

механизм был впервые предложен Франком и Ридом [30] и в дальнейшем обнаружен экспериментально.

Для прямого изучения поведения дислокаций особенно успешно применяются два метода. Один из них состоит в том, что примеси, диффундируя в кристалл, селективно конденсируются на дислокационной линии, подобно тому как большие примесные атомы, о которых уже говорилось выше, преимущественно оседают на дислокации. Декорированная таким образом дислокационная линия может затем непосредственно наблюдаться. Это способ наблюдения источников Франка — Рида. Конечно, декорирование закрепляет дислокацию по всей длине и препятствует ее дальнейшему движению. Можно также выявлять выход дислокации на поверхность кристалла. Для этого необходимо использовать какой-нибудь травитель, который бы селективно воздействовал на ядро дислокации, создавая ямки в местах ее выхода на поверхность. Такой метод не приводит к закреплению дислокационной линии, и она может двигаться при последующем приложении напряжений. Последовательные положения дислокации опять легко обнаружить путем травления.

В настоящее время удается получать кристаллы кремния, большие участки которых совсем не содержат дислокаций. Однако такая ситуация совершенно необычна; почти во всех кристаллах присутствует значительное количество дислокаций — как правило, порядка  $10^{15}$  дислокационных линий на  $1 \text{ см}^2$ . Ясно, что они играют решающую роль, которая и определяет пластические свойства твердых тел. Благодаря этим же дислокациям могут существенно понижаться и модули упругости. Дислокационные линии представляют собой также «туннели», облегчающие диффузию в твердое тело и сток внедренных атомов и вакансий. (Заметим, что вакансия может поглотиться краевой дислокацией, в результате чего на последней образуется небольшой *перегиб*.) Дислокации оказывают также важное влияние на электрические свойства сильно холоднокатанных материалов. В данном случае высокая плотность возникших дислокаций оказывает существенное влияние на рассеяние электронов, приводя к соответствующему повышению электросопротивления.

Изучение дислокаций и дислокационных эффектов представляет само по себе широкое поле деятельности, которого мы здесь только слегка коснулись.

### ЗАДАЧИ

1. Рассмотрим простой кубический кристалл с силовыми постоянными трех типов. Каждый атом связан с каждым из своих шести ближайших соседей пружинками с коэффициентом жесткости  $\kappa_1$ , т. е.

$$\delta E = \frac{1}{2} \kappa_1 (\delta r)^2,$$

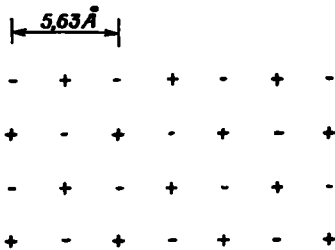
где  $\delta r$  — отклонение от равновесного расстояния между атомами. Каждая пара атомов во второй координационной сфере связана пружинками с постоянной  $\kappa_2$ . Наконец, изменение угла  $\delta\theta$  между направлениями соседних связей ближайших атомов дает

$$\delta E = \frac{1}{2} \kappa_3 a^2 (\delta\theta)^2.$$

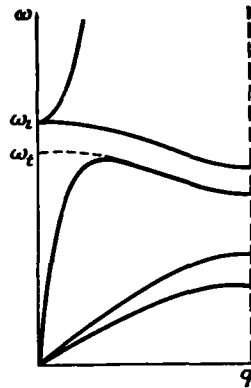
а. Найдите результирующую силовую постоянную для длинноволновых колебаний, распространяющихся в направлении [100]. Определите также максимальную частоту колебаний в этом направлении.

б. Найдите, с какой частотой колебался бы данный атом в направлении [100], если бы все остальные атомы были фиксированы. Этой частоте можно придать смысл эйнштейновской частоты.

2. Рассмотрим следующую модель NaCl: точечные заряды  $\pm e$  связаны как электростатическими силами, так и пружинками. (При этом не учитывается электронная поляризуемость индивидуальных ионов, которая в реальном кристалле NaCl существенна.) Пусть статическая диэлектрическая постоянная  $\epsilon_s = 4,4$  (эта величина примерно равна истинному значению за вычетом электронной поляризуемости). Расстояние между ионами натрия в направлении [100] равно  $5,63 \text{ \AA}$ . Требуется оценить частоты продольных и поперечных оптических колебаний  $\omega_l$  и  $\omega_t$  (см. фигуру).



Структура NaCl



Оцениваются частоты  $\omega_l$  и  $\omega_t$

а. В качестве первого шага найдите упругую постоянную для однородного распределения  $\text{Na}^+$  по отношению к  $\text{Cl}^-$ , выразив через нее статическую диэлектрическую проницаемость. Последнюю можно, например, записать как отношение напряжений на двух конденсаторах: между пластинами первого из них — вакуум, между пластинами второго — NaCl, причем плотность заряда на пластинах одна и та же.

б. Частоту поперечных колебаний можно рассчитать, предположив, что всякие источники заряда или поверхностные заряды отсутствуют. Продольную частоту можно определить как частоту моды с бесконечной длиной волны и со смещениями, перпендикулярными поверхности, т. е. в этом случае поверхностный заряд имеется.

3. Представьте себе медный пруток в гравитационном поле. Тогда на каждый электрон действует, конечно, гравитационная сила, равная  $mg$ . Одновременно возникает и электронное «экранирующее поле».

а. Предположим, что структура меди не искажается гравитационным полем. Какой тогда будет электрическая экранирующая сила? (Ответ легче найти, если заменить силу  $mg$  эквивалентным внешним электрическим полем.)

б. Найдите дополнительную силу, возникающую, если структура искажается и имеется дилатация, зависящая от высоты. Для простоты предположите, что все смещения ионов вертикальны. (Ответ можно записать в простой форме, если вспомнить, что соответствующая упругая постоянная  $c_{11}$  и плотность меди  $\rho$  связаны со скоростью продольного звука соотношением  $v_s^2 = c_{11}/\rho$ .)

4. Рассмотрим газ из  $N$  свободных электронов (все электроны с одинаковыми спинами) в объеме  $\Omega$ . Пусть взаимодействие каждой пары электронов описывается контактным потенциалом

$$V(r_i - r_j) = \beta \delta(r_i - r_j) \quad (i \neq j),$$

где  $\beta$  — некоторая константа. Основное состояние системы описывается плоскими волнами:

$$\Psi = c_N^\dagger c_{N-1}^\dagger \dots c_1^\dagger |0\rangle.$$

Определяя среднее значение оператора электрон-электронного взаимодействия, найдите энергию прямого и обменного взаимодействия электронов. (Расчеты могут упроститься, если считать  $N$  и  $\Omega$  конечными.)

5. Рассмотрим газ свободных бесспиновых электронов. Гамильтониан такой системы

$$H_0 = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k$$

и волновая функция основного состояния

$$\Psi_0 = \prod_{k < k_F} c_k^\dagger |0\rangle.$$

Введем возмущение

$$H_1 = \sum_k V_q c_{k+q}^\dagger c_k$$

с единственным  $q \neq 0$  и запишем энергию основного состояния во втором порядке по  $H_1$ :

$$E = E_0 + \langle \Psi_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle + \sum_n \frac{|\langle \Psi_n | H_1 | \Psi_0 \rangle|^2}{E_0 - E_n}.$$

Энергия нулевого порядка

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle \Psi_0 | H_0 | \Psi_0 \rangle = \langle 0 | c_1 c_2 \dots c_N \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k c_N^\dagger c_{N-1}^\dagger \dots c_1^\dagger | 0 \rangle = \\ &= \sum_{k < k_F} \epsilon_k \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = \sum_{k < k_F} \epsilon_k. \end{aligned}$$

Выразите аналогичным образом через  $V_q$  и  $\epsilon_k$  энергии в первом и во втором порядке. Энергия во втором порядке содержит сумму по  $k$  по некоторой области  $R$ . Какой должна быть эта область для двумерного газа?

6. Пусть колебания некоторого кристалла описываются моделью Эйнштейна:

$$H_\varphi = \hbar \omega_E \sum_q a_q^\dagger a_q,$$

где  $q$  принимает  $N$  значений. Пусть также гамильтониан электронов имеет вид

$$H_e = \sum_k \varepsilon_k c_k^+ c_k, \quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Наконец, пусть электрон-фононное взаимодействие описывается гамильтонианом

$$H_{e\Phi} = \frac{V}{N^{1/2}} \sum_{k,q} c_k^+ c_k (a_q + a_q^+).$$

Бесфононное состояние нулевого приближения имеет волновую функцию  $c_{k_0}^+ |0\rangle$  и энергию  $\varepsilon_{k_0}$ .

а. Рассчитайте энергию до второго порядка по  $V$ .

б. Каково среднее значение полного числа фононов  $n$  в соответствующем состоянии первого порядка? Это число представляет собой безразмерную константу связи. Если  $\langle n \rangle \ll 1$ , мы имеем случай слабой связи и теория возмущений применима; при  $\langle n \rangle \gg 1$  связь сильная.

7. Определите поляроноподобный сдвиг энергии электронов в полупроводнике для зоны проводимости с  $m^* = m$ . Учитывайте только продольные волны и считайте закон дисперсии фононов дебаевским. Начните с выражения

$$\delta E = \sum_{k,q} D^2 q^2 \frac{\hbar}{2MN\omega_q} \frac{\langle 0 | c_k^+ c_{k+q} c_{k+q}^+ c_k | 0 \rangle}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q} - \hbar\omega_q}.$$

В качестве волновой функции нулевого порядка возьмите

$$|0\rangle = C_k^+ | \text{Вакуум} \rangle$$

с  $k = 0$ . Ограничьтесь только самым нижшим порядком по  $mv_e/\hbar q$  или  $mv_e^2/\hbar\omega_D$ . Получите окончательный результат для  $D = 5$  эВ,  $M = 6 \cdot 10^4$  масс электрона и  $\hbar\omega_D = 0,025$  эВ.

8. Потенциал взаимодействия при рассеянии электрона атомом примеси, закрепленным в точке  $\mathbf{r}_0$ , есть  $w(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)$ . В свободном состоянии атом примеси при рассеянии испытывает отдачу, в реальном же кристалле он связан со своими соседями. Используя аппроксимацию п. 4 § 4, оцените вероятность того, что при рассеянии отдача не произойдет (при нулевой температуре). Получите грубую оценку для случая рассеяния на атоме цинка в меди.

9. Рассмотрим одномерный кристалл, полная энергия которого (при постоянной длине) равна

$$E = \sum_q F(q) S(q) S(q),$$

где  $F(q) = A/q^3$  ридберг/ион,  $A$  — константа.

Пусть кристалл имеет параметр решетки  $a$ , но содержит два атома на ячейку; второй атом отстоит от первого на расстояние  $\delta$ :  $x_i = 0, \delta, a, a + \delta, 2a, 2a + \delta$ . Найдите полную энергию как функцию  $\delta$ . Какова наиболее стабильная (в смысле величины  $\delta$ ) структура кристалла? Воспользуйтесь тем, что

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}.$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos nx}{n^2} = \frac{(x-\pi)^2}{4} - \frac{\pi^2}{12}, \quad 0 \leq x \leq 2\pi.$$

10. Наметьте путь расчета энергии активации для диффузии вакансии в металле с одним ионом на примитивную ячейку.

Предположите, что диффузия происходит путем движения ближайшего к вакансии иона (отстоящего от нее на  $r_0$ ) в вакантный узел, и никаких других искажений решетки не возникает.

Получите выражение для  $S^*S$  в кристалле как функцию координаты этого иона и запишите разность между  $S^*S$  со смещением и без смещения вакансии.

Энергию зонной структуры

$$\sum_q \delta [S^*(q) S(q)] F(q)$$

можно выразить как интеграл плюс сумма [электростатическая энергия имеет аналогичный вид с соответствующей функцией  $F(q)$ , но мы ее не будем рассматривать]. Напишите полное изменение энергии зонной структуры, упростив интеграл путем интегрирования по углам. На этом задача кончается.

Обратите внимание на то, что энергия симметрична по смещению относительно середины расстояния между узлами. В этой точке можно ожидать максимума энергии; здесь  $q \cdot r$  — целое кратное  $\pi$ , и сумма по узлам обратной решетки упрощается.

11. Рассмотрим простую кубическую решетку металла с одним электроном на ион и параметром решетки  $a$ . Предположим, что энергию можно разбить на две части: энергию, зависящую только от объема, и эффективное взаимодействие между ионами. Первое слагаемое есть просто кинетическая энергия (на один ион)

$$E_{fe} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

(она, конечно, зависит от объема через  $k_F$ ), а второе есть

$$\frac{1}{2N} \sum_{i,j}' V(|r_i - r_j|),$$

где

$$V(r) = \begin{cases} V_0 \left( \frac{a_0^2}{r^2} - \frac{a_0}{r} \right), & \text{при } r, \text{ равном расстоянии между} \\ & \text{ближайшими соседями,} \\ 0 & \text{при больших } r. \end{cases}$$

Здесь  $a_0$  и  $V_0$  — константы, не зависящие от объема. Других членов в энергии нет.

Получите формулу для равновесного параметра решетки  $a$ . Как будут релаксировать ближайшие к вакансии соседние — внутрь или наружу?

12. Рассмотрим закрепленную краевую дислокацию, показанную на фиг. 142. Пусть параметр решетки есть  $a$ , а расстояние между точками закрепления  $L$ . Если энергия образования дислокационной линии на единицу длины  $\delta E / \delta l$  не зависит от ориентации, то однородные внешние напряжения  $\sigma$  изогнут линию в круг.

а. Получите выражение для радиуса круга.

б. Найдите минимальное напряжение, при котором линия превратится в источник Франка — Рида. Выразите результат в дин/см<sup>2</sup>, если  $a = 3 \text{ \AA}$ ,  $L = 10^{-4} \text{ см}$  и  $\delta E / \delta l = 1 \text{ эВ/\AA}$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. «Lattice Dynamics», ed. Wallis R. F., New York, 1965.
2. *Seitz F.*, Modern Theory of Solids, New York, 1940. (Имеется перевод: *Зейтц Ф.*, Современная теория твердого тела, М.—Л., 1949.)
3. *Elliott R. J.*, в книге: «Phonons», ed. Stevenson W. H., Edinburgh, 1966.
4. *Sievers A. J.*, *Takeo S.*, Phys. Rev., **140**, A1030 (1965).
5. *Meijer H. J. G.*, *Polder D.*, Physica, **19**, 355 (1963).
6. *Harrison W. A.*, Phys. Rev., **100**, 903 (1956).
7. *Anderson P. W.*, Rev. Mod. Phys., **38**, 298 (1966).
8. *Wilson A. H.*, The Theory of Metals, 2d ed., London, 1954. (Имеется перевод первого издания: *Вильсон А.*, Квантовая теория металлов, ОГИЗ, 1941.)
9. *Fan H. Y.*, в книге: «Solid State Physics», eds. Seitz F., Turnbull D., vol. 1, New York, 1955.
10. «The Fermi Surface», eds. Harrison W. A., Webb M. B., New York, 1960.
11. *Kittel C.*, Quantum Theory of Solids, New York, 1963. (Имеется перевод: *Киттель Ч.*, Квантовая теория твердых тел, изд-во «Наука», 1967.)
12. *Frauenfelder H.*, The Mössbauer Effect, New York, 1962.
13. *Harrison W. A.*, Pseudopotentials in the Theory of Metals, New York, 1966. (Имеется перевод: *Харрисон У.*, Псевдопотенциалы в теории металлов, изд-во «Мир», 1968.)
14. *Harrison W. A.*, Phys. Rev., **181**, 1036 (1969).
15. *Moriarty J.*, Phys. Rev., в печати.
16. *Ewald P. P.*, Ann. Physik, **64**, 253 (1921).
17. *Fuchs K.*, Proc. Roy. Soc., **A151**, 585 (1935).
18. *Shaw R. W., Jr.*, в печати.
19. *Bohm D.*, *Staver T.*, Phys. Rev., **84**, 836 (1950).
20. *Kohn W.*, Phys. Rev. Lett., **2**, 393 (1959).
21. *Harrison W. A.*, Phys. Rev., **136**, A1107 (1964).
22. *Pick R.*, Journ. Phys. (France), **28**, 539 (1967).
23. *Brooks H.*, Trans. AIME, **227**, 546 (1963).
24. *Harrison W. A.*, Physica, **31**, 1692 (1965).
25. *Anderson P. W.*, Concepts in Solids, New York, 1964.
26. *Kleinman L.*, *Phillips J. C.*, Phys. Rev., **125**, 819 (1962).
27. *Phillips J. C.*, Phys. Rev., **166**, 832 (1968).
28. *Heine V.*, *Jones R. O.*, Sol. Stat. Phys., **2**, 719 (1969).
29. *Friedel J.*, Dislocations, Oxford, 1964. (Имеется перевод: *Фридель Ж.*, Дислокации, изд-во «Мир», 1967.)
30. *Frank F. C.*, *Read W. T.*, Phys. Rev., **79**, 722 (1950).
31. *Yarnell J. L.*, *Warren J. L.*, *Koenig S. H.*, в книге: «Lattice Dynamics», ed. Wallis R. F., New York, 1965.
32. *Brockhouse B. N.*, *Arase T.*, *Caglioti G.*, *Rao K. R.*, *Woods A. D. B.*, Phys. Rev., **128**, 1099 (1962).
- 33\*. *Heine V.*, *Weaire D.*, в книге: «Solid State Physics», eds. Ehrenreich H., Seitz F., Turnbull D., Vol. 24, New York, 1970.
- 34\*. «Физика металлов. 1. Электроны» под ред. Дж. Займана, изд-во «Мир», 1972.
- 35\*. «Устойчивость фаз в металлах и сплавах», изд-во «Мир», 1970.
- 36\*. *Wei-Mei Shyu*, *Singwi K. S.*, *Tosi M. P.*, Phys. Rev., **83** 237 (1971).
- 37\*. *Wei-Mei Shyu*, *Wehling J. H.*, *Cordes M. R.*, *Gaspari G. D.*, Phys. Rev., **84**, 1802 (1971).
- 38\*. *Shaw R. W., Jr.*, *Heine V.*, Phys. Rev., **85**, 1646 (1972).