ՀԱՅԿԱԿԱՆ ՍՍՀ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ
ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР
LXVII 1978 1

УДК [548.0 : 53] + 530.145

ФИЗИКА

Г. А. Варданян

Связанное состояние перегибов в квантовом кристалле

(Представлено чл.-корр. АН Армянской ССР Г. С. Саакяном 26/I 1978)

Состояние квазичастиц в квантовом кристалле классифицируется по значениям квазимпульса $\vec{p}$ и соответствующей энергией E [1,2]. В том случае, когда речь идет о квазичастицах типа перегибов на дислокациях, расположенных в плоскости скольжения под некоторым углом к кристаллографическим направлениям, согласно теории Андреева, зависимость энергии перегиба от одномерного квазимпульса дается выражением [3].

$$E(p)=E_0+2\hbar J\cos\left(\frac{pa}{\hbar}\right), \tag{1}$$

где E_0—энергия локализованного перегиба в классическом пределе.

Пусть два перегиба взаимодействуют через потенциал [3] $\beta\delta_{xx'}$, μ—модуль сдвига, $\mu\sim\beta a^{-4}$ и x, x'—дискретные величины. На этот процесс взаимодействия дискретность пространства оставляет яркий отпечаток, в результате возникают своеобразные особенности, которые и рассматриваются в настоящей работе. Ниже будет показано, что в спектре энергии перегиба возникает локализованный уровень, который отщепляется от зоны. Этот уровень под действием дополнительного возмущения (малого притяжения) либо сдвигается по отношению границы зоны, либо уширяется, не смещаясь.

Взаимодействия перегибов в дискретном пространстве кристалла описываются уравнением Лифшица [4,5]:

$$\sum_{x'} A_{x-x'}\Psi(x')+\sum_{x} U(x,x')\Psi(x')=Z\Psi(x), \tag{2}$$

где

$$E(p)=\sum_{x} A_x e^{ipx}. \tag{3}$$

Рассматриваемый потенциал удовлетворяет условию вырожденности, т. е. его можно представить в виде произведения двух функций, зависящих от x и x'. Влияние действия каждой из этих функций на Ψ дает его значение в другой точке.

Исходя из этих рассуждений и используя разложение (3), уравнение (2) запишем в импульсном представлении, интегрируя которое получим:

$$\Psi(x)=\frac{\beta}{2\hbar J}\left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2-1}-\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2-1}}\right)^{x/a}, \tag{4}$$

где

$$\varepsilon=\frac{E_0-Z}{2\hbar J}.$$

Спектр энергии определяется соответствующим граничным условием налагаемым на волновую функцию, что дает:

$$1=\frac{\beta}{V}\int\frac{dp}{\varepsilon(p)-Z}. \tag{5}$$

Отсюда следует, что существует отщепленный от зоны уровень Z_0:

$$Z_0=E_0+\Delta\sqrt{1+\left(\frac{\beta}{\Delta}\right)^2}. \tag{6}$$

С помощью уравнений Дайсона для такого уравня имеем следующую функцию Грива:

$$G_{xx'}=G^0_{xx'}+\frac{\beta G^0_{x0}G_{0x'}}{1-\beta G^0}, \tag{7}$$

где

$$G^0=\frac{1}{\Delta . n}\frac{\sum}{p}\frac{1}{\varepsilon-\cos pa-i\delta}. \tag{8}$$

Выражение для $G_{xx'}$ позволяет найти плотность состояний в спектре $\nu(\varepsilon)$, которое связано с функцией Грина известным соотношением: $\nu(\varepsilon)=\frac{1}{\pi n}\,\mathrm{Im}SpG(\varepsilon)$

Из выражений (7) и (8) для $\nu(\varepsilon)$ имеем:

$$\nu(\varepsilon)=\nu_0(\varepsilon)+\frac{1}{\pi n}\mathrm{Im}\frac{d}{d\varepsilon}\ln\left|1-\beta G^0(\varepsilon)\right|, \tag{9}$$

где

$$G^0(\varepsilon)=\mathrm{Re}G^0(\varepsilon)+i\mathrm{Im}G^0(\varepsilon). \tag{10}$$

Как следует из выражения (9)

$$1-\beta\mathrm{Re}G^0(\varepsilon)=0. \tag{11}$$

Это означает, что в некоторой точке плотность состояний увеличивается по отношению к уровням энергии в обычном кристалле. Следовательно, функция $\nu(\varepsilon)$ в точке $\varepsilon=\pm\sqrt{1+\left(\frac{\Delta\cdot n}{\beta}\right)^2}$ имеет максимум, и вблизи этой точки

$$\nu(\varepsilon)=\nu_0(\varepsilon)+\frac{1}{\pi n}\frac{\Gamma_0}{(\varepsilon-\varepsilon_0)^2+\Gamma_c^2}, \tag{12}$$

где

$$\Gamma_0=-\frac{i\pi\Delta}{a}\frac{|\varepsilon_0|}{\varepsilon_0}$$

ширина этого максимума. Если ε_0 лежит в полосе этого спектра $E(p)$, то эту ситуацию можно трактовать как наличие в системе некоторого виртуального уровня, а в том случае, когда ε_0 лежит вне полосы этого спектра, в системе появляются дискретные уровни, соответствующие связанным состояниям ([3,7,8]).
Эти состояния, по-видимому, являются аналогами паре квазичастиц, которые могут свободно двигаться только в гексогональной плоскости кристалла ([3]).

Рассмотрим влияние малого ($v'\ll\beta$) возмущения на локализованное состояние перегиба. Разложим $\det|1-G^0(E)v'|$ определяющий спектр полюсов в (11)в ряд по степеням v':

$$\det|1-G^0v'|=\det|1-G^0v'|\left[1-G^0\beta-\beta\left(\frac{G^0v'G^0}{1-G^0v'}\right)\right] \tag{13}$$

Пусть $\det|1-\mathrm{Re}G^0v'|\neq0$ ни при каких значениях E.

Тогда:

$$\nu(\varepsilon)=\nu_0(\varepsilon)+\frac{1}{\pi n}\mathrm{Im}\frac{d}{d\varepsilon}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k}Sp\left|G^0(\varepsilon)v'\right|^k+$$

$$+\frac{1}{\pi n}\mathrm{Im}\frac{d}{d\varepsilon}\ln\left[1-\beta G^0(\varepsilon)-\beta\left(\frac{G^0v'G^0}{1-G^0v'}\right)_\infty\right]. \tag{14}$$

Мы видим, что несингулярный вклад порождается дальнодействующей частью v', а особенности сингулрного вклада определяются уравнением:

$$1-\beta\mathrm{Re}G^0(\varepsilon)-\beta\mathrm{Re}\left(\frac{1}{1-G^0v'}G^0v'G^0\right)_\infty=0. \tag{15}$$

Таким образом, если уравнение (11) имеет решение Z_0, то возмущение v' приводит к сдвигу этого уровня или дополнительному уширению.

Функция распределения этих перегибов получается решением одномерного уравнения Фокера—Планка, аналогично работе ([7]):

$$f=-\frac{da^2}{T}f_0\frac{\varepsilon a}{da^2+laF}, \tag{16}$$

где d—коэффициент диффузии ($d\sim\hbar la^2/\beta n$), а $F=\nu_e\sigma_{em}b_m$, (ν—единичный вектор нормали к плоскости скольжения, σ_{em}—тензор напряжений, b_m—вектор Брюгерса), величина f_0—определяется числом перегибов $[f_0 \sim (e^{\varepsilon/kT}-1)^{-1}]$, а $\varepsilon_d \sim \dfrac{\pi\Delta}{a}$.

Следовательно, поток равен:

$$j=\frac{1}{f_0}\sum_a ia\varepsilon_a f_a' = -\frac{\pi^2 d\Delta^2}{T}\sum_a \frac{i}{da^2-iaF}, \tag{17}$$

Следует отметить, что при перемещении перегибов возникает сила торможения, зависящая от скорости движения дислокаций. Величина и зависимость от скорости дислокаций этих сил определяют в основном характер почти стационарного движения.

Объединяя члены с a_n и $-a_n$ из (17) получаем:

$$j=\frac{\pi^2\Delta^2 d}{T}\sum_n \frac{a_n F}{(da_n^2)^2+(a_n F)^2}.$$

В модели Пейералса (6), максимальная сила определяет те сдвиговые напряжения $\sigma_0=F_m/a$, которые нужно приложить к кристаллу, чтобы дислокация начала перемещаться в своей плоскости скольжения. Тогда

$$j=\frac{\pi^3\Delta^2 d}{12Tb}\,\frac{\sigma_0}{\sigma_0^2+d^2}, \tag{18}$$

где

$$a_n=nb, \qquad (n=0, \pm 1, \cdots)$$

Пользуясь случаем, выражаю глубокую благодарность И. М. Лифшицу и А. Ф. Андрееву за полезные советы.

Ереванский государственный университет

Գ. Ա. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

Շրջման կետերի կապված վիճակները քվանտային բյուրեղում

Դիտարկված է միաչափ քվանտային բյուրեղում դիսլոկացիաների վրա շրջման կետերին համապատասխանող քվազիմասնիկների վարքը։ Ցույց է տրվում, որ բյուրեղի համաչափության առանցքի ուղղությամբ առաջանում են լոկալիզացված էներգետիկ մակարդակներ, որոնք համապատասխանում են կապված վիճակների առաջացմանը։ Լրացուցիչ փոքր գրգռումը բերում է այդ մակարդակի կամ շեղմանը կամ լայնացմանը։ Այդպիսի քվազիմասնիկների զույգը կարող է շարժվել միայն որոշակի ուղղությամբ, որը բնութագրվում է դիֆուզիայի գործակցով։

ЛИТЕРАТУРА—ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

[1] *А. Ф. Андреев, И. М. Лифшиц.* ЖЭТФ, 56, 2057 (1969) [2] *R. A. Guyer, L. I. Zane.* Phys. lett. 24, 660 1970). [3] *А. Ф. Андреев*, УФН, 118, 251 (1966). [4] *И. М. Лифшиц.* Nouvo Cimm. suppl, 3 716 (1956). [5] *И. М. Лифшиц, Г. А. Варданян.* ДАН Арм. ССР т. LXI, № 3 (1976). [6] *А. М. Косевич.* Основы механики кристаллической решетки, М. 1972. [7] *А. Ф. Андреев* ЖЭТФ, 67, 1559 (1974).