

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ДВИЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В НЕМАГНИТНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Б. М. Даринский, В. Н. Фёклин

Воронежский государственный университет

Рассматривается влияние малого внешнего магнитного поля на взаимодействие дислокации с парамагнитным центром в немагнитных кристаллах. Выяснено, что в этом процессе существенную роль играет спин-орбитальное взаимодействие между частицами с неспаренными электронами. Изучается динамика движения дислокации через парамагнитный центр при включении магнитного поля.

ВВЕДЕНИЕ

Влиянии относительно малых магнитных полей ~ 10 кОе на различные микро- и макропластические характеристики ионных, ковалентных, молекулярных кристаллов, некоторых металлов, полупроводников и органических соединений — названо магнитопластическим эффектом (МПЭ). Большой объем экспериментальных данных [1], об изменениях механических и других структурных свойств твердого тела, многогранность и разнообразие изучаемых процессов требуют попыток создать теорию влияния слабых магнитных полей. Однако единой концепции объясняющей данную группу эффектов не создано. В существующие модели магнитопластического эффекта перенесены и развиваются несколько возможных механизмов, основанных на представлениях о квантовых состояниях системы двух электронов, имеющих различные спиновые квантовые числа — Δg и релаксационные механизмы, а также механизм изотропного сверхтонкого взаимодействия неспаренных электронов с магнитными ядрами (СВТ-механизм) [2–7]. Считается, что магнитное поле порождает эволюцию состояния спинов в системе дислокация-парамагнитный центр между синглетным S-состоянием двух электронов и триплетным T-состоянием. Малость изучаемых полей ($\mu_B B \sim 10^{-4}$ эВ, где μ_B — магнетон Бора) исключает силовое действие магнитного поля на движение дислокаций, и как сейчас считается, оно является лишь катализатором спиновых процессов приводящих к изменению внутреннего состояния взаимодействующих между собой ионов примеси и дислокации.

1. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДИСЛОКАЦИИ СО СТОПОРОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В качестве модели выбран ионный кристалл NaCl с введенной примесью Ca [2]. Рассматривается взаимодействие краевых дислокаций с парамагнитным стопором в рамках модели, в которой система двух взаимодействующих атомов связана химической связью. Процесс депиннинга происходит под действием внутренних напряжений кристалла, является пороговым и носит эстафетный характер. Пороговость процесса означает, что введенные краевые дислокации, движимые внутренними напряжениями, распределившись и закрепившись на стопорах, находятся в условиях «близких» для отрыва. Такой отрыв одной из дислокаций вызывает изменение полей напряжений в кристалле и дает возможность для депиннинга от стопоров других дислокаций. Между ионом примеси кальция и ионами Cl^- может образоваться квазимолекула в возбужденном состоянии. Анализируются энергетическая структура и волновые функции пары валентных атомов такой системы. Гамильтониан системы — парамагнитная примесь — ядро дислокации, представляет собой сумму самосогласованного поля ионов и взаимодействия между парой валентных электронов:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{BS} + \hat{H}_{so} = \hat{H}_0 - g\mu_B \vec{B}(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2) + A_{sl}(\vec{r}_1)(\hat{\sigma}_1 \hat{l}_1) + A_{sl}(\vec{r}_2)(\hat{\sigma}_2 \hat{l}_2) + A_{sl}(\vec{r})(\hat{\sigma}_1 \hat{l}_2 + \hat{\sigma}_2 \hat{l}_1), \quad (1)$$

где \hat{H}_0 содержит слагаемые, отвечающие за кинетическую энергию, кулоновское и обменное взаимодействие, \vec{B} — вектор магнитной индукции внешнего поля, g — g -фактор частиц, μ_B — магнетон Бора, $\hat{l}_1, \hat{l}_2, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2$ — операторы орбитального момента и спина электронов, $\vec{r}_1,$

\vec{r}_2 — координаты электронов, \vec{r} — расстояние между ними, $A_{sl}(\vec{r}_1)$, $A_{sl}(\vec{r}_2)$, $A_{sl}(\vec{r})$ — коэффициенты спин-орбитального взаимодействия электронов. В качестве базисных, выберем волновые функции p электронов образующих химическую связь. Существующие взаимодействия приводят к разделению спектра на четыре терма. Волновая функция является суперпозицией волновых функций синглетного — $|\psi_S\rangle$ и триплетных — $|\psi_T\rangle$ состояний.

$$\begin{aligned} |\Psi(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle &= \\ &= C_0|\vec{\sigma}_S\rangle + C_1|\vec{\sigma}_{T_0}\rangle + C_2|\vec{\sigma}_{T_1}\rangle + C_3|\sigma_{T_{-1}}\rangle, \\ |\psi_S\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2)S\rangle, \\ |\psi_{T_0}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2)T\rangle, \\ |\psi_{T_1}\rangle &= |\alpha_1\alpha_2T\rangle, |\psi_{T_{-1}}\rangle = |\beta_1\beta_2T\rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

где α и β — одночастичные спиновые функции, C_0, C_1, C_2, C_3 — амплитуды синглетного и триплетных состояний в полной волновой функции, $|S\rangle$ и $|T\rangle$ — симметричная и антисимметричная

где $P(\vec{r}_1)$ и $P(\vec{r}_2)$ — пространственные волновые функции p -электронов образующих связь.

Решение стационарное уравнение Шредингера для двух электронов, описывает энергетический спектр взаимодействующих частиц в магнитном поле с учетом спин-орбитального взаимодействия между ними. Действие оператора \hat{H}_{so} на волновые функции дает ненулевые матричные элементы $\langle\psi_S|\hat{H}_{so}|\psi_{T_0}\rangle$, $\langle\psi_{T_0}|\hat{H}_{so}|\psi_S\rangle$. Получена зависимость энергии основного и возбужденных состояний от внешнего магнитного поля в первом и втором приближении теории возмущения [8]. Волновые функции состояний в магнитном поле раскладывается по базису собственных волновых функций ψ_j оператора (1) $|\phi_i(\vec{B}, \vec{\sigma}, \vec{l})\rangle = \sum_{j=0}^3 d_j(\vec{B}, \vec{\sigma}, \vec{l})|\psi_j(\vec{B}=0)\rangle$,

$d_j(\vec{B}, \vec{\sigma}, \vec{l}) = \sum_{n=0}^3 C_{in} C_{nj}$, получаемых при решении стационарного уравнения Шредингера. Коэффициенты d_j в момент включения поля определяются набором коэффициентов C , соответствующих энергии состояния E_i :

$$C = \begin{pmatrix} 1 - \frac{V^2}{2\Delta E^2} - \frac{3(g\mu_B B_x)^2 V^2}{\Delta E^4} & -\frac{V}{\Delta E} - \frac{2(g\mu_B B_x)^2 V}{\Delta E^3} & \frac{g\mu_B B_x V}{\Delta E^2} & \frac{g\mu_B B_x V}{\Delta E^2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{V}{\Delta E} \sqrt{1 - \frac{V}{2\Delta E} - \frac{g\mu_B B_x V}{\Delta E^2}} & -1 & 1 & 1 \\ \frac{V}{\Delta E} \sqrt{1 - \frac{V}{2\Delta E} - \frac{g\mu_B B_x V}{\Delta E^2}} & \frac{1}{\sqrt{2 + \frac{V^2}{\sqrt{2}\sqrt{\Delta E^2 (g\mu_B B_x)^2}}}} & \frac{1}{\sqrt{4 - \frac{\sqrt{2}V^2}{\sqrt{\Delta E^2 (g\mu_B B_x)^2}}}} & \frac{1}{\sqrt{4 - \frac{\sqrt{2}V^2}{\sqrt{\Delta E^2 (g\mu_B B_x)^2}}}} \\ \frac{V}{\Delta E} \sqrt{1 - \frac{V}{2\Delta E} - \frac{g\mu_B B_x V}{\Delta E^2}} & \frac{1}{\sqrt{2 - \frac{V^2}{\sqrt{2}\sqrt{\Delta E^2 (g\mu_B B_x)^2}}}} & \frac{1}{\sqrt{4 + \frac{\sqrt{2}V^2}{\sqrt{\Delta E^2 (g\mu_B B_x)^2}}}} & \frac{1}{\sqrt{4 + \frac{\sqrt{2}V^2}{\sqrt{\Delta E^2 (g\mu_B B_x)^2}}}} \end{pmatrix}.$$

пространственные волновые функции пары взаимодействующих электронов, которые строятся на базисе их одноэлектронных функций:

$$\begin{aligned} |S\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [P_1(\vec{r}_1)P_{-1}(\vec{r}_2) + P_1(\vec{r}_2)P_{-1}(\vec{r}_1)] + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{3}} P_0(\vec{r}_1)P_0(\vec{r}_2), \\ |T\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [P_1(\vec{r}_1)P_{-1}(\vec{r}_2) - P_1(\vec{r}_2)P_{-1}(\vec{r}_1)], \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $V = \langle P_1(\vec{r}_1)|A(\vec{r}_1)|P_1(\vec{r}_1)\rangle + \langle P_1(\vec{r}_2)|A(\vec{r}_2)|P_1(\vec{r}_2)\rangle + 2\langle T|A(\vec{r})|T\rangle$ матричный элемент, определяемый спин-орбитальным взаимодействием, $\Delta E = E_1 - E_0$ — разность энергии между уровнями энергии при учете \hat{H}_0 без возмущений. Включение магнитного поля с учетом спин-орбитального взаимодействия между электронами приводит к смешиванию волновых функций синглетного и триплетных состояний и изменению положения равновесия всей системы. Так $|\psi_S\rangle$ переходит в смешанное:

$$|\phi_0\rangle \approx |\psi_S\rangle + \frac{\sqrt{2}(g\mu_B B_x V)}{\Delta E^2} (|\psi_{T_{+1}}\rangle + |\psi_{T_{-1}}\rangle) - \left(\frac{V}{\Delta E} + \frac{2(g\mu_B B_x)^2 V}{\Delta E^3} \right) |\psi_{T_0}\rangle.$$

Пространственная волновая функция электронов в потенциале $U_1(\vec{r}_1) + U_2(\vec{r}_2 - \dot{Z}t)$, когда ядро дислокации движется со скоростью \dot{Z} относительно покоящегося иона примеси, преобразуется по следующему правилу:

$$\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{Z}, t) = e^{-\frac{E_i t}{\hbar}} e^{-\frac{i m \dot{Z}^2(t) t}{\hbar}} \times \left(\varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2 - \dot{Z}t) e^{\frac{i m \dot{Z}(t) z_2}{\hbar}} \pm \pm \varphi_1(\vec{r}_2) \varphi_2(\vec{r}_1 - \dot{Z}t) e^{\frac{i m \dot{Z}(t) z_1}{\hbar}} \right).$$

Полная функция в магнитном поле с учетом всех преобразований выражается смесью базисных стационарных функций $\Psi = \Psi(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{Z}, t) = \sum_i a_i(t) \phi_i$. Для описания динамики узла дислокации используются временное уравнение Шредингера $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_2 + U_1(\vec{r}_1) + U_2(\vec{r}_2 - \dot{Z}t) \right) \Psi$. Умножив обе части уравнения слева на Ψ^* , интегрируя по координатам и используя свойство ортогональности базисных функций, получаем систему уравнений описывающих изменение вкладов состояний во времени.

$$i\hbar \dot{a}_i(t) = \sum_{i=0}^3 a_i m b_i \ddot{Z}(t) \cdot \exp(i\Omega_{ij} t). \quad (4)$$

Для описания движения ядра дислокации в существующем потенциале, используем уравнение для движения под действием вынуждающей силы и вязкого трения обусловленного излучением фононов:

$$M\ddot{Z}(t) = \bar{F}(t) - \eta\dot{Z}(t), \quad (5)$$

средняя сила определяется как:

$$\begin{aligned} \bar{F}(t) &= \langle \Psi | -\frac{\partial}{\partial Z} \hat{H} | \Psi \rangle = \\ &= \sum_{i=0}^3 \sum_{j=0}^3 H'_{ij} a_i(t) a_j(t) \exp(i\Omega_{ij} t) = \\ &= \sum_{i=0}^3 E'_i |a_i(t)|^2 + 2 \sum_{i \neq j} V'_{ij} a_i(t) a_j(t) \cos(\Omega_{ij} t), \end{aligned}$$

где M — масса отрывающегося сегмента дислокации, m, z — масса и координата электрона движущегося иона, η — коэффициент вязкого трения, $a_i(t)$ — коэффициенты разложения волновой функции, E'_i — диагональные матричные элементы, V'_{ij} — недиагональные матричные элементы определяемые спин-орбитальным взаимодействием, $\Omega_{ij} = (E_i(\vec{B}, Z) - E_j(\vec{B}, Z)) / \hbar$, $b_0 = \langle S | z_2 + z_1 | S \rangle$, $b_{1,2,3} = \langle T | z_2 + z_1 | T \rangle$. Начальные условия определяются тем, в каком состоянии находилась система до момента включения магнитного поля.

Рассмотрим систему из двух уровней, вместо системы из четырех, т.к. в исследуемой области для слабых полей расстояние между триплетными уровнями гораздо меньше, чем между триплетными и синглетным. Собственные размеры ионов не позволяют им проникать друг в друга, поэтому существует ограничение на их среднее минимальное расстояние сближения. Предполагается, что закрепление и последующий отрыв дислокаций может происходить как из синглетного так и из высоколежащего триплетного состояния. До включения магнитного поля статистические веса синглетного и триплетного состояний составляют $\rho_S = 1/4$ и $\rho_T = 3/4$ соответственно при набегающей дислокации на стопор и закреплении на нем. Двигаясь в поле внутренних напряжений кристалла, дислокации приходят к равновесному распределению в полях внутренних напряжений и не могут преодолеть локальный потенциальный барьер, возникающий между ионом парамагнитной примеси и атомом, принадлежащим дислокации. Упругая сила, действующая на ядро дислокации со стороны прилегающих сегментов, существенно изменяет вид эффективного потенциала взаимодействия между стопором и дислокацией. При этом некоторая часть дислокаций в кристалле находится в состоянии «близком» для открепления около вершины барьера при данной температуре, т.е. высота барьера U несколько больше и пропорциональна $kT \sim 10^{-3}$ эВ.

Механизмом, обеспечивающим открепление дислокации, служат возникающие во внешнем поле переходы между низко и высоко лежащими термами. Под действием внешней упругой силы со стороны сегмента дислокации на ее закрепленное ядро, возникает возможность перекачки энергии необходимой для преодоления стопора. В случае триплетного состояния,

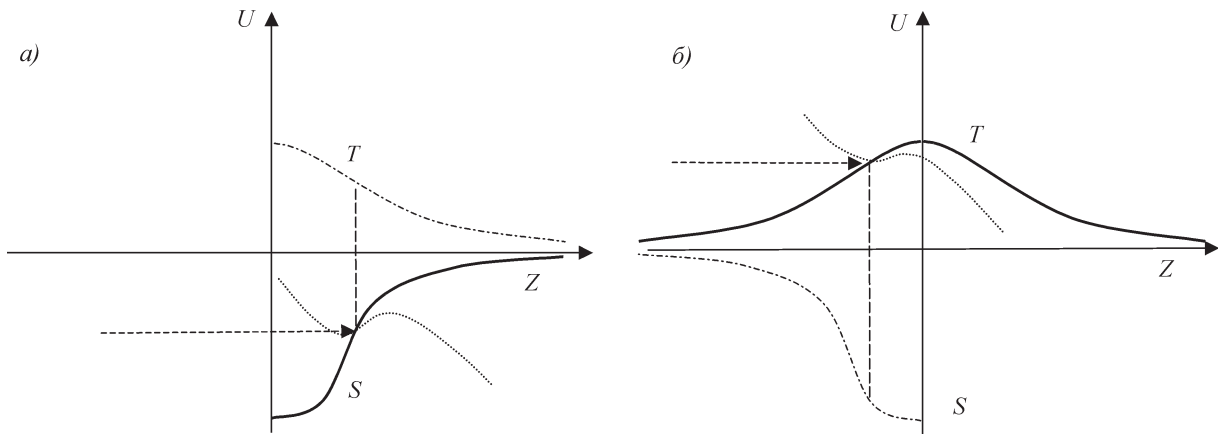


Рис. Случай закрепления ядра дислокации при его движении относительно иона примеси в синглетном а) и триплетном б) состоянии, в ситуации, когда приложена внешняя упругая сила, деформирующая барьер.

потенциальный барьер понижается за счет примеси низколежащего синглетного состояния. В случае, когда система находится в связанном синглетном состоянии, для депиннинга необходима примесь высоко лежащего триплетного состояния.

2. ДИНАМИКА ДВИЖЕНИЯ ЯДРА ДИСЛОКАЦИИ

Пусть до включения магнитного поля дислокационный сегмент находится в равновесном положении, а система двух спинов в синглетном состоянии, то есть, $a_0(0) = 1, a_1(0) = 0$. При включении магнитного поля волновая функция из чистого S-состояния превращается в суперпозицию S- и T-состояний с малым вкладом последнего, зависящим от величины и направления магнитного поля. Раскладываем потенциальную энергию в ряд в области нахождения центра дислокации около положения равновесия. Поскольку знак первой производной у синглетного и триплетного состояний противоположный, то сдвиг под действием внешней силы в сторону вершины барьера приводит к его сглаживанию и понижению. В результате уменьшения высоты, нарушается условие равновесия. Возникающее движение дислокации еще больше увеличивает вклад верхнего состояния. Малые периодические силы действующие в системе из-за расщепления уровней магнитным полем и спин-орбитальным взаимодействием, приводят к медленному оттоку энергии. Для оценки среднего времени открепления дислокации от стопора, считаем, что понижения барьера происходит при учете механизмов диссипации энергии через фононное трение. Раскла-

дывая потенциальную энергию в ряд около положения равновесия, получим уравнение (5) в виде:

$$\ddot{Z}(t) + 2\lambda\dot{Z}(t) + \omega_0^2 Z(t) = \frac{2}{M} \sum_{i \neq j}^3 V'_{ij} a_i(t) a_j(t) \cos(\Omega_{ij} t), \quad (6)$$

где ω_0 — частота колебаний атома около положения равновесия, λ — коэффициент затухания характеризующий фононное трение, Ω_{ij} — частоты определяемые разностью энергий состояний. Колебания между синглетным и триплетными уровнями имеют большие частоты по сравнению колебания между триплетными, поэтому они усредняются и не оказывают существенного влияния. Среднее время открепления дислокации от парамагнитного стопора, сопоставим со временем, за которое барьер уменьшится на достаточную для отрыва атома величину:

$$\tau_{dp} = \frac{kT}{I(\Omega)}. \quad (7)$$

Здесь $I(\Omega)$ — количество поглощаемой в среднем в единицу времени энергии [9], высота барьера $\sim kT$ — энергии тепловых колебаний решетки кристалла. $I(\Omega) = M\lambda\Omega^2 Z_0^2$, где $Z_0^2 = V' / \left(M\sqrt{(\omega_0^2 - \Omega^2)^2 + 4\Omega^2\lambda^2} \right)$. В первом порядке теории возмущений расщепление триплетных уровней пропорционально первой степени магнитного поля, соответственно $\Omega \sim g\mu_B B / \hbar$. Коэффициент затухания можно оценить через плотность потока импульса излучаемых фононов $\lambda = 2\eta / M = 2kT / (aMV_{phon})$, a — постоянная решетки кристалла, V_{phon} — скорость дви-

жения фононов. Поскольку и величина барьера и коэффициент затухания пропорциональны тепловой энергии, то время открепления сегмента дислокации не зависит от температуры среды, что отмечено в экспериментах [1,2]. При включении магнитного поля $g\mu_B B \sim 10^{-5} \div 10^{-4}$ эВ, оценка среднего времени снятия барьера дает $\tau_{dp} = \text{const} \frac{1}{(g\mu_B B)^2} \sim 10^{-3} \div 1$ с, что доста-

точно хорошо согласуется с экспериментальными данными [2]. Таким образом, можно считать, что изменения эффективного потенциала, в котором находится ядро дислокации, связано с диссипативными процессами, происходящими в системе. Магнитное поле изменяет параметры, определяющие взаимодействие между дислокацией и стопором, увеличивая вероятность депиннинга.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ движения сегмента дислокации вблизи парамагнитного стопора, в условиях наличия магнитного поля дает понимание возможных механизмов, обеспечивающих магнитоэластический эффект. Наличие магнитного поля изменяет существующие параметры, характеризующие движение в паре дислокация-примесь, и приводит к возможности передачи упругих сил со стороны всего сегмента дислокации для разрушения связей в квантовой системе. Решение задачи о влиянии магнитного

поля на процессы, происходящие в системе дислокация—примесь, предполагает учет спин-орбитального взаимодействия как существенного компонента явления. Полученная оценка для характерного времени открепления дислокации от точечного дефекта по порядку величины близка к экспериментальному значению. В рамках предположения о важной роли диссипативных процессов, раскрывается отмеченная в экспериментах слабая зависимость изучаемых процессов от температуры. Это позволяет надеяться, что дальнейшее уточнение модели приведет к улучшению согласия и более глубокому пониманию физики магнитоэластического эффекта.

ЛИТЕРАТУРА.

1. Головин Ю.И. // ФТТ. 2004. Т. 46, С. 769.
2. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Петржиц Е.А. // Кристаллография. 2003. Т. 48, С. 838.
3. Молоцкий М.И. // ФТТ. 1991. Т. 33, С. 3112.
4. Молоцкий М.И. // ФТТ. 1993. Т. 35, С. 11.
5. Molotskii M., Fleurov V. // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78, P. 2779.
6. Molotskii M., Fleurov V. // Phys. Rev. B. 1997. V. 56, P. 10809.
7. Бучаченко А.Л., Салихов К.М., Сагдеев Р.З. // Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. М.: Наука. 1978.
8. Даринский Б.М., Фёклин В.Н. // Известия РАН. Серия физическая. 2005. Т. 69, С. 1179.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. // Теоретическая физика М.: Наука. 1988. Т. 1, С. 105.