov V.A. J. Phys. A: Math. Gen. 26, 1375 (1993).
- [15] Osipov V.A. Phys. Lett. A193, 1, 97 (1994).
- [16] Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинация в кристаллах. Л. (1986). 223 с.

УДК 631.315.592

© Физика твердого тела, том 37, № 9, 1995
Solid State Physics, vol. 37, N 9, 1995

О НЕПАРАБОЛИЧНОСТИ СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ В Bi_2Te_3 И В ТВЕРДОМ РАСТВОРЕ $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$

С.А.Алиев, Ш.С.Исмаилов, И.Г.Тагиев

Институт физики академии наук Азербайджана,

370143, Баку, Азербайджан

(Поступило в Редакцию 23 июня 1994 г.

В окончательной редакции 15 марта 1995 г.)

В работе [1] теоретически рассмотрено взаимодействие зоны проводимости с валентной зоной в узкозонных полупроводниках с экстремумами, смещенными в k -пространстве (Bi_2Te_3 и его аналоги), и показано, что оно приводит к непараболичности зон. Однако в отличие от кейновского спектра, справедливого для узкозонных полупроводников с экстремумами, расположенными в одних и тех же симметричных точках зоны Бриллюэна, в этом случае появляются нечетные по k -члены, начиная с кубического. В [2] нами сообщалось о непараболичности зоны проводимости Bi_2Te_3 .

В данной работе анализируются результаты по исследованию концентрационных и температурных зависимостей эффективных масс электронов Bi_2Te_3 и твердого раствора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$. Проведено комплексное исследование термоэлектрических и термомангнитных