

## О ВОЗМОЖНОСТИ ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ НА ДИСЛОКАЦИЯХ, ДИСКЛИНАЦИЯХ И ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН В МЕТАЛЛАХ

А.О.Анохин, М.Л.Гальперин, Ю.Н.Горностырев, М.И.Кацнельсон,  
А.В.Трефилов<sup>+</sup>

Институт физики металлов УрО РАН  
620219 Екатеринбург, Россия

<sup>+</sup> Российский научный центр "Курчатовский институт"  
123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 января 1994 г.

Численно исследована электронная структура различных типов дефектов на гексагональной и квадратной решетках. Показано, что она определяется главным образом ядром дефекта, а не дальнедействующей частью деформационного потенциала. Условия локализации электронов зависят от типа решетки, характера спадания интегралов переноса и "локальной" симметрии дефекта. Исследование дисклинаций показывает, что ось пятого порядка благоприятствует локализации, в отличие от оси седьмого порядка.

Многочисленные данные о влиянии пластической деформации на электропроводность металлов [1-3] и о влиянии сверхпроводящих переходов на механические свойства [4] указывают на важность эффектов взаимодействия электронов и дислокаций. В то же время, микроскопические механизмы этого взаимодействия (например, вопрос об относительной важности деформационного потенциала и "оборванных связей" в ядре) до сих пор неясны. При этом трактовки одних и тех же экспериментальных данных различными авторами подчас противоречивы (сравним обсуждение рассеяния электронов на дислокациях в Al в [2] и [3]). Одна из причин этого состоит в том, что задача о рассеянии электрона, например, на краевой дислокации весьма нетривиальна даже в континуальной модели (переменные в уравнении Шредингера не разделяются), в силу чего существующие подходы, начиная с пионерской работы [5], ограничиваются нестрогими оценками энергий высоковозбужденных состояний. Настоящая работа посвящена анализу особенностей структуры реальных кристаллов, связанных с основными типами дефектов: краевые дислокации, дисклинации и межзеренные границы. Насколько нам известно, электронная структура двух последних типов дефектов ранее не рассматривалась.

Краевая дислокация задавалась путем введения экстраплоскости, которая в двумерной решетке представляет собой лишний ряд атомов, обрывающийся в начале координат. Рассматривались случаи, когда сечение, перпендикулярное оси дислокации, представляет собой гексагональную или квадратную решетку, узлы которой нумеруются векторами  $\vec{\rho} = (x, y)$ . Электронная структура рассчитывалась в приближении сильной связи для двумерной модели, то есть решалось уравнение Шредингера

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sum_{\vec{\rho}'} T(\vec{\rho} - \vec{\rho}') \psi(\vec{\rho}') \quad (1)$$

с различными зависимостями интегралов переноса  $T(R)$  (как для функций  $s$ -типа, когда  $T = T(|R|)$ , так и с учетом угловых зависимостей для  $t_{2g}$  и  $e_g$  функций [6]). Координаты атомов в искаженной решетке рассчитывались в рамках модели Пайерлса – Набарро [7], позволяющей избежать расходимостей континуальной теории упругости. Радиус ядра дислокации  $r_0$  изменялся от  $0,5a$  до  $2a$ , что качественно не влияло на результаты; на рисунках ниже везде  $r_0 = a$  ( $a$  – постоянная решетки). Если принять приближение ближайших соседей для  $T(R, R')$  в направлении вдоль оси дислокации  $Oz$

$$T_{RR'} = \begin{cases} T(\vec{\rho} - \vec{\rho}'), & z = z' \\ T_0, & \vec{\rho} = \vec{\rho}', \quad z = z' \pm 1 \\ 0 & \text{в других случаях} \end{cases} \quad (2)$$

то двумерная модель строго обоснована в том смысле, что появление локализованного уровня с энергией  $E_0$  соответствует дислокационной зоне  $E(k_x) = E_0 + 2T_0 \cos k_x$  в трехмерном случае.

Задача Коши для уравнения (1) решалась простейшим симплектическим методом (leap-frog) [8], строго обеспечивающим унитарность оператора эволюции и позволяющим для системы линейных дифференциальных уравнений в пределе бесконечного времени интегрирования получить точное значение спектральной функции подходящей заменой энергии. Локальная плотность состояний на узле  $\vec{\rho}_0$  определялась преобразованием Фурье по времени  $t$  от  $\psi(\vec{\rho}_0, t)$  при выборе начального условия  $\psi(\vec{\rho}, 0) = \delta_{\vec{\rho}\vec{\rho}_0}$ . Для исследования локализации в реальном пространстве при задании энергии  $E$  вычислялся квадрат фурье-образа (по времени)  $\psi(\vec{\rho}, t)$  с начальным условием  $\psi(\vec{\rho}, 0) = \text{const}$  (локализация первоначально "размазанного" электрона). Тестирование метода для идеальных двумерных решеток показало его высокую точность, включая воспроизведение деталей особенностей ван Хова. В расчетах использовались кластеры, состоящие из  $N \leq 1000$  атомов, что, как выяснилось, обеспечивает независимость результатов от  $N$ . Для одиночной дислокации использовались "свободные" граничные условия, для дислокационных диполей – также и периодические.

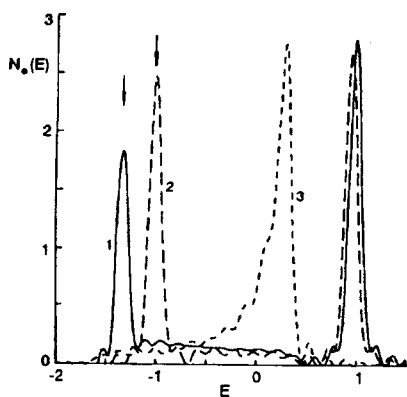


Рис.1. Локальные плотности состояний  $N_0(E)$  для гексагональной решетки с  $|T(R)| = 1/6R^5$  и угловыми зависимостями, соответствующими  $s-s$ -связи (1),  $t_{2g}$   $\pi$ -связи (2). Стрелками показаны энергии локализованных состояний; 3 -  $|T(R)| = e^{-\alpha R}$ ,  $\alpha = \ln(6)$ ,  $s-s$ -связь. Здесь локализация практически не проявляется. ( $R$  – в единицах постоянной решетки  $a$ )

Результаты расчетов выявили сильную чувствительность параметров локализованных состояний к типу решетки и к характеру зависимости  $T(R)$  от модуля и – более слабую – от углов вектора  $R$ . На рис.1 приведены результаты расчетов локальной плотности состояний на оси дислокации  $N_0(E)$

для гексагональной решетки (положение локализованных уровней определено с использованием указанного выше критерия локализации). Замена зависимости  $T(R) \sim 1/R^5$ , характерной для функций Ванье для  $d$ -состояний, на  $\exp(-\alpha R)$  с  $\alpha \sim a^{-1}$  приводит к ослаблению локализации (уменьшение веса соответствующего пика в  $N_0(E)$  и большей "размазанности"  $|\psi(\vec{\rho}, E_0)|^2$ ). Переход к квадратной решетке при той же зависимости  $T(R)$ , еще более резко ослабляет локализацию, хотя сам факт наличия локальных уровней наблюдался во всех исследованных нами случаях. Одним из наиболее важных результатов следует, по-видимому, считать утверждение об определяющей роли дислокационного ядра, а не "хвостов" деформационного потенциала для электронной структуры. Это доказывается практическим совпадением вида  $N_0(E)$  для случаев одиночной дислокации и дислокационного диполя с плечом  $2 \div 3a$ .

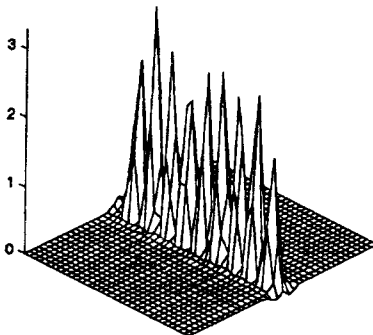
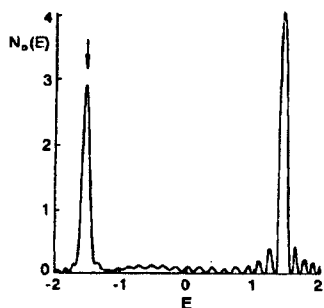


Рис.2. Плотность состояний  $N_0(E)$  для узла на границе наклона (а) и распределение электронной плотности при энергии локализованного состояния (б).  $T(R) = 1/6R^5$  ( $R$  - в единицах постоянной решетки а)

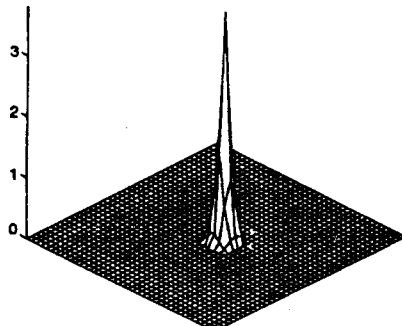
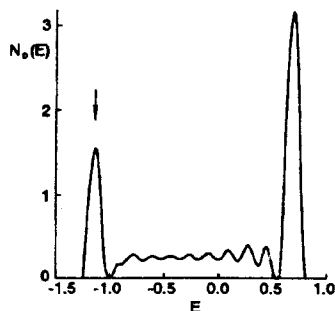


Рис.3. Локальная плотность состояний  $N_0(E)$  (а) и распределение электронной плотности при энергии локализованного состояния (б) для пентагональной дисклинации.  $T(R) = 1/6R^5$  ( $R$  - в единицах постоянной решетки а)

Другими важными элементами структуры реального кристалла являются границы зерен. Мы исследовали электронную структуру границы наклона  $\Sigma = 7$  на гексагональной решетке с углом разворота  $38,2^\circ$  и нормалью к плоскости границы  $\langle 14\bar{5}0 \rangle$ . Координаты атомов задавались в схеме решетки совпадающих узлов [9]. Результаты расчетов, показанные на рис.2, свидетельствуют об удивительном сходстве электронной структуры этой границы и электронной структуры стенки краевых дислокаций, хотя рассматриваемая граница, вообще говоря, не может считаться малоугловой. Наряду с результатами расчетов для дислокационных диполей, это свидетельствует о том, что локализация электронов даже в очень "тесном" дислокационном скоплении

происходит по существу на каждой дислокации отдельно (в данном случае речь идет о собственных зернограницных дислокациях [9]).

Еще одним типом несовершенства кристаллов, нарушающим ротационную симметрию, являются дисклинации. Помимо "традиционных" областей (например, описание дислокационных стенок или дисклинационного диполя [10]), в последнее время эти дефекты привлекают внимание как структурные элементы пентагональных частиц [11]. Они также естественно возникают при описании структуры фаз Франка - Каспера, квазикристаллов и стекол [12]. Была исследована электронная структура клиновой  $+60^\circ$  (пентагональной) и  $-60^\circ$  (гептагональной) дисклинаций на гексагональной решетке (смещения атомов задавались по теории упругости [10]). В последнем случае не удалось обнаружить локализованных состояний ни при какой исследованной зависимости  $T(R)$ . Электронная структура пентагональной дисклинации показана на рис.3 и качественно подобна электронной структуре краевой дислокации. Отметим, что координация атомов в ядре этих двух дефектов совпадает, деформационный же потенциал на больших расстояниях существенно различен. В то же время, у  $+60^\circ$  и  $-60^\circ$  дисклинаций он отличается лишь знаком. Таким образом, и в случае дисклинаций остается в силе вывод об определяющей роли ядра для электронной структуры. Кроме того, создается впечатление, что наличие "локальной" оси симметрии пятого порядка, в отличие от седьмого, благоприятствует появлению локализованных состояний. Последнее обстоятельство может представлять интерес для анализа электронной структуры квазикристаллов и стекол (см. [12]).

- 
1. V.F.Gantmakher and G.I.Kulesko, *Phys. Cond. Matter.* **19**, 151 (1975).
  2. R.A.Brown, *J.Phys.* **F7**, 1283; 1477 (1977); **F8**, 825; 1465 (1978); *Canad. J. Phys.* **60**, 766 (1982).
  3. H.Bross and O.Häberlen, *J. Phys. Cond. Matter.* **5**, 7687 (1993).
  4. М.И.Каганов, В.Я.Кравченко, В.Д.Назик, *УФН* **111**, 655 (1973).
  5. И.М.Лифшиц, Х.И.Пушкаргов, *Письма в ЖЭТФ* **11**, 456 (1970).
  6. J.S.Slater and G.F.Koster, *Phys. Rev.* **94**, 1498 (1954).
  7. Дж.Хирт, И.Лоте, *Теория дислокаций*. М.: Атомиздат, 1972.
  8. Н.Yoshida, *Phys. Lett.* **A150**, 262 (1990).
  9. А.Н.Орлов, В.П.Перевезенцев, В.В.Рыбин, *Границы зерен в металлах*. М.: Металлургия, 1980.
  10. Р.де Витт, *Континуальная теория дисклинаций*. М.: Мир, 1977 ((R.de Wit, *Theory of disclination: IV.Strait disclinations*, *J. of Research of the Nat. Bur. of Standards* **77A**, No5, 607 (1973)).
  11. L.D.Marks, *Phil. Mag.* **A49**, 81 (1984).
  12. M.Kleman, *Adv. Phys.* **38**, 605 (1989).