ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՍՍՀ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ
ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР
LXV 1977 5

УДК [548.0 : 53] + 530.145

ФИЗИКА

Г. А. Варданян

О рассеянии вакансиона на примесоне

(Представлено чл.-корр. АН Армянской ССР Г. С. Саакяном 13/X 1977)

Согласно теории А. Ф. Андреева и И. М. Лифшица, любые точечные дефекты в квантовом кристалле превращаются в делокализованные квазичастицы ([1]). Например, вакансии превращаются в так называемые вакансионы или вакансионные волны, примеси—примесоны и т. д. ([1–3]).

Ширина энергетической зоны Δ_0—вакансиона порядка 1° K т. е. значительно превосходит ширину зоны примесона ([3,4]). Поэтому, взаимодействие этих квазичастиц можно рассматривать, пренебрегая собственным туннелированием примесона, т. е. как процесс рассеяния вакансиона на примесном атоме ([4]).

Для ряда задач (эффекты увлечения примесонов вакансионами и т. д.) возникает вопрос о передаче импульса от рассеянных вакансионов примесонам.

Ниже будет показано, что в некоторых предельных случаях величина переданного импульса зависит от конкретного механизма рассеяния. Вдоль некоторых определенных кристаллографических направлений возникают особенности.

Процесс рассеяния вакансиона на примесоне описывается уравнением Лифшица ([5,6]).

$$\sum_{\vec{R}'} A_{\vec{R}-\vec{R}'}\varphi(\vec{R}') - z\varphi(\vec{R}) + V\sum_{\vec{R}'}\delta_{\vec{R}\vec{R}'}\varphi(\vec{R}')=0. \tag{1}$$

Общее решение этого уравнения, согласно результатам работы ([5]), может быть записано в виде:

$$\varphi(\vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} - \tau V\int\frac{e^{i\vec{\varkappa}\vec{R}}d\vec{\varkappa}}{\varepsilon(\vec{\varkappa})-z}, \tag{2}$$

$$(\tau V)^{-1} = \int\frac{d^3\varkappa}{\varepsilon(\vec{\varkappa})-z}. \tag{3}$$

Узость энергетической зоны приводит к тому, что рассеяние происходит при достаточно больших значениях прицельного параметра, так как обе квазичастицы не могут находиться ближе, чем ρ (где ρ определяется из условия $U(\rho) \sim \Delta$ [3]).

Сложный вид закона дисперсии в уравнении (2) приводит к своеобразному явлению: угол рассеяния определяется направлением скорости вакансиона после столкновения. Число волн после столкновения равно числу листов поверхности $\varepsilon(\vec{x}) = \varepsilon$. Каждая волна имеет свою форму и свою скорость распространения в каждом направлении. Так, например, если поверхность трехлистна, то соответственно распространяются три вакансионные волны одновременно.

Запишем изменение квазимпульса в акте рассеяния следующим образом:

$$\vec{p}' - \vec{p} = \vec{n}\delta_{\parallel} + \vec{\nu}\delta_{\perp}, \tag{4}$$

где $\delta_{\parallel}$ и $\delta_{\perp}$ — изменение квазимпульса вдоль направления скорости $\vec{n} = \vec{v}/v$ и в перпендикулярном направлении $\vec{\nu} = \vec{\rho}/\rho$. Тогда закон сохранения энергии можно представить в виде ряда по $\delta_{\parallel}$ и $\delta_{\perp}$ с точностью до членов второго порядка, получим:

$$O = v(\vec{n}\delta_{\parallel} + \vec{\nu}\delta_{\perp}) + \frac{a_{\perp}}{2}\delta_{\perp}^2 \nu_i \nu_k,$$

т. е.

$$v\delta_{\parallel} = -\frac{1}{2} a_{\perp} \delta_{\perp}^2 \nu_i \nu_k. \tag{5}$$

В том случае, когда $\vec{n}$ — направлен вдоль кристаллографической оси выше второго порядка (например, гексогональная ось в ГУП He), коэффициент $a_{\perp}$ в некоторой точке $p = p_0$ может обращаться в нуль, тогда:

$$v\delta_{\parallel} = -b\delta_{\perp}^4 \nu_i \nu_k \tag{6}$$

либо, когда $v = 0$

$$\delta_{\parallel} = \sqrt{\frac{1}{a_{\parallel}}(\delta_0 - b\delta_{\perp}^4)}, \tag{7}$$

где $a_{\parallel}$ — коэффициент в разложении при $\delta_{\parallel}^2$, $\delta_0 = \varepsilon - 2\varepsilon(p_0/2)$. Ниже δ_0 — будет определена.

Величина $\delta_{\perp}$ — легко может быть определена из уравнений движения [7]

$$\delta_{\perp} = -\frac{\rho}{v}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial v}{\partial r}\frac{dx}{r}, \quad r = \sqrt{\rho^2 + x^2}. \tag{8}$$

Усредняя по азимутальному углу, можно из (6) и (8) определить средний импульс, передаваемый единичным потоком вакансионов с прицельным параметром ρ в единицу времени

$$\bar{\delta}_{\parallel} = -\frac{1}{4v} a_{\perp} \delta^2_{\perp}. \qquad (9)$$

Энергия взаимодействия вакансиона с примесью имеет вид $U(r) = V_0(a/r)^3$, где V_0—некоторая характерная энергия взаимодействия [1]. При $V_0 > 0$ вакансион не может проникать в область $r < \rho = a(V_0/\Delta)^{1/3}$. В этом случае в координатном пространстве есть точка остановки. В тех случаях, когда точки остановки нет, сила меняет знак, т. е. $\dot{\delta}_{\perp} = 0$, имеется точка остановки в p-пространстве. В принципе, такая картина движения давно известна из теории электронов в металлах [7], с тем лишь отличием, однако, что ширина энергетической зоны для электронов, вообще говоря, является огромной.

Согласно (4) $\varepsilon(\vec{p})$ можно представить в виде:

$$\varepsilon(\vec{p}) = \varepsilon(\delta_{\parallel}) + \varepsilon(\delta_{\perp}).$$

В результате столкновений вакансион движется в плоскости, перпендикулярной $\delta_{\parallel}$, с коэффициентом диффузии:

$$D_{\perp} = v_{\perp} l, \qquad (10)$$

где $v_{\perp}$—скорость в этой плоскости, l—длина свободного пробега $\sim a^3_{\perp}/\sigma x$, $a_{\perp}$—поперечный период.

В течение времени t—вакансион проходит расстояние $l_1 \sim (D_{\perp} t)^{1/2}$, а в направлении по оси симметрии $l_2 \sim v_{\parallel}\tau$. Следовательно, коэффициент диффузии:

$$D_{\parallel} \sim (l_2/a_{\perp}) D_{\perp}. \qquad (11)$$

Волновую функцию вакансиона с энергией (5) получим из (2):

$$\varphi = \frac{i\pi^{-3/2}}{8R_{\parallel} a_{\perp}} e^{-iR_{\parallel}\frac{\varepsilon}{v}} e^{-vR^2_{\perp}/8R_{\parallel}a_{\perp}} D_{-2}\left(-\frac{R_{\perp}\sqrt{v}}{\sqrt{2R_{\parallel}a_{\perp}}}\right).$$

$$D_{-2}(z) = e^{z^2/4}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\left\{z[1-\Phi(z/\sqrt{2})] - \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-z^2/2}\right\} \qquad (12)$$

а величину δ_0 определим из (3): (см. [8])

$$\delta_0 = 4b\Lambda^4 e^{-2/g}$$

$$g = -(\pi V)^{-1}/8\pi(a_{\parallel} b)^{1/2}, \qquad (13)$$

где Λ—порядка периода обратной решетки.

Выражаю глубокую благодарность академику И. М. Лифшицу за полезные советы.

Ереванский государственный университет

Գ. Ա. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

Պրիմեսոնի վրա վականսիոնի ցրման մասին

Պրիմեսոնի էներգետիկական զոնայի լայնությունը շատ փոքր է վականսոնի էներգետիկական զոնայի լայնության համեմատ։ Այդ պատճառով, ցրման պրոցեսում պրիմեսոնը կարելի է դիտարկել անշարժ, որը հնարավորություն է տալիս ճշգրիտ հաշվել իմպուլսի փոփոխությունը բյուրեղական առանցքների նկատմամբ։

ЛИТЕРАТУРА—ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

[1] *А. Ф. Андреев, И. М. Лифшиц*, ЖЭТФ, 56, 2057, 1969. [2] *R. A. Guyer, L. I. Zane*, Phys. Rev. Lett. 24, 660 (1970). [3] *А. Ф. Андреев*, УФН, 118, 251, 1976. [4] *J. H. Hetherington*, Phys. Rev. 176, 231 1968. [5] *И. М. Лифшиц*. Nouvo Cimni. suppl. 3, 716, 1954. [6] *И. М. Лифшиц, Г. А. Варданян*. ДАН Арм. ССР, т. LVIII № 2 (1974). [7] *М. И. Коганов, И. М. Лифшиц, В. Б. Фик-*, ФТТ, 6, 2723, 1964. [8] *Л. П. Питаевский*, ЖЭТФ 70, 738, 1976.