

СПЕКТР ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ, ЛОКАЛИЗОВАННЫХ НА КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ, В МОДЕЛИ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОТЕНЦИАЛА

М. А. Разумова, В. Н. Хотьянцев

В настоящее время для незаряженных дислокаций существуют две основные модели дислокационных электронных состояний: модель «оборванных связей» [1], которая учитывает короткодействующий потенциал разорванных ковалентных связей в ядре дислокации, и являющаяся предметом исследования в настоящей работе модель деформационного потенциала [2-7], в которой локализация электронов или других квази-частиц связывается с дальнедействующим деформационным полем дислокации. Движение частиц рассматривается в приближении эффективной массы, а влияние деформации — в приближении деформационного потенциала.

Будем рассматривать случай простой изотропной зоны (эффективная масса m^*) и изотропного тензора деформационного потенциала $D_{ij} = D\delta_{ij}$. Для единичной прямолинейной краевой дислокации в приближении изотропной упругой среды движение частицы в поле дислокации описывается уравнением Шредингера с потенциалом

$$U(r) = \Delta b \frac{\cos \varphi}{r}, \quad \Delta = \frac{1}{2\pi} \frac{1-2\sigma}{1-\sigma} D, \quad (1)$$

где b — вектор Бюргерса; σ — коэффициент Пуассона; r, φ — цилиндрические координаты; ось Oz направлена вдоль дислокационной линии, а полярная ось перпендикулярна плоскости скольжения.

Отличительной особенностью потенциала дислокации (1), которая сохраняется и в анизотропном случае, является зависимость от расстояния вида $U \sim 1/r$. Энергетический спектр локализованных состояний представляет собой одномерные зоны, причем спектр поперечного движения может быть записан в виде, аналогичном спектру атома водорода

$$\epsilon_n(k_{\parallel}) = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + \epsilon_{n\perp}, \quad \epsilon_{n\perp} = -\alpha_n \frac{m^* b^2}{\hbar^2} \Delta^2, \quad (2)$$

где α_n — безразмерная глубина уровня, $n = (1, \infty)$.

Спектр высоковозбужденных состояний в рассмотренной модели получен в работе [6] в квазиклассическом приближении

$$\alpha_n = 1/8n, \quad n \gg 1. \quad (3)$$

Для основного состояния были выполнены оценки вариационным методом [2, 4]. Наибольшее, а следовательно, наиболее точное значение α_1 , полученное в работе [4], равно

$$\alpha_1 = 0.262. \quad (4)$$

В работе [5] изучена упрощенная модель, в которой угловая зависимость потенциала (1) заменена ступенчатой: $\cos \varphi$ заменялся на единицу при $-\pi/2 < \varphi < \pi/2$, а при $\pi/2 < \varphi < 3\pi/2$ потенциал считался бесконечным. Модель допускает аналитическое решение

$$\alpha_n = 1/2(n + 1/2)^2, \quad n = (1, \infty), \quad (5)$$

причем каждый уровень n -кратно вырожден.

В настоящей работе проведен численный расчет энергий нескольких нижайших состояний. Потенциал (1) является четной функцией φ , поэтому все состояния разделяются на симметричные (s) и антисимметричные

(а) относительно отражения в плоскости $\varphi=0$. Волновая функция определенной симметрии раскладывалась в ряд Фурье по φ , причем учитывалось конечное число гармоник N . В результате уравнение Шредингера сводилось к системе $2N$ обыкновенных дифференциальных уравнений для радиальных функций, которая решалась с применением методов переноса граничных условий [8].

Для симметричных состояний получены следующие значения:

$$\alpha_1^s = 0.2681, \quad \alpha_2^s = 0.0825, \quad \alpha_3^s = 0.040, \quad (6)$$

для антисимметричных состояний

$$\alpha_1^a = 0.0468, \quad \alpha_2^a = 0.011, \quad \alpha_3^a = 0.004. \quad (7)$$

Погрешность не превышает единицы последнего разряда. Максимальное число использованных гармоник $N=8$. Для основного состояния три правильных знака дают уже четыре гармоники.

Примененный метод расчета и прямой вариационный метод Ритца, в котором пробная функция имеет вид разложения по тому же числу угловых гармоник N , должны давать одну и ту же энергию основного состояния. Поэтому в качестве тестовых использовались результаты аналитических вариационных расчетов энергии нижайшего симметричного состояния при учете двух гармоник, полученные в [4], а также результаты для нижайшего антисимметричного состояния при учете двух и трех гармоник, полученные нами. Обнаружено практически полное совпадение, причем значения, полученные численным методом, всегда несколько больше за счет более точного выбора радиальных функций.

Результаты (6), (7) в совокупности с квазиклассическим выражением (3) с удовлетворительной точностью перекрывают весь спектр локализованных дислокационных состояний в рассматриваемой модели. Из них следует, что погрешность аналитических вариационных расчетов энергии основного состояния [4] невелика, около 2,5 %. При этом волновая функция имеет сложную угловую зависимость, требующую учета по крайней мере четырех гармоник.

Приближенная модель, предложенная в работе [5], дает удовлетворительные результаты лишь для некоторых симметричных состояний. Для основного (первого симметричного) состояния ошибка составляет 20 %, для второго симметричного 2 %. Однако, согласно (5), уровень $n=2$ двукратно вырожден, в действительности же второе симметричное и первое антисимметричное состояния отличаются по энергии вдвое ($\alpha_2^s=0.0825$, $\alpha_1^a=0.0468$). Аналогичная ситуация имеет место и для уровня $n=3$. Для высоковозбужденных состояний совпадение также неудовлетворительное — значение плотности состояний, соответствующее формуле (5), в два раза больше истинного значения, следующего из (3).

В широкозонном полупроводнике с простыми изотропными зонами состояния, подобные рассмотренным, независимо отщепляются от потолка валентной зоны и дна зоны проводимости. В случае прямого разрешенного края поглощения оптические переходы между дырочными и электронными зонами дислокации формируют дислокационное крыло поглощения в области частот ниже края фундаментального поглощения. Его детальный анализ выходит за рамки настоящей работы, однако некоторые существенные особенности непосредственно следуют из полученных результатов.

Нижайший дислокационный уровень (6) значительно, в три раза, глубже первого возбужденного. Поэтому большая часть дислокационного крыла поглощения формируется переходами с участием наиболее глубокой дислокационной зоны.

Важным результатом работы является обнаруженное большое отличие в глубине нижайших уровней симметричных и антисимметричных состояний — примерно в 6 раз. Матричный элемент перехода между дырочной и электронной дислокационными зонами пропорционален инте-

граву перекрытия соответствующих волновых функций поперечного движения $\int \psi_{elq}^*(r, \varphi) \psi_{hkq}(r, \varphi) r dr d\varphi$. Поэтому разрешенными под действием света являются только переходы между дислокационными состояниями одинаковой симметрии. Таким образом, дислокационное крыло поглощения в основном формируется переходами только из симметричных состояний в симметричные.

Л и т е р а т у р а

- [1] Shockley W. // Phys. Rev. 1953. V. 91. N 1. P. 228.
- [2] Landauer R. // Phys. Rev. 1954. V. 94. N 5. P. 1386—1388.
- [3] Бонч-Бруевич В. Л. // ФТТ. 1961. Т. 3. № 1. С. 47—52.
- [4] Emtage P. R. // Phys. Rev. 1967. V. 163. N 3. P. 865—872.
- [5] Молодкий М. И. // ФТТ. 1969. Т. 11. № 8. С. 2380—2381.
- [6] Лифшиц Н. М., Пушкарлов Х. И. // Письма в ЖЭТФ. 1970. Т. 11. № 9. С. 456—459.
- [7] Winter S. // PSS. 1977. V. B79. N 2. P. 637—642.
- [8] Абрамов А. А., Диткин В. В., Конюхова Н. Б. // ЖВМиМФ. 1980. Т. 20. № 5. С. 1155—1173.

Киевский государственный университет
им. Т. Г. Шевченко
Киев

Поступило в Редакцию
21 марта 1988 г.
В окончательной редакции
15 сентября 1988 г.

УДК 537.94

Физика твердого тела, том 31, в. 2, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 2, 1989

ПРОЯВЛЕНИЕ ЭФФЕКТОВ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПАМЯТИ В СПЕКТРАХ ПОГЛОЩЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ $\{N(CH_3)_4\}_2CoCl_4$

О. Г. Влох, И. И. Половинко, С. А. Свелоба

В несоизмеренно-модулированных кристаллах недавно обнаружены эффекты, получившие название термической (ЭТП) и термооптической (ЭТОП) памяти [1⁻⁵]. ЭТП исследовался по диэлектрической проницаемости [2], рассеиванию нейтронов [4] и спектрам ЯКР [5]. ЭТОП наблюдался методами оптического двуупреломления δ (Δn) [3]. В частности, для наблюдения последнего эффекта кристаллы выдерживались в несоизмеренной (НС) фазе на протяжении нескольких часов при постоянной температуре. При дальнейшем изменении температуры в точке стабилизации появлялись слабые аномалии на зависимости $\Delta n = f(T)$. В работах [1⁻⁵] предполагалось, что в процессе стабилизации температуры поле несоизмеренной модуляции образует волну упорядоченных дефектов и примесей. Последняя, взаимодействуя с волной сверхструктуры, приводит к появлению аномалий Δn . Очевидно, что возникновение волны упорядоченных дефектов повлияет и на другие оптические свойства НС кристаллов.

В данной работе исследованы температурные и временные зависимости спектров оптического поглощения кристаллов $\{N(CH_3)_4\}_2CoCl_4$ ($(TMA)_2CoCl_4$). Они характеризуются сложной последовательностью фазовых переходов, включающих две НС фазы. В процессе охлаждения происходит переход из параэлектрической фазы I ($Pm\bar{c}n$) при $T_c = 293$ К в НС фазу II, далее при $T_c' = 280.1$ К в сегнетоэлектрическую фазу III ($P2_1cn$), при $T_c'' = 277.6$ К в другую НС фазу II, при $T_1 = 276$ К в фазу IV ($P112_1/n$), при $T_2 = 192$ К в фазу V ($P121/cn$) и при $T_3 = 122$ К в фазу VI ($P2_12_12_1$) [6].