

Спиновое рассеяние электронов проводимости на дислокациях в металле

© В.М. Жолкевский, Г.А. Денисенко

Институт кристаллографии Российской академии наук,
117333 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 23 ноября 2000 г.
В окончательной редакции 7 марта 2001 г.)

Рассматривается рассеяние электронов проводимости с переориентацией спина на дислокациях в металлах с сильной спин-орбитальной связью. Используется модельный потенциал спин-орбитального взаимодействия, описывающий спиновое рассеяние электронов проводимости. Деформация кристаллической решетки металла приводит к изменению структурного фактора. Для расчета ядра прямолинейной краевой дислокации применяется метод молекулярной динамики. Проведено сравнение с экспериментальными результатами по наблюдению парамагнитного резонанса на электронах проводимости в меди.

В задаче о рассеянии носителей тока в металлах и полупроводниках особо выделяется случай рассеяния с переворотом их спина [1]. Данный вопрос представляет несомненный интерес для метода парамагнитного резонанса на электронах проводимости (ПРЭП) [2], где данное рассеяние определяет уширение резонансной линии. Переворот спина обусловлен изменениями спин-орбитального взаимодействия в металле, тепловыми колебаниями решетки, примесными атомами и собственными дефектами структуры металла (вакансиями, границами зерен, дислокациями, дефектами упаковки и т.д.). Одним из наиболее интересных типов дефектов структуры являются дислокации. Хорошо известны трудности, которые возникают при расчетах электросопротивления, обусловленного дислокациями (роль ядра дислокации, возможность резонансного рассеяния на локализованных уровнях), и объяснении экспериментальных результатов. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к иным угловым зависимостям от направлений падающего и рассеиваемого электрона по сравнению со случаем обычного (без переворота спина) рассеяния, в основном и определяющего измеряемое электросопротивление. Поэтому изучение спинового рассеяния может дать дополнительную информацию о геометрических характеристиках рассеивающих центров.

Экспериментальные данные по спиновому рассеянию электронов проводимости на дислокациях в пластически деформированных металлах с сильной спин-орбитальной связью (Ag, Cu, Al) были получены в работе [3]. Отметим, что обычная техника наблюдения электронного парамагнитного резонанса, успешно использующаяся для металлов со слабой спин-орбитальной связью (щелочные металлы), в данном случае в силу большой ширины резонансной линии неприменима. Необходимость использования специальных методик и приспособлений (метод "спиновой прозрачности" [4]), по-видимому, и объясняет небольшое количество работ по ПРЭП в металлах с сильной спин-орбитальной связью в целом и тем более по спиновому рассеянию на дефектах структуры металла.

В работе [3] какого-либо теоретического анализа полученных результатов проведено не было. Предпри-

няя авторами попытка интерпретировать результаты эксперимента, используя данные по фононному механизму рассеяния, может рассматриваться лишь как качественная.

Расчеты спинового рассеяния электронов проводимости на дислокациях были выполнены в работах [5–7] с использованием подхода, ранее примененного к случаю жидких металлов [8] и рассеянию на фонах [9], в котором информация о пространственных особенностях дефекта заключена в обычном структурном факторе. Рассмотрение велось как с применением обычного оператора спин-орбитального взаимодействия и ортогонализированных плоских волн при описании электронов проводимости [5,6], так [5,7] и с использованием модельного псевдопотенциала спин-орбитального взаимодействия [10]. Спиновое рассеяние рассчитывалось в борновском приближении. Ядро дислокации (область, где неприменимы результаты линейной теории упругости), как и в выполненных на тот момент работах по электросопротивлению, обусловленному дислокациями, было представлено полым цилиндром. Диаметр цилиндра подбирался исходя из соответствия результатов расчета электросопротивления экспериментальным данным.

Для меди и серебра было получено достаточно хорошее соответствие между рассчитанными и экспериментально полученными значениями времени спиновой релаксации — величины, характеризующей рассеяние с переворотом спина. Для алюминия расчетное значение оказалось значительно меньше экспериментального.

В данной работе спиновое рассеяние электронов проводимости, обусловленное дислокациями, проводится без использования указанной ранее модели ядра с помощью численного расчета ядра прямолинейной краевой дислокации по методу молекулярной динамики.

Модельный псевдопотенциал V_M [10], учитывающий спин-орбитальное взаимодействие, в предположении, что потенциал решетки металла может быть аппроксимирован суммой сферически-симметричных перекрывающихся потенциалов, может быть представлен через обычный модельный потенциал Хейне–Абаренкова V_{HA} [11] и потенциал V_{s-o} , описывающий спин-орбитальное взаимо-

действие, с помощью следующего выражения:

$$V_M = V_{HA} + V_{s-o}, \quad (1)$$

где

$$V_{s-o} = \sum_j \mathbf{s} \mathbf{l}_j \sum_l \lambda_l f_l(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) P_l. \quad (2)$$

Здесь \mathbf{l}_j — оператор углового момента электрона проводимости по отношению к иону, находящемуся в положении \mathbf{r}_j ; \mathbf{s} — спин электрона, λ_l — параметры модельного потенциала, P_l — проекционный оператор на пространство состояний со значением орбитального квантового числа l . Функция $f_l(r) = 1$ для $r \leq R_M$ и $f_l(r) = 0$ для $r > R_M$ (R_M — модельный радиус).

В борновском приближении выражение, определяющее время релаксации T_1 продольной компоненты намагниченности — величину, характеризующую рассеяние электронов с переворотом спина, вызванное спин-орбитальным взаимодействием H_{s-o} , имеет вид [2]

$$T_1^{-1} = \frac{2\pi\rho_0(E_F)}{\hbar} \iint \frac{d\Omega d\Omega'}{(4\pi)^2} |\langle \Psi_{\mathbf{k}'_F s'} | H_{s-o} | \Psi_{\mathbf{k}_F s} \rangle|^2, \quad (3)$$

где $\rho_0(E_F) \equiv \rho(E_F)V$ — плотность состояний электронов вблизи уровня Ферми, V — объем образца, $\Psi_{\mathbf{k}_F s}$ — волновая функция электрона проводимости, s — спиновое состояние, \mathbf{k}_F — волновой вектор Ферми; интегрирование проводится по направлениям волновых векторов падающего и рассеянного электронов.

В рассеянии с переворотом спина должны учитываться как первое, так и второе взаимодействие, данные выражением (1). В случае дислокаций возмущение потенциала (1), приводящее к спиновому рассеянию, обусловлено смещением ионов из их исходных положений. Роль рассеивающих центров здесь играют сами смещенные ионы основной решетки. В этом случае (см. обсуждение эффективности двух механизмов переворота спина в [1]) для оценки спинового рассеяния достаточно удвоить численное значение для матричного элемента в выражении (3). Подобное заключение сделано и в [10].

С учетом этого, заменяя H_{s-o} на V_{s-o} и $\Psi_{\mathbf{k}_F s}$ псевдоволновой функцией, аппроксимируя орбитальную часть псевдоволновой функции плоской волной и используя выражение для матричного элемента модельного псевдопотенциала [10], рассчитанного на плоских волнах, имеем

$$T_1^{-1} = \frac{\rho_0(E_F)}{8\pi\hbar k_F^4} \iint d\Omega d\Omega' |g\delta S(\mathbf{q}) \langle s' | \mathbf{s} [\mathbf{k}_F \times \mathbf{k}'_F] | s \rangle|^2, \quad (4)$$

где

$$g = \frac{8\pi}{\Omega_0} \sum_l 2\lambda_l (2l+1) \Lambda_l P'_l(\cos(\mathbf{k}'_F, \mathbf{k}_F)),$$

Ω_0 — объем элементарной ячейки, $P'_l \equiv dP_l/dx$, P_l — полиномы Лежандра.

В приближении сферической поверхности Ферми для Λ_l имеем

$$\Lambda_l = \int_0^{R_M} j_l^2(k_F r) r^2 dr. \quad (5)$$

В выражении (4) $\delta S(\mathbf{q})$ — изменение структурного фактора $S(\mathbf{q})$ идеальной кристаллической решетки металла в результате деформации, обусловленной дислокациями. Для $S(\mathbf{q})$ имеем обычное выражение

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_j \exp\{-i(\mathbf{q}\mathbf{r}_j)\}, \quad (6)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k}'_F - \mathbf{k}_F$, а N — обозначает полное число ионов в объеме V .

Для расчета ядра дислокации по методу молекулярной динамики используется потенциал взаимодействия в виде парного центрального потенциала Морзе [11]

$$U(r_{ij}) = D[\exp\{-2\alpha(r_{ij}-r_0)\} - 2\exp\{-\alpha(r_{ij}-r_0)\}], \quad (7)$$

где r_{ij} — расстояние между двумя ионами, r_0 — равновесное расстояние между двумя ионами, D — энергия диссоциации пары ионов, α — константа, являющаяся мерой "жесткости" взаимодействия.

Предполагаем, что смещения атомов вдоль линии прямолинейной дислокации равны нулю, т.е. рассматривается двумерная задача в плоскости, перпендикулярной линии дислокации ($z = 0$). Первоначальные смещения атомов вокруг прямолинейной краевой дислокации задаются обычным решением в рамках теории упругости [12]

$$u_x = \frac{b}{2\pi} \left[\arctg\left(\frac{y}{x}\right) + \frac{xy}{2(1-\sigma)r^2} \right] + C_1,$$

$$u_y = \frac{b}{4\pi(1-\sigma)} \left[\frac{1-2\sigma}{2} \ln(r^2) + \frac{x^2}{r^2} \right] + C_2, \quad (8)$$

где $r^2 = x^2 + y^2$, σ — коэффициент Пуассона, b — модуль вектора Бюргера, C_1, C_2 — постоянные интегрирования. Стартовая конфигурация строится таким образом, что дислокация пересекает плоскость $z = 0$ в точке $x = 0$, $y = 0.5$. Константа C_1 находится из условия

$$u_x|_{x \rightarrow +0} = 0, \quad u_x|_{x \rightarrow -0} = 0, \quad u_x|_{x > 0} = -b/2, \quad u_x|_{x < 0} = b/2.$$

$$y > 0 \quad y > 0 \quad y \rightarrow -\infty \quad y \rightarrow -\infty$$

Условие $u_y(x, y) = u_y(-x, y)$ выполняется при любом C_2 . Таким образом, для $x > 0$, $y > 0$ $C_1 = b/2$, для $x < 0$, $y > 0$ $C_1 = -b/2$, для любых x, y $C_2 = 0$.

Плоскость $z = 0$ разбивается на две области: I — внутренняя — область расчетной ячейки, II — область матрицы. Смещения атомов в области II подчиняются линейной теории упругости, а положения атомов в области I определяются из решения динамических уравнений [12] с выбранным межатомным потенциалом. Расчет ядра дислокации с помощью такого метода с жесткой границей между областями I и II имеет определенные

недостатки, наиболее важным из которых является то, в упругом решении для области II не учитываются граничные условия на поверхности раздела областей. Различные пути усовершенствования модели, позволяющие учитывать все более тонкие эффекты взаимодействия областей, а также построение моделей с подвижной границей рассмотрены, например, в [13]. В нашем случае для получения оценок времен спиновой релаксации мы используем метод с жесткой границей, взяв в качестве критериев выбора радиуса R области I малость отклонений между смещениями, определенными из динамических уравнений и (8), для соответствующих атомов на границе и малость возникающей здесь деформации, позволяющую применять линейную теорию упругости. Этим критериям для потенциала (7) удовлетворила величина R порядка 10 межатомных расстояний. На границе такой расчетной ячейки величина деформации не превосходила 0.01.

В процессе расчета положения атомов в области расчетной ячейки по методу молекулярной динамики используется процедура искусственной диссипации энергии (искусственное демпфирование) [14], заключающаяся в том, что в моменты времени, когда кинетическая энергия системы достигает максимума, все компоненты скорости полагаются равными нулю. Дополнительно скорость частицы j полагалась равной нулю в момент времени t , когда частица начинала двигаться в направлении, противоположном направлению действия силы $F_j(t)$ со стороны остальных частиц [12]

$$\mathbf{F}_j(t)\mathbf{v}_j(t) \leq 0, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (9)$$

где \mathbf{v}_j — скорость частицы.

Критерием окончания расчета служит малое накопление кинетической энергии системы между процедурами демпфирования.

Анализ, проведенный в работах [5,7], показал, что в случае меди и серебра в выражении (4) достаточно ограничиться слагаемым с $l = 1$. Для расчета времени спиновой релаксации, обусловленной дислокациями, необходимо провести усреднение выражения (4) по углам, учитывающее произвольность направления внешнего по отношению магнитного поля в эксперименте по ПРЭП относительно оси дислокации, а затем интегрирование полученного выражения вдоль оси дислокации и усреднения по направлениям падения и рассеяния электрона.

После выполнения этих усреднений для нашего конкретного случая приходим к выражению

$$T_1^{-1} = \frac{128\pi^2\rho(E_F)}{k_F r_0^2} \lambda_1^2 \Lambda_1^2 X \rho_d, \quad (10)$$

$$X = N^{4/3} \iint d\varphi d\varphi' |\delta S(\varphi, \varphi')|^2 \times \left[1 - \cos(\varphi - \varphi') + 2 \sin^2(\varphi - \varphi') \right], \quad (11)$$

где φ и φ' — полярные углы векторов \mathbf{k}_F и \mathbf{k}'_F соответственно, ρ_d — плотность дислокаций. Входящая в

(11) величина $\delta S(\varphi, \varphi')$ представляет собой изменение той части структурного фактора (6), которая описывает положение атомов в плоскости $z = 0$, перпендикулярной оси дислокации. Данная величина пропорциональна $N^{-2/3}$, где $N^{2/3}$ — число атомов в плоскости.

Проведем численные оценки для случая меди. Расчеты параметра X , заданного выражением (11), были выполнены с использованием при вычислении $\delta S(\varphi, \varphi')$ положений атомов деформированной кристаллической решетки, полученных с помощью метода молекулярной динамики. При значениях констант потенциала [11] $D = 0.3429$ eV, $\alpha = 1.3588$ Å⁻¹, $r_0 = 2.866$ Å и значениях величин в выражении (8) для смещений атомов $\sigma = 0.345$ [7], $b \approx r_0$ вычисления X дали численный результат, равный 10. В результате для меди при значениях параметров $\lambda_1 = 0.003$ a.u., $R_M = 4.3$ a.u., $\rho(E_F) = 1.35 \cdot 10^{34}$ erg⁻¹ · cm⁻³, $k_F = 1.36 \cdot 10^8$ cm⁻¹ [7] для времени спиновой релаксации в расчете на единичную плотность дислокаций получаем следующую оценку: $T_1^{-1} = 4 \cdot 10^{-3}$ s⁻¹ · cm². Экспериментальное значение для полуширины резонансной линии для единичной плотности дислокаций составляет 1.5 ± 0.3 G · cm² [3], что в пересчете дает для T_1^{-1} величину порядка $2.7 \cdot 10^{-3}$ s⁻¹ · cm². Реальная структура дислокационной сети при деформациях, достигнутых в эксперименте, несомненно, сложной рассмотренного случая прямолинейных краевых дислокаций. С учетом этого согласие расчетных и экспериментальных данных представляется хорошим.

Необходимо сделать ряд общих замечаний. В данной работе использовалось борновское приближение. Очевидно, что такое приближение не учитывает рассеяния, когда критерий $qa \ll 1$ (q — модуль изменения волнового вектора, a — характерный размер рассеивающей области) невыполним. Фактически, поскольку для ядра дислокации $a \approx k_F^{-1}$, данное условие указывает на отбрасывание рассеяния на большие углы. Представляется, что для интерпретации экспериментальных результатов для ПРЭП, где наблюдаемая ширина резонансной линии определяется рассеянием всех электронов проводимости, т. е. доля электронов, рассеиваемых на большие углы невелика, и где дислокационная структура в образце неупорядочена, данный момент не является критическим. Отметим, что фактически используемое предположение о преобладании малоуглового рассеяния и позволило проводить сравнение рассеяния на дислокациях и фонах [1,3].

Рассчитанное значение близко к оценкам $0.54 \cdot 10^{-3}$ [6] и $4.6 \cdot 10^{-3}$ s⁻¹ · cm² [7]; тем не менее полученный результат представляет интерес как достигнутый без использования модельных представлений о ядре дислокации.

Список литературы

- [1] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. Наука, М. (1984).
- [2] Б.М. Хабибуллин, Э.Г. Харахашьян. УФН **111**, 5, 483 (1973).

- [3] F. Beuneeu, P. Monod. Phys. Rev. **13**, 8, 3424 (1976).
- [4] J. Winter. Magnetic Resonance in Metals. Clarendon Press, Oxford. (1971).
- [5] Г.А. Денисенко. ФТТ **19**, 6, 1613 (1977).
- [6] D.A. Contreras, J.S. Helman. Phys. Rev. **B16**, 6, 3493 (1977).
- [7] G.A. Denisenko, Yu.A. Ermakov. J. Phys. F: Met. Phys. **10**, 8, 1303 (1980).
- [8] J.S. Helman, R.A.B. Devine. Phys. Rev. **B4**, 4, 1153 (1971).
- [9] R.A.B. Devine, J.S. Helman. Phys. Rev. **B4**, 12, 4384 (1971).
- [10] A.O.E. Animalu. Phil. Mag. **13**, 121, 53 (1966).
- [11] R.M.J. Cotterill, M. Doyama. Phys. Rev. **145**, 1, 465 (1966).
- [12] Дефекты в кристаллах, их моделирование на ЭВМ / Под ред. Ю.А. Осипьяна. Наука, Л. (1980).
- [13] К. Теодосиу. Упругие модели дефектов в кристаллах. Мир, М. (1985).
- [14] P.C. Gehlen, A.R. Rosenfield, G.T. Hahn. J. Appl. Phys. **39**, 11, 5246 (1968).