

01;05

Электронное перераспределение в окрестности ядра линейной дислокации

© Р.М. Пелешак, Б.А. Лукиянец

Дрогобичский педагогический институт
Государственный университет "Львовська Политехника"Поступило в Редакцию 5 февраля 1997 г.
В окончательной редакции 16 июня 1997 г.

Работа посвящена самосогласованному решению электрон-деформационного взаимодействия в кристалле с линейной дислокацией. Показано, что такое самосогласование приводит к перераспределению заряда в окрестности ядра дислокации и, как результат, перенормировке деформации, вызванной дислокацией. Полученное перераспределение заряда образует диполь, момент которого пропорционален длине дислокации. Воздействием на такой диполь внешним динамическим или статическим электрическим полем можно влиять на кинетику дислокаций в кристалле.

В настоящее время для незаряженных дислокаций существуют две основные модели дислокационных электронных состояний: модель "оборванных связей" [1], учитывающая короткодействующий потенциал разорванных ковалентных связей в ядре дислокации, и модель деформационного потенциала [2,3]. Однако в этих моделях не учитывается самосогласованно, с учетом характера заполнения электронных энергетических зон, электрон-деформационное взаимодействие. Решению такой самосогласованной задачи в кристалле с линейной дислокацией и посвящена настоящая работа. С этой целью воспользуемся моделью, в которой состояние электронов проводимости изотропного металла описывается единственной орбитально-невырожденной зоной. Деформация, создаваемая механическим напряжением $\sigma_m(\mathbf{r})$, может приводить к смещению такой зоны на шкале энергий. Гамильтониан, учитывающий такой эффект, имеет вид (см. [5,6])

$$H = \sum_{i\sigma} [\omega + SU(\mathbf{r}_i)] c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} \lambda_{ij}^0 c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i K\Omega_0 U^2(\mathbf{r}_i) + H_c. \quad (1)$$

Здесь $c_{i\sigma}$ ($c_{i\sigma}$) — ферми-оператор рождения (уничтожения) электрона со спином σ в локализованном состоянии Ванье i ; ω — энергия, характеризующая положение середины электронной зоны; λ_{ij}^0 — интеграл электронного перемешивания в недеформированной решетке; S описывает сдвиг зоны проводимости при деформации; K — упругая жесткость решетки; $U(\mathbf{r}_i) = \text{Sp} \hat{U}(\mathbf{r}_i) = (\Omega - \Omega_0)/\Omega_0$ — параметр деформации, описывающий относительное изменение объема ячейки из-за дислокации (Ω_0 — исходный объем элементарной ячейки); H_c — гамильтониан кулоновского межэлектронного взаимодействия.

Для определения параметра деформации $U(\mathbf{r})$ используем условие механического равновесия [7]

$$\left\langle \frac{\partial H}{\partial U(\mathbf{r})} \right\rangle = \sigma_m(\mathbf{r})V, \quad (2)$$

где V — объем кристалла. Отсюда с учетом (1) получаем

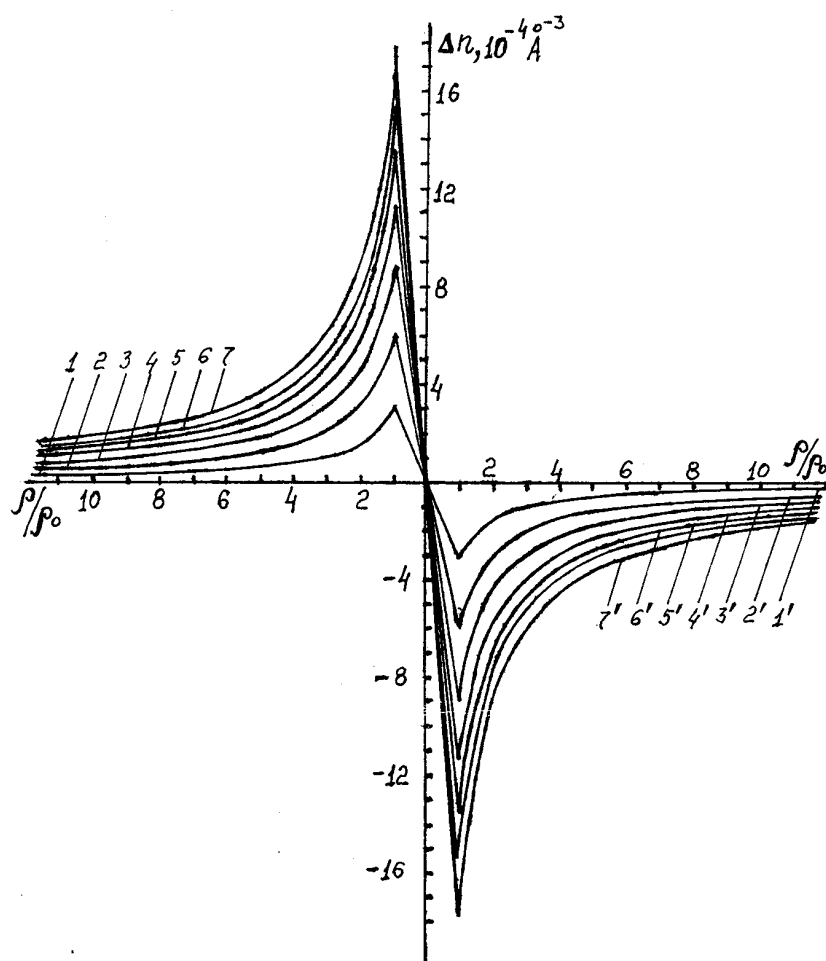
$$U(\mathbf{r}) = -\frac{S}{K\Omega_0} \sum_{kk'\sigma} \langle c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} \rangle \exp(-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{r}) + U_m(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Как следует из (3), параметр деформации состоит из "электронной" и механической $U_m(\mathbf{r})$ частей. В рассматриваемом случае линейной дислокации с линией такой дислокации вдоль оси OZ и осью OX вдоль вектора Бюргера $U_m(\mathbf{r})$ удобно представить в цилиндрической системе координат с полярными координатами в плоскости XOY в виде

$$U(\rho, \varphi, z) = \text{Sp} \hat{U}_m = \begin{cases} D \frac{\sin \varphi}{\rho}, & \rho \geq \rho_0 \\ \frac{D}{\rho_0} \rho \sin \varphi, & \rho \leq \rho_0 \end{cases} \quad (4)$$

(D — некая постоянная, ρ_0 — радиус ядра дислокации, равный (1–2) a , a — постоянная решетки). Выражение для $U_m(\rho, \varphi, z)$ в области $\rho \geq \rho_0$ получено из выражения для механического напряжения $\sigma_m(\rho, \varphi, z)$, предложенного в [4]; $U_m(\rho, \varphi, z)$ в области $\rho \leq \rho_0$ — аппроксимация работы [8].

Вычисление электронной составляющей параметра деформации в (3) сводится к определению коррелятора $\langle c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} \rangle$, что было сделано при помощи одночастичной функции Грина. В общем задача сводилась к решению системы из пяти уравнений: 1) концентрации электронов проводимости; 2) электростатического потенциала, возникающего вследствие изменения электронной плотности



Семейство кривых $\Delta n(\rho)$ при различных значениях φ (слева для $\varphi \in [0, \pi]$, справа — $[\pi, 2\pi]$) при $S = 4.0 \text{ eV}$, $n_0 = 10^{-5} \text{ \AA}^{-3}$, $K = 0.47 \text{ eV} \cdot \text{ \AA}^{-3}$. Кривые 1 при $\varphi = 10$ и 170° (1' при 190 и 370°), 2 — 20 и 160° (2' — 200 и 160°), 3 — 30 и 150° (3' — 210 и 350°), 4 — 40 и 140° (4' — 220 и 340°), 5 — 50 и 130° (5' — 240 и 320°), 6 — 70 и 110° (6' — 250 и 310°), 7 — 90° (7' — 270°).

$\Delta n(\rho, \varphi, z) = n(\rho, \varphi, z) - n_0$ в окрестности дислокации (n_0 — средняя концентрация электронов, приходящаяся на узел решетки с учетом электрон-деформационного взаимодействия) [6]; 3) волновой функции электрона в окрестности дефекта; 4) функции Грина и 5) химического потенциала. Такая система уравнений решалась методом последовательных приближений при $T = 0$ К. В качестве нулевого приближения была взята механическая часть параметра деформации [5,6]. В результате вычислений получены зависимости $\Delta n(\rho, \varphi, z)$. На рисунке представлено семейство кривых $\Delta n(\rho, \varphi, z)$ при различных углах φ в плоскости $z = \text{const}$ (слева представлены кривые $\Delta n(\rho, \varphi, z)$ для $\varphi \in [0, \pi]$, а справа — для $\varphi \in [\pi, 2\pi]$). Как следует из рисунка, такая зависимость антисимметрична относительно дислокации. Так как электронная составляющая параметра деформации равна $-S\Delta n(\rho, \varphi, z)/K$, то она с точностью до знака и постоянного множителя имеет такой же характер, что и $\Delta n(\rho, \varphi, z)$.

Полученное зарядовое перераспределение позволяет более определенно представить картину электронных состояний дислокации, предложенную в [9]. Если, согласно [9], в полупроводниковом кристалле ядро дислокации может либо накапливать на себе заряды, либо, наоборот, отдавать их, то, согласно нашим результатам, дислокация обладает обоими свойствами. В случае рассмотренного выше изотропного кристалла вдоль оси дислокации, антисимметрично от нее, имеет место переизбыток и дефицит (по сравнению с его средним значением в кристалле) электронов. Таким образом, образуется диполь, момент которого \mathbf{P} несложно оценить. Он будет равен

$$\mathbf{p} = e \iiint \Delta n(\rho, \varphi, z) \rho d\rho d\varphi dz \quad (5)$$

(интегрирование по z выбрано вдоль оси дислокации). Следовательно, в данном случае \mathbf{p} будет пропорционален длине оси дислокации. Наличие такого дипольного момента может быть использовано, в частности, для воздействия на кинетику дислокаций в кристалле путем наложения на них внешнего электрического поля. Действительно, такое поле из-за поляризации, согласно вышеприведенным выводам, может изменять электронную составляющую напряжения σ . Известно [9], что скорость дислокации v связана с напряжением σ и температурой T

соотношением

$$v = v_0 \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^m \exp \left(-\frac{E}{kT} \right), \quad (6)$$

где v_0 , σ_0 — постоянные, $m = 1-2$, E — энергия активации. Таким образом, изменение σ непосредственно влияет на v . Не исключено, что подобные изменения определенным образом отразятся и на энергии активации. Можно предположить, что эффект воздействия внешним электрическим полем будет зависеть от его ориентации относительно дислокации, от того, статическое или динамическое такое поле. Эти предположения требуют дополнительного исследования и выходят за рамки настоящей работы.

Список литературы

- [1] Shockley W. // Phys. Rev. 1953. V. 91. N 1. P. 228–232.
- [2] Лифшиц И.М., Пешкарёв Х.И. // Письма в ЖЭТФ. 1970. Т. 11. В. 9. С. 456–459.
- [3] Разумова М.А., Хотяинцев В.Н. // ФГТ. 1989. Т. 31. В. 2. С. 275–277.
- [4] Косевич А.М. Теория кристаллической решетки. Харьков: Виша школа, 1988. 304 с.
- [5] Пелешак Р.М. Электронные состояния деформация решетки кристалла при наличии точечных дефектов. // Препринт-69-5Р ИТФ АН УССР. Киев, 1989. 24 с.
- [6] Стасюк И.В., Пелешак Р.М. // УФЖ. 1991. Т. 36. В. 11. С. 1744–1749.
- [7] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1965. 204 с.
- [8] Корнюшин Ю.В., Пекар С.И. // ФГТ. Т. 6. В. 4. С. 1122–1128.
- [9] Судзуки Т., Есиага Х., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность. М.: Мир, 1989. 294 с.