Письма в ЖЭТФ, том 41, вып. 11, стр. 471 – 473 10 июня 1985 г.

ДИСЛОКАЦИИ И ЛОКАЛИЗАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В МНОГОДОЛИННЫХ ПРОВОДНИКАХ

С.В.Иорданский, А.Е.Кошелев

Показано, что в многодолинных проводниках, с долинами, не лежащими на гранях зоны Бриллюэна, наличие дислокаций приводит к сбою фазы и тем самым препятствует локализации электронов. Получена оценка соответствующего вклада в проводимость в предельных случаях большой и малой плотности дислокаций.

Интерференция между двумя возвращающимися в одну и ту же точку траекториями с противоположным направлением движения электрона дает квантовую поправку к проводимости, сингулярным образом зависящую от температуры, частоты и магнитного поля [1 – 3]. Набор электроном одной и той же фазы на этих траекториях является следствием симметрии относительно обращения времени.

В многодолинных полупроводниках при больших временах междолинной релаксации $\tau_V \gg \tau_i$ (τ_i – время релаксации импульса в пределах одной долины), приближенно выполняется закон сохранения частиц в каждой долине. В этом случае, однако, одинаковый набор фазы при движении в противоположных направлениях в пределах одной долины имеется только в случае рассеяния на статическом потенциале, когда точка отсчета импульса несущественна и ее можно сдвинуть в дно долины и восстановить тем самым старую ситуацию с инвариантностью относительно обращения времени.

При произвольных рассеивателях это уже не так и даже чисто упругие процессы могут приводить к сбою фазы в пределах одной долины. В настоящей работе мы покажем, что наличие в кристалле дислокаций приводит к такому эффекту и оценим его величину. Гамильтониан электрона в деформированном кристалле (см., например, [4]) учитывает 1) подъем дна долины, 2) поправки к эффективной массе, 3) изменение положения дна долины в **k**-пространстве. Первый эффект соответствует рассеянию на статическом потенциале, второй эффект мал в силу предполагаемой близости импульсов ко дну долины: наиболее существенен третий эффект, где зависимость положения дна долины от деформации, очевидным образом, работает как некоторый векторный потенциал. В дальнейшем мы будем предполагать кубическую симметрию и кроме того считать, что вектора $\mathbf{k}^\circ$, определяющие положение дна долины имеют ось симметрии выше второго порядка. В этом случае сдвиг дна долины из-за деформации имеет вид

$$k_n - k_n^0 = - w_{jn} k_j^0 + \gamma_1 (w_{nj} + w_{jn}) k_j^0 + \gamma_2 w_{jj} k_n^0 + \gamma_3 w_{jm} \frac{k_j^0 k_m^0}{(k^0)^2} k_n^0 , \qquad (1)$$

где $w_{jm} = (\partial u_j / \partial x_m)$ –тензор дисторсии, феноменологические коэффициенты $\gamma_l \sim 1$. Первое слагаемое описывает сдвиг вектора $\mathbf{k}^0$ по чисто геометрическим причинам, остальные три дают сдвиг, связанный с изменением взаимодействия при деформации [4]. Имея в виду качественные результаты, мы ограничимся случаем $\gamma_l = 0$, что соответствует точному рассмотрению винтовых дислокаций параллельных $\mathbf{k}^0$ (в этом случае единичный коэффициент в первом члене нужно заменить на $1 + \gamma_1$). Тогда в приближении эффективной массы гамильтониан, описывающий взаимодействие электронов с дислокацией имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_\perp} \sum_{\mathbf{k}^0} (\hat{\mathbf{p}}_\perp - \mathbf{A}_\perp(\mathbf{k}^0))^2 + \frac{1}{2m_\parallel} \sum_{\mathbf{k}^0} (\hat{p}_\parallel - A_\parallel(\mathbf{k}^0))^2 + U(\mathbf{r}), \qquad (2)$$

$$A_j(\mathbf{k}^0) = - \mathbf{k}_n^0 w_{nj} \mathbf{k}_0 ,$$

где значки $\perp$ и $\parallel$ означают составляющие соответственно перпендикулярные и параллельные $\mathbf{k}^0$, $U(\mathbf{r})$ – потенциал создаваемый примесями и дислокациями, $\hat{p}_j$ – оператор квазимпульса электрона. Гамильтониан (2) совпадает с гамильтонианом, так называемого "топологического" взаимодействия с дислокациями [5, 6].

Набор фазы электроном при обходе замкнутого контура вокруг дислокации в пределах одной долины, согласно (2) зависит от направления движения и определяется циркуляцией

$$\frac{\varphi_0(k^0)}{2} = \frac{1}{\hbar} \oint A_j(\mathbf{k}^0)dx_j = \frac{1}{\hbar}(k_j^0 b_j)(-1),$$

где b_j — вектор Бюргерса рассматриваемой дислокации. Следовательно, дислокация эквивалентна узкому соленоиду с размерами порядка неупругого ядра дислокации, в котором сосредоточено эффективное "магнитное" поле (для винтовых дислокаций это отмечено в [7]), при этом "магнитный" поток в этом соленоиде порядка одного кванта, если $\mathbf{k}^0/\hbar$ порядка размера зоны Бриллюэна.

Отличие от нуля γ_i в (1) приводит к аналогичному гамильтониану, единственное отличие состоит в том, что эффективное "магнитное" поле будет иметься всюду, а не только в ядре диклокации, что мало существенно для дальнейшего. Квантовые поправки к проводимости распадаются на вклад диаграмм с электронными линиями из одной долины, и вклад диаграмм с электронными линиями из двух долин, из которых наиболее важны долины с противоположным направлением квазиимпульса [3] (без учета электрон-электронного взаимодействия). Относительный вклад этих диаграмм зависит от соотношения между временем междолинного рассеяния и временем сбоя фазы τ_φ из-за неупругих процессов.

Дислокации мало влияют на второй вклад (из-за его инвариантности относительно обращения времени). Вклад в проводимость однодолинных диаграмм существенно зависящий от дислокаций, дается формулой [3]:

$$\delta\sigma_{ij}^{\text{кв}} = -\frac{2e^2}{\pi\hbar} \sum_{\mathbf{k}^0} D_{ij}(\mathbf{k}_0)\tau_i C_{\mathbf{k}^0}(r, r), \tag{3}$$

где куперон $C_{\mathbf{k}^0}(r, r')$ подчиняется уравнению

$$\left[\frac{1}{\tau_1} + D_\perp(\hat{\mathbf{p}}_\perp - 2A_\perp(k^0))^2 + D_\parallel(\hat{p}_\parallel - 2A_\parallel(k^0))^2\right] C_{\mathbf{k}^0}(r, r') = \frac{1}{\tau_i}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{4}$$

Здесь $D_{ij}(k^0)$ — тензор диффузии, $\dfrac{1}{\tau_1} = \dfrac{1}{\tau_v} + \dfrac{1}{\tau_\varphi}$. Тензор дисторсии входящий в $A_j(\mathbf{k}^0)$ определяется суммой деформаций от различных дислокаций, которые мы будем считать прямолинейными и параллельными и распределенными равномерно с плотностью N_D.

Рассмотрим сначала случай малой плотности дислокаций, когда $D_c N_D \sin\varphi_0(\mathbf{k}^0) \ll 1/\tau_1$, $(D_c^2 = D_\perp(D_\perp \cos^2\alpha(\mathbf{k}_0) + D_\parallel \sin^2\alpha(\mathbf{k}_0)))$, α — угол между направлением дислокаций и вектором $\mathbf{k}_0$. Мы считаем, что $\mathbf{k}^0/\hbar$ не лежит на гранях зоны Бриллюэна, так что $\sin\varphi_0 \neq \neq 0$. Нахождение поправки к куперону из-за наличия дислокаций в линейном по N_D приближении сводится к вычислению функции Грина в эффекте Бома – Ааронова и дает поправку к проводимости вида:

$$\Delta\sigma_{ij} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} N_D \frac{\sqrt{\tau_1}}{D_a^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}^0} D_c(\mathbf{k}^0) D_{ij}(\mathbf{k}_0) \frac{|\varphi_0(\mathbf{k}^0)|}{2\pi}\left(1 - \frac{|\varphi_0(\mathbf{k}^0)|}{2\pi}\right), \tag{5}$$

$$D_a = \sqrt[3]{D_\perp^2 D_\parallel}.$$

В случае большой плотности дислокаций, когда фаза сбивается в основном за счет дислокаций $D_c N_D \sin\varphi_0 \gg 1/\tau_1$, для оценки (аналогично случаю сильного магнитного поля [3]), достаточно заменить τ_1 на $(D_c N_D)^{-1}$ (считая $\sin\varphi_0 \sim 1$) в выражении для однодолинного куперона $C^0_{\mathbf{k}^0}$ [3] и мы получим:

$$\delta\sigma_{ij}^{\text{кв}} = \frac{e^2\sqrt{N_D}}{2\pi^2\hbar D_a^{3/2}} \sum_{\mathbf{k}^0} \overline{\sqrt{D_c(\mathbf{k}^0)}D_{ij}(\mathbf{k}^0)}\,. \tag{6}$$

Рассеяние на дислокациях меняет также длину свободного пробега, что дает поправку к проводимости, $\Delta\sigma_1 \approx -\frac{e^2}{\hbar} n^{2/3} l^2 N_D \lambda$ (n – плотность электронов, l – длина свободного пробега, λ – поперечник дислокации).

Из выражений (5), (6) видно, что квантовые поправки могут изменить знак суммарного вклада дислокаций в проводимость. Беря характерные значения $n = 10^{18}$ см$^{-3}$, $l = 10^{-5}$ см, $N_D = 10^8$ см$^{-2}$, $\lambda = 10^{-7}$ см и считая $D_c N_D > 1/\tau_1$, получим отношение $\Delta\sigma_1 / \delta\sigma^{\text{кв}} = -0{,}1$. Таким образом, квантовые поправки из-за наличия дислокаций могут быть больше прямого вклада в длину свободного пробега. Отметим, что наличие дислокаций препятствует локализационным эффектам подобно магнитному полю.

Такой же эффект возможен и на поверхности кристалла, где выходящие на эту поверхность из объема дислокации могут препятствовать локализации соответствующих двумерных электронов в аналогичных предположениях о многодолинном спектре.

Авторы выражают благодарность Д.Е.Хмельницкому за ценные обсуждения.

Литература

1. *Горьков Л.П., Ларкин А.И., Хмельницкий Д.Е.* ЖЭТФ, 1979, **30**, 248.
2. *Альтшулер Б.Л., Аронов В.Г., Ларкин А.И., Хмельницкий Д.Е.* ЖЭТФ, 1981, **81**, 768.
3. Quantum Theory of Solids, 130, ed. by Lifsnits. M., 1982.
4. *Бир Г.Л., Пикус Г.Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972.
5. *Дубровский И.М.* Укр. физ. журн., 1974, **19**, 1107.
6. *Teichler H.* Phys. Lett., 1981, **87 A**, 113.
7. *Kawamura K.* Z. Physik, 1978, **B 29**, 101.

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
24 апреля 1985 г.