

ния с резонансной частотой 572 МГц. Однако в отличие от спектров ЯМР NiMnO_3 и CoMnO_3 в спектре ЯМР CuMnO_3 наблюдается еще линия значительно меньшей интенсивности на частоте 590 МГц (см. рисунок).

Во внешнем магнитном поле линия на частоте 271.5 МГц смещается в сторону более низких частот, а линии на частотах 572 и 590 МГц — в сторону более высоких частот. Экспериментально определенное значение гиромагнитного отношения для всех линий в спектре оказалось равным 1.00 ± 0.05 МГц/кЭ, что соответствует табличному значению гиромагнитного отношения для ядер ^{55}Mn (1.056 МГц/кЭ).

В оксидных магнетиках [4, 5] сигналы ЯМР в диапазоне частот 260—330 МГц относят к ионам Mn^{4+} , а выше частоты 550 МГц — к ионам Mn^{2+} . Поэтому по аналогии с результатами работы [4] низкочастотную линию (271.5 МГц) можно отнести к ионам Mn^{4+} , а две высокочастотные (572 и 590 МГц) — к ионам Mn^{2+} .

Наличие двух линий в спектрах ЯМР Mn^{2+} может быть обусловлено либо анизотропией локальных полей на ядрах ^{55}Mn , либо наличием кристаллографически неэквивалентных позиций, занимаемых этими ионами. Измерения показали, что форма спектра ЯМР ^{55}Mn и ширина каждой из линий практически не зависят от величины внешнего магнитного поля. Это означает, что наличие двух линий в спектрах ЯМР ^{55}Mn не связано с анизотропией локальных полей на их ядрах. Поэтому мы можем утверждать, что эти линии связаны с кристаллографически неэквивалентными позициями, занимаемыми ионами Mn^{2+} . Одной из причин появления кристаллографически неэквивалентных позиций ионов марганца может быть замещение части ионов Cu^{2+} ионами Mn^{2+} .

Как уже указывалось, во внешнем магнитном поле линии ЯМР от ионов Mn^{4+} и Mn^{2+} смещаются в противоположные стороны, что указывает на различную ориентацию их магнитных моментов. Результирующий магнитный момент направлен по направлению магнитных моментов ионов Mn^{4+} .

Список литературы

- [1] Swoboda T. J., Vaughan J. D. // J. Phys. Chem. Sol. 1958. V. 5. N 2. P. 293—296.
- [2] Pernet M., Joubert J. C., Terraud B. // Sol. St. Comm. 1975. V. 16. N 8. P. 503—507.
- [3] Collomb A., Samaras D., Fillion G. et al. // JMMM. 1978. V. 8. N 1. P. 77—80.
- [4] Troyanchuk J. O., Shemyakov A. A., Prokopenko V. K. // Phys. Stat. Sol. (a). 1989. V. 113. N 1. P. K107—K109.
- [5] Kubo T., Yasuoka H., Hirai A. // J. Phys. Soc. Jap. 1966. V. 21. N 4. P. 812—813.

Институт физики твердого тела
и полупроводников АН БССР
Минск

Поступило в Редакцию
12 сентября 1990 г.

© Физика твердого тела, том 33, № 3, 1991
Solid State Physics, vol. 33, N 3, 1991

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ, ОБРАЗОВАННЫЕ ПЕРЕГИБОМ НА 60° ДИСЛОКАЦИИ В КРЕМНИИ

С. В. Муштенко

Реальная дислокация с краевой компонентой содержит элементы тонкой структуры: перегибы, ступеньки, частичные дислокации и т. д. [1]. Учет электронной структуры перегиба существен при некоторых механизмах движения дислокаций [2, 3], а также при исследовании структуры

линий дислокационной фотолюминесценции (ДФЛ) [4, 5]. Как отмечалось в [6], возмущение, вносимое перегибом, должно учитывать как сильную перестройку решетки в ядре дислокации, так и дальнедействующее возмущение, обусловленное полем деформационного потенциала. Второй член рассматривался в [7], где был проведен вариационный расчет энергии связи носителей заряда на перегибе, который аппроксимировался одноатомным участком винтовой дислокации.

В данной работе проведен численный расчет энергии и плотности электронных состояний низколежащих уровней, обусловленных перестройкой ядра дислокации. С учетом конкретной структуры дислокации (направление оси, число оборванных связей на единицу длины дислокации

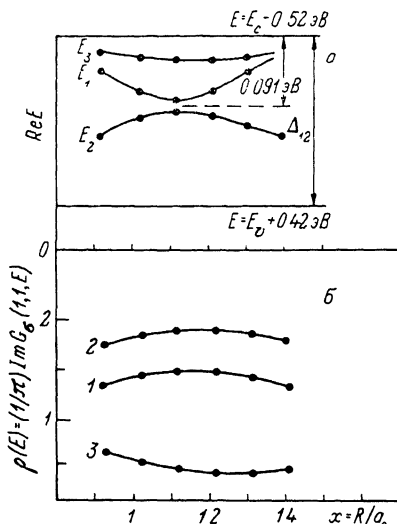
и т. п.) рассчитана зависимость энергии перегиба от межатомного расстояния.

Функция Грина неограниченной дислокации в узельном представлении имеет вид [8, 9]

$$G_{\sigma}^0(m, n; E) = i \exp(i/m - n/\alpha_{\sigma}) / (\beta \sin \alpha_{\sigma}),$$

$$\cos \alpha_{\sigma} = (E - E_0 - \Lambda - Un_{\sigma} - i\Delta) / 2\beta, \quad (1)$$

E_0 — энергия одиночной оборванной связи; β — матричный элемент гибри-



Зависимость энергии связи (а) и плотности состояний (б) от межатомного расстояния (показана дислокационная зона Si).

В области $x < 0.9$, решение (4) расходится. $\alpha_{\sigma} = 1.41 \text{ \AA} = 3.8 \text{ \AA}$, $\Delta = 0.03 \text{ eV}$, $\Delta_{12} = 0.23 \text{ eV}$.

дизации соседних оборванных связей; U — кулоновский интеграл отталкивания; n_{σ} — среднее число электронов со спином σ ; Λ и Δ — сдвиг и ширина уровней за счет взаимодействия дислокационных электронов с состояниями объемных зон; m и n нумеруют связи в области ядра.

Функция Грина для дислокации с перегибом находится путем решения уравнения Дайсона

$$G_{\sigma}(m, n; E) = G_{\sigma}^0(m, n; E) + \sum_{k, l} G_{\sigma}^0(m, k; E) V(k, l) G_{\sigma}(l, n; E), \quad (2)$$

где $V(k, l)$ — матричный элемент возмущения, вносимого перегибом. Для 60° дислокации это возмущение может быть выбрано в виде

$$V(k, l) = \begin{pmatrix} V_0 & \beta_{12} & \beta_{13} \\ \beta_{12} & 0 & 0 \\ \beta_{13} & 0 & V_0 \end{pmatrix}, \quad \beta_{ik} = \beta_{ki}. \quad (3)$$

Выбор возмущения в виде (3) предполагает, что оборванные связи на перегибе создают потенциалы «мощности» V_0 , взаимодействие перегиба с дислокационными состояниями описывается резонансным интегралом β_{ik} , а взаимодействие дислокационных состояний по разные стороны от перегиба мало. Параметр V_0 выбирался из следующего условия: в отсутствие перегиба должны быть получены дислокационные уровни $E_0 + 0.42$ и $E_c - 0.52$ эВ [10]. Параметры β_{ik} являются подгоночными при численном моделировании. Для качественного выяснения зависимости энергии перегиба от межатомного расстояния R_{ik} , β_{ik} выбирался в виде $\beta_{ik} = [-0.5 + 1/R_{ik}] S_{ik} - (R_{ik} + 1) \exp(-R_{ik})$, где S_{ik} — интеграл перекрытия. Выбор

потенциала в виде (3) позволяет получить систему алгебраических уравнений

$$\sum_l A_{ml} G_o(l, n; E) + B_n = 0, \quad m, n = 1, 2, 3, \quad (4)$$

где

$$A_{mk} = \sum_l G_o^0(m, l; E) V(l, k) - \delta_{mk}, \quad B_n = G_o^0(n, 1; E).$$

Поскольку знаменатели в (4) содержат энергию, то решение системы (4) подразумевает выполнение нескольких итераций (обычно 4—7) до самосогласования с заданной точностью. Результаты расчетов приведены на рисунке.

Видно, что минимум энергии перегиба достигается уже при значении $R \approx 1.3a$. Можно предположить, что электронная подсистема перегиба будет стремиться к более плотной структуре, чем структура, построенная из геометрических соображений (число оборванных связей на единицу длины дислокации для Si равно 1.41). Хотя рассчитанные значения энергии перегиба несколько отличаются от полученных в [11, 12] для энергии активации, энергия перегиба по-прежнему остается малой 0.091—0.11 эВ, так что связывание электронов такими мелкими уровнями маловероятно. Тем не менее остается возможность переползания дислокации через барьер Пайерлса путем движения перегиба по дислокации за счет переключения химических связей. Кроме того, повышение энергии перегиба с 5 мэВ в [7] до 0.09—0.1 эВ в настоящих расчетах позволяет вновь обратиться к вопросу о классификации линий D_1 и D_2 ДФЛ [4, 6], так как указанные значения энергии уже вполне достаточны для того, чтобы говорить о связи уровней перегиба с линиями ДФЛ.

Автор признателен Б. М. Даринскому и М. И. Молоцкому за постановку задачи и обсуждение результатов работы.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Дефекты в кристаллах полупроводников. Сб. статей. М., 1969. 15 с.
- [2] Белявский В. И., Даринский Б. М., Свиридов В. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 4. С. 15—37.
- [3] Судзуки Т., Ёсинага Х., Такеути С. Динамика дислокаций и пластичность. М., 1989. 294 с.
- [4] Suezawa M., Sumino K. // Phys. St. Sol. (a). 1983. V. 78. N 2. P. 639—645.
- [5] Suezawa M., Sasaki Y., Sumino K. // Phys. St. Sol. (a). 1983. V. 79. N 1. P. 173—181.
- [6] Кленова Т. В. // Автореф. канд. дис. Воронеж, 1986.
- [7] Кленова Т. В., Молоцкий М. И. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 10. С. 3142—3144.
- [8] Осипьян Ю. А., Рыжкин Н. А. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. № 3. С. 961—973.
- [9] Молоцкий М. И., Малюгин В. Б., Суровцев И. С. // Поверхность. 1983. Т. 4. С. 164—166.
- [10] Ossipyan Yu. A. // Cryst. Res. and Technol. 1981. V. 16. N 2. P. 239—246.
- [11] Гражулис В. А., Мухина В. Ю., Осипьян Ю. А., Шевченко С. А. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. № 6. С. 2149—2158.
- [12] Гражулис В. А., Кведер В. В., Мухина В. Ю., Осипьян Ю. А. // Письма в ЖЭТФ. 1976. Т. 24. № 3. С. 164—166.

Воронежский
политехнический институт

Поступило в Редакцию
13 марта 1990 г.

В окончательной редакции
13 сентября 1990 г.