

Особенности низкотемпературного фононного рассеяния в материалах с дисклинационными петлями наклонного типа

© С.Е. Красавин, В.А. Осипов

Объединенный институт ядерных исследований,
141980 Дубна, Московская обл., Россия

E-mail: krasavin@thsun1.jinr.ru

(Поступила в Редакцию 7 августа 2001 г.)

Изучается вопрос о рассеянии фононов полями статических напряжений круговой клиновидной дисклинационной петли в рамках метода деформационного потенциала. В результате численных вычислений средней длины свободного пробега l и теплопроводности κ показано, что в области низких температур имеется минимум в температурной зависимости κ при некоторой температуре T^* . С уменьшением температуры при $T < T^*$ κ резко растет, как T^{-3} , а при $T > T^*$ с увеличением температуры изменяется дислокационным образом ($\kappa \sim T^2$). Результаты, полученные для клиновидной дисклинационной петли, сравниваются с данными для одноосного дисклинационного диполя. Показано, что одноосные дисклинационные диполи как источники рассеяния фононов по своим свойствам близки к клиновидным дисклинационным петлям.

1. Хорошо известно, что дислокации наряду с другими структурными дефектами и химическими примесями являются определяющими источниками рассеяния фононов при температурах существенно ниже температуры Дебая Θ_D [1,2]. Рассеяние фононов статическими дислокациями приводит к квадратичной по температуре T зависимости теплопроводности κ . В то же время роль линейных ротационных дефектов (дисклинаций) в рассеянии фононов к настоящему времени исследована недостаточно, хотя известно, что данные дефекты играют существенную роль в нанокристаллических материалах [3], композитных [4] и топологически разупорядоченных системах [5]. Таким образом, вопрос о переносе тепла в широком спектре материалов с ротационной пластической деформацией остается открытым. Недавно [6,7] было исследовано температурное поведение теплопроводности, обусловленное вкладом статических дисклинационных диполей наклонного типа (клиновидный дисклинационный диполь — КДД) в тепловой транспорт. Изучались все типа КДД: одноосный диполь, двухосный диполь со смещенными и несмещенными осями ротации. Были получены точные выражения для средней длины свободного пробега фононов за счет статических полей напряжений для каждого типа диполей в борновском приближении.

Оказалось, что особенностью КДД как эффективных центров рассеяния фононов является наличие в них характерного линейного параметра — плеча диполя L , и характер рассеяния зависит от соотношения между длиной волны падающего фонона λ и L . В частности, обнаружено, что смена режима рассеяния реализуется при условии $\lambda \sim L$, что в приближении тепловых фононов приводит к оценке температуры перехода $T^* \approx \hbar v_s / 2Lk_B$ (см., например, [6]). Было показано также, что одноосный и двухосный КДД с несмещенными осями ротации, будучи двумя предельными случаями произвольного КДД, являются совершенно разными объектами с точки зрения рассеяния фононов. Одноосный диполь является сильно экранированной системой

в отличие от двухосного КДД [6], что проявляется в сильной зависимости длины свободного пробега l от волнового вектора \mathbf{k} в длинноволновом пределе ($l(k) \sim k^{-5}$ при $\lambda \ll L$). В пределе коротких волн для одноосного КДД наблюдается дислокационный характер рассеяния с $l(k) \sim k^{-1}$. В то же время для двухосного КДД с несмещенными осями ротации $l(k) \sim k^{-1}$, если $\lambda \ll L$, и $l(k) \rightarrow \text{const}$ в противоположном пределе. Такое поведение двухосного КДД заметно выделяет его среди других подобных дефектов.

В данной работе рассматривается другой стабильный дисклинационный объект — круговая клиновидная дисклинационная петля (КДП) [8,9]. Интерес к задаче о рассеянии фононов статическими полями напряжений КДП вызван тем, что дисклинационные петли являются, по всей видимости, наиболее распространенными элементами трехмерной дисклинационной структуры в большинстве реальных сред. Результаты, полученные для КДП, сравниваются с другим дисклинационным дефектом — одноосным КДД.

2. Рассмотрим задачу об упругом рассеянии фононов статическими полями напряжений клиновидной дисклинационной петли в рамках метода потенциала деформации [1,10]. Энергия возмущения фонона в данном подходе связана с относительным изменением объема, возникающим из-за деформаций, созданных в результате помещения в среду КДП. В этом случае потенциал деформации имеет вид [1]

$$U(\mathbf{r}) = \hbar\omega\gamma \text{Sp} E_{ij}, \quad (1)$$

где $\hbar\omega$ — энергия фонона с волновым вектором \mathbf{k} , $\omega = kv_s$, v_s — средняя скорость звука в среде, γ — постоянная Грюнайзена и $\text{Sp} E_{ij}$ — след тензора деформации, обусловленный КДП.

Пусть петля радиуса R находится в плоскости $z = 0$ цилиндрической системы координат (r, φ, z) с осью поворота, проходящей через начало координат, и вектором Франка, имеющим координаты $(0, \Omega, 0)$ относительно

выбранного базиса (несмещенная КДП). Используя явное выражение для тензора деформации КДП с несмещенной осью ротации E_{ij} (см. [9,11]), получаем для энергии возмущения (1)

$$U(\mathbf{r}) = A \cos \varphi J(2, 1; 1), \quad (2)$$

где $A = \hbar k v_s \pi \gamma \nu (1 - 2\sigma) / (\sigma - 1)$, $\nu = \Omega / 2\pi$ — индекс Франка, σ — коэффициент Пуассона, $J(2, 1; 1) = \int_0^\infty J_2(K) J_1(Kr/R) \exp(-K|z|/R) K dK$ — интеграл Лифшица–Ханкеля, $J_m(x)$ — функция Бесселя первого рода.

В борновском приближении матричный элемент, описывающий переход фонона из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' , имеет вид

$$\langle \mathbf{k} | U(r) | \mathbf{k}' \rangle = \frac{1}{V} \int d^3r U(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}), \quad (3)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$. Учитывая осевую симметрию рассматриваемого дефекта, удобно ввести цилиндрическую систему координат в (3). В этом случае с учетом (2) матричный элемент имеет следующий вид:

$$\langle \mathbf{k} | U(r) | \mathbf{k}' \rangle = 4\pi i R^2 \cos \alpha \frac{A}{V} \frac{q_\perp}{q_\perp^2 + q_z^2} J_2(q_\perp R), \quad (4)$$

где α определяет угол между $\mathbf{q}_\perp = (q_x, q_y)$ и осью x . Для упрощения дальнейших вычислений рассмотрим ситуацию, когда импульс падающего фонона направлен вдоль оси k_x и выберем цилиндрическую систему координат (k_\perp, ϕ, k_z) в k -пространстве. В этом случае можно получить следующее выражение для средней длины свободного пробега:

$$l^{-1}(k) = \frac{VNk}{(2\pi\hbar v_s)^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^k dk'_z \overline{|\langle \mathbf{k} | U(r) | \mathbf{k}' \rangle|^2} (1 - \cos \theta), \quad (5)$$

где N — число дефектов, θ — угол рассеяния (для упругого рассеяния $q = |\mathbf{q}| = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin(\theta/2)$). Черта сверху над квадратом матричного элемента означает усреднение по углу α . Угол θ может быть выражен через ϕ следующим образом: $1 - \cos \theta = 1 - \sqrt{1 - (k'_z/k)^2} \cos \phi$. Используя уравнения (4) и (5), получаем окончательное выражение для средней длины свободного пробега

$$l^{-1}(k) = n_d R^4 k^2 B \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^1 dz \frac{1 - \sqrt{1 - z^2} \cos \phi - z^2/2}{1 - \sqrt{1 - z^2} \cos \phi} \times J^2 \left(Rk \sqrt{2 - z^2 - 2\sqrt{1 - z^2} \cos \phi} \right), \quad (6)$$

где $z = k'_z/k$, $n_d = N/V$ — концентрация дефектов, $B = (\pi \gamma \nu (1 - 2\sigma) / (1 - \sigma))^2$.

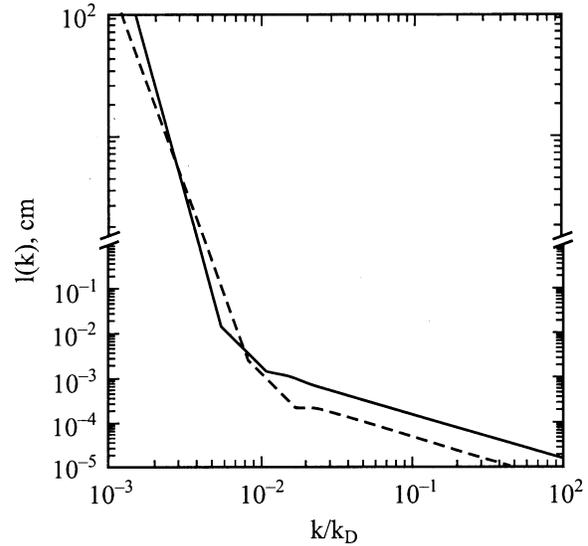


Рис. 1. Зависимость средней длины свободного пробега фонона (6) от приведенного волнового вектора k/k_D ($k_D = \omega_D/v_s$) для набора параметров: $R = L = 2 \cdot 10^{-6}$ см, $\nu = 0.1$, $v_s = 4 \cdot 10^5$ см/с, $B = 0.01$, $n_d = 10^{15}$ см $^{-3}$. Зависимость $l(k/k_D)$ для одноосного КДД показана штриховой линией с тем же набором параметров, за исключением $n_d = 6 \cdot 10^9$ см $^{-3}$.

На рис. 1 приведены зависимости $l(k)$, полученные в результате численных расчетов, для круговой КДП по формуле (6) и одноосного КДД (из работы [6]) при условии, что $R = L$ (L — плечо диполя) и мощности дефектов, характеризуемые индексом Франка ν , одинаковы. Как видно из рисунка, для обоих дефектов существуют два четко выраженных режима рассеяния при $kR \lesssim 1$ и $kR \gtrsim 1$ ($k^* \sim 1/R$ — точка на кривой, соответствующая смене режима рассеяния). В длинноволновом пределе $kR \lesssim 1$, согласно рис. 1, длина свободного пробега $l(k)$ при рассеянии фононов полем напряжений КДП быстро возрастает с уменьшением k . Это возрастание даже более резкое, чем в случае одноосного КДД, где $l(k) \sim k^{-5}$ [6]. Анализ уравнения (6) при $k \rightarrow 0$ приводит к оценке $l(k) \sim k^{-6}$. Такая сильная k -зависимость для $l(k)$ характерна для дефектов конечного размера и объясняется отсутствием интерференции при рассеянии от различных участков дефекта в длинноволновом пределе (длина волны больше размера дефекта) [12]. Таким образом, круговая КДП является еще более самоэкранированной системой, чем одноосный дисклинационный диполь. Следует отметить, что в обоих рассматриваемых случаях в длинноволновом пределе зависимость $l(k)$ сильнее, чем в случае точечной примеси, где $l(k) \sim k^4$ (рэлеевское рассеяние) [2]. В противоположном пределе коротких волн $kR \gtrsim 1$ поведение $l(k)$ для круговой КДП является дислокационным, как и для одноосного КДД, а именно $l(k) \sim 1/k$ (см. [6,7]).

Вклад в теплопроводность, обусловленный рассеянием фононов за счет КДП, может быть оценен с помощью следующей известной кинетической формулы,

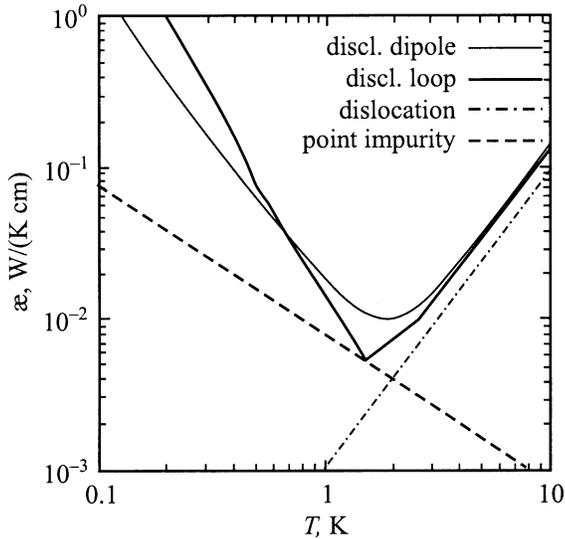


Рис. 2. Зависимость теплопроводности от температуры, вычисленной по формуле (7), с длиной свободного пробега из (6) (в случае КДД длина свободного пробега взята из работы [6]). Используемые параметры те же, что и для рис. 1 ($\Theta_D = 300$ К). Для сравнения приведены также кривые для дислокации и точечной примеси.

записанной в безразмерном виде:

$$\kappa = \frac{k_B^4 T^3}{2\pi^2 \hbar^3 v_s^2} \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} l(x) dx, \quad (7)$$

где $x = \hbar k v_s / k_B T = \hbar \omega / k_B T$, $\Theta_D = \hbar \omega_D / k_B$, $l(x)$ определяется уравнением (6).

Результаты численных расчетов теплопроводности κ от температуры, обусловленной рассеянием фононов статическими полями напряжений круговой КДП, представлены на рис. 2. На этом же рисунке приведены зависимости $\kappa(T)$ для одноосного КДД, дислокации и точечной примеси. Поведение $\kappa(T)$ для круговой КДП объясняется зависимостью $l(k)$ (см. обсуждение выше). Именно из рис. 2 видно, что для выбранных модельных параметров в (6), (7), при $T^* \approx 2$ К, существует минимум в $\kappa(T)$ как для КДП, так и для одноосного КДД. В области температур ниже T^* κ резко возрастает. Этот рост соответствует росту длины свободного пробега $l(x)$ в (7) при $T \rightarrow 0$ в соответствии с законом $l(k) \sim k^{-6}$ для КДП и $l(k) \sim k^{-5}$ для КДД в длинноволновом пределе. В результате при $T < T^*$ вклад в теплопроводность, обусловленный рассеянием фононов на статических полях напряжений круговой КДП, пропорционален T^{-3} (T^{-2} в случае КДД). Отметим, что κ ниже T^* в рассматриваемом случае растет существенно быстрее, чем для точечной примеси, где $\kappa \sim T^{-1}$ (штриховая линия на рис. 2). Вблизи T^* возбуждаются главным образом фононы с длиной волны, сравнимой с характерным размером дефекта ($kR \sim 1$) в отличие от рассмотренного выше случая $kR \lesssim 1$, где дефект является слабым

рассеивателем тепловых фононов. При $kR \sim 1$ возникает сильное рассеяние на границе дефекта, что приводит в свою очередь к подавлению теплового транспорта. Выше T^* для обоих дефектов КДП и КДД теплопроводность имеет дислокационное поведение $\kappa \sim T^2$ (рис. 2) ($l(k) \sim 1/k$). Рост κ выше точки минимума может быть объяснен увеличением числа коротковолновых возбуждений, для которых локальная передача тепла от одного фонона к другим осуществляется быстрее, чем рассеяние на КДП (КДД), имеющее дислокационный характер и приводящее к подавлению теплопроводности.

3. В данной работе исследовался вклад в теплопроводность, обусловленный рассеянием фононов статическими полями напряжений круговой КДП в низкотемпературной области ($T < \Theta_D$). Было показано, что дефекты типа КДП как источники рассеяния фононов близки по своим свойствам к дисклинационным диполям, имеющим общую ось ротации (одноосный КДД). Рассеяние фононов на этих дефектах при различных температурах приводит к нетривиальной зависимости $\kappa(T)$. Существует определенный диапазон температур вблизи T^* , где κ оказывается сильно подавленной и растет выше и ниже T^* (рис. 2), как T^{-3} (T^{-2} для КДД), с уменьшением температуры при $T < T^*$, и как T^2 , если $T > T^*$. Таким образом, круговая КДП и одноосный КДД являются специфическими дефектами с точки зрения рассеяния фононов, демонстрирующими совершенно различное поведение в зависимости от длины волны фонона. В области длинных волн свойства этих дефектов ближе к точечной примеси (сильная экранировка полей напряжений), тогда как в коротковолновом пределе рассеяние имеет дислокационный характер.

Очевидно, что для реальных материалов, содержащих подобные дефекты, картина может быть несколько иной ввиду наличия других источников рассеяния. Так, например, в области низких T должно существовать рассеяние на границах кристаллитов внутри образца (предельный случай — границы образца), ограничивающее бесконечный рост κ ниже области минимальной проводимости. Расчеты показывают, что включение этого канала рассеяния приводит к наличию дополнительного максимума в области очень низких T . Также в исследуемых материалах могут существовать дефекты другого типа, которые вносят свой вклад в суммарную κ . В то же время необходимо подчеркнуть, что минимум κ , полученный в результате численных расчетов, находится в таком температурном интервале ($0.1 < T^* < 10$ К), где другие основные механизмы рассеяния (например, процессы переброса) не вносят заметного вклада в рассеяние. По этой причине эффект, связанный с подавлением теплопроводности в низкотемпературной области, может быть обнаружен экспериментально. Кроме того, такое поведение κ является весьма уникальным и служило бы косвенным подтверждением в случае обнаружения наличия КДП и КДД в исследуемом материале.

Расчет температурной зависимости κ , где учитываются другие источники рассеяния, наряду с рассеянием на клиновых дисклинационных петлях и одноосных диполях предполагается сделать в следующей работе.

Список литературы

- [1] Дж. Займан. Электроны и фононы. ИЛ, М. (1962).
- [2] P. Carruthers. *Rev. Mod. Phys.* **33**, 1, 92 (1961).
- [3] С.Г. Зайченко, А.М. Глезер. *ФТТ* **39**, 11, 2023 (1997).
- [4] И.А. Овидько. *ФТТ* **41**, 9, 1637 (1999).
- [5] A. Richter, A.E. Romanov, W. Pompe, V.I. Vladimirov. *Phys. Stat. Sol. (b)* **122**, 1, 35 (1984).
- [6] V.A. Osipov, S.E. Krasavin. *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, L639 (1998).
- [7] S.E. Krasavin, V.A. Osipov. *J. Phys.: Condens. Matter* **C13**, 1023 (2001).
- [8] Н.Н. Куо, Т. Мура. *J. Appl. Phys.* **43**, 4, 1454 (1972).
- [9] В.А. Лихачев, Р.Ю. Хайров. Введение в теорию дисклинаций. ЛГУ, Л. (1975).
- [10] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. Наука, М. (1984).
- [11] В.И. Владимиров, А.Е. Романов. Дисклинации в кристаллах. Наука, Л. (1986).
- [12] П. Клеменс. Физика низких температур. ИЛ, М. (1959). С. 236.