

在硅晶体中由螺位错引起的电子散射

黄亨吉

善甫康成

(延边大学物理系)

(广岛大学物性系)¹⁾

1983年8月11日收到

提 要

本文讨论硅晶体中由 $\langle 110 \rangle$ 螺位错引起的电子散射,用紧束缚近似只考虑 s 电子和 p 电子. 用长波近似只考虑 Γ 附近的电子散射. 此散射近似地服从基尔霍夫-惠更斯形式的积分方程. 用规范变换和格林函数方法解出了散射方程. 确认了在硅复杂能带的情况下也同单一能带的情况一样,在位错的下游侧出现电子波播及不到的影子.

一、引 言

螺位错周围晶格的异常结构,如图1所示. 对螺位错轴垂直入射的电子波,以不同方向迂迴位错轴到达位错下游侧的电子波之间存在位相因子 $\exp(ik_z c)$ 的差异,即存在位相差 $k_z c$. 其中 c 是晶格常数, k_z 是入射波的波矢对位错轴的投影. 因此,以不同方向迂迴位错轴到达位错下游侧的电子波之间就产生干涉,因而引起电子的散射^[1]. 这样的散射非常类似于 Aharonov-Bohm 散射^[2].

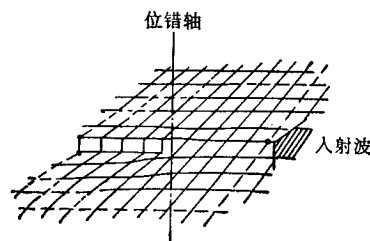


图 1

本文讨论了硅晶体中 $\langle 110 \rangle$ 方向的螺位错引起的电子散射. 利用紧束缚近似只考虑 s 电子和 p 电子时,就产生 8 个能带^[3,4]. 在硅晶体中有趣的是在 Γ 附近^[5]的价带电子和 Δ 方向上的导带电子. 因为利用了长波近似,所以不能考虑 Δ 方向上的导带电子的散射,只考虑 Γ 附近的电子散射. 在 Γ 附近近似地认为能带是各向同性的. 在本文中解散射问题归结为将哈密顿量写成下列的更一般化形式时要解 Aharonov-Bohm 散射问题.

$$\hat{H} = \hbar^2 \left(-\frac{1}{2m_{xx}^i} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{m_{xy}^i} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - \frac{1}{2m_{yy}^i} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - i \frac{k_z}{m_{xz}^i} \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{k_z}{m_{yz}^i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{k_z^2}{2m_{zz}^i} \right).$$

设 z 轴与位错轴一致. 由于平行于螺位错的方向上保持晶格平移对称性,因此在 z 轴方向上晶体的对称性没有受到破坏.

对于简立方晶体中的电子散射^[1,5],在单一能带的情况下,利用连续介质模型解散射

1) 日本国广岛大学理学部物性学科.

问题时发现,在位错下游侧较远处仍存在电子波播及不到的影子^[6]. 本文所讨论的硅复杂能带的情况,尽管由于螺位错引起的电子散射而产生电子的能带之间的跃迁,但仍不能消除位错下游侧产生的影子.

用长波近似和规范变换,将紧束缚近似中的薛定谔方程转变为基尔霍夫-惠更斯的积分方程,利用 Aharonov-Bohm 函数(以下简称 AB 函数)得到了复杂能带结构晶体中存在螺位错时的散射解,此解同单一能带时的 AB 散射不同之处在于,在给定的电子能量守恒的范围内,就产生能带之间跃迁,因而在其他能带中也产生散射波.

二、硅复杂能带和硅中的 $\langle 110 \rangle$ 位错

硅晶体属于金刚石结构,此结构是由两个面心立方的布喇菲原胞位移 $\frac{1}{2}a(\hat{e}_x + \hat{e}_y + \hat{e}_z)$ 套构而成. $\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z$ 是沿着硅立方晶体三个棱的单位矢量, $2a$ 为硅晶格常数. 最近邻格点有 4 个,用 \mathbf{d}_i 表示其位置;次近邻格有 12 个,用 \mathbf{e}_i 表示其位置,这相当于面心立方晶体的最近邻格点. 用这些 $\mathbf{d}_i, \mathbf{e}_i$, 应用紧束缚近似可以计算硅复杂能带. 其能带的计算结果如图 2 所示^[3,4]. 常温下,在 Γ'_{25} 点存在价带的空穴, Δ 方向上存在导带电子.

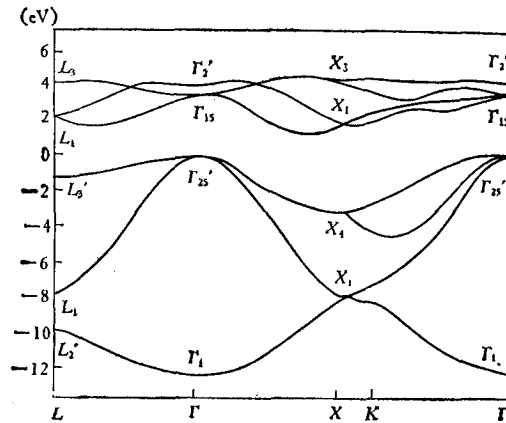


图 2 硅能带(横坐标以 $2\pi/a$ 为单位)

因为利用长波近似,所以只考虑 Γ'_{25} 点附近的价带电子.

设硅晶胞的边长为 2 (即令 $a = 1$), 存在 $\langle 110 \rangle$ 螺位错的情况下, 滑移矢量 \mathbf{b} 的大小是 $b = \sqrt{2}$. 设 z 轴选得与 $\langle 110 \rangle$ 螺位错轴一致, 则要进行下列坐标变换:

$$\begin{pmatrix} \hat{i} \\ \hat{j} \\ \hat{k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{e}_x \\ \hat{e}_y \\ \hat{e}_z \end{pmatrix}. \quad (1)$$

在螺位错周围的晶格均匀倾斜的情况下, 在新坐标系中单位矢量变成为

$$\hat{i}' = \hat{i} + \varepsilon_{xz}\hat{k}; \hat{j}' = \hat{j} + \varepsilon_{yz}\hat{k}; \hat{k}' = \hat{k}. \quad (2)$$

z 轴与螺位错轴一致时, 应变张量的非零分量只有 ε_{xz} 和 ε_{yz} 两个, 其在柱坐标系中的表示式是^[7]

$$\varepsilon_{xz} = -b \sin\theta/2\pi r; \varepsilon_{yz} = b \cos\theta/2\pi r. \quad (3)$$

三、紧束缚近似中的薛定谔方程

在晶体中运动的电子的薛定谔方程, 用紧束缚近似描述时可写成^[1]

$$EC(\mathbf{m}) = T^{(0)}C(\mathbf{m}) + \sum_{i=1}^4 T^{(1)}(i)C(\mathbf{m} + \mathbf{d}_i) + \sum_{i=1}^{12} T^{(2)}(i)C(\mathbf{m} + \mathbf{e}_i). \quad (4)$$

式中 $C(\mathbf{m})$ 是电子的波函数, \mathbf{m} 表示晶格点, \mathbf{d}_i 及 \mathbf{e}_i 分别表示最近邻和次近邻格点. 转移矩阵 (transfer matrix) $T^{(i)}$ 是 8×8 的矩阵, 其中 $T^{(0)}$ 代表 s 轨道和 p 轨道自身的能量; $T^{(1)}(i)$ 是最近邻格点之间耦合的转移矩阵; $T^{(2)}(i)$ 是次近邻格点之间耦合的转移矩阵. 考虑螺位错对电子运动的影响后, (4) 式变成

$$EC(\mathbf{m}) = T^{(0)}C(\mathbf{m}) + \sum_{i=1}^4 T^{(1)}(i)C(\mathbf{m} + \mathbf{d}'_i) + \sum_{i=1}^{12} T^{(2)}(i)C(\mathbf{m} + \mathbf{e}'_i). \quad (5)$$

式中 \mathbf{d}'_i 及 \mathbf{e}'_i 是考虑应变张量 ε_{xz} , ε_{yz} 影响后的最近邻和次近邻格点的位矢. 由于应用了长波近似, 所以可以认为 \mathbf{d}'_i , \mathbf{e}'_i 比波长小很多, 因而可将 (5) 式泰勒展开至 ∇ 的二次项为止, 可得

$$\left\{ T^{(0)} + \sum_{i=1}^4 T^{(1)}(i) + \sum_{i=1}^{12} T^{(2)}(i) + \sum_{i=1}^4 T^{(1)}(i)(\nabla' \mathbf{d}_i) + \sum_{i=1}^{12} T^{(2)}(i)(\nabla' \mathbf{e}_i) + \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^4 T^{(1)}(i)(\nabla' \mathbf{d}_i)^2 + \sum_{i=1}^{12} T^{(2)}(i)(\nabla' \mathbf{e}_i)^2 \right] - E \right\} C(\mathbf{m}) = 0. \quad (6)$$

式中 $\nabla' = (1 + \varepsilon)\nabla$, ε 代表应变张量. 在 (6) 式中, 令

$$\sum_{i=1}^4 T^{(1)}(i)(\nabla' \mathbf{d}_i) + \sum_{i=1}^{12} T^{(2)}(i)(\nabla' \mathbf{e}_i) + \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^4 T^{(1)}(i)(\nabla' \mathbf{d}_i)^2 + \sum_{i=1}^{12} T^{(2)}(i)(\nabla' \mathbf{e}_i)^2 \right] = \hat{Q}(\nabla'). \quad (7)$$

$$T^{(0)} + \sum_{i=1}^4 T^{(1)}(i) + \sum_{i=1}^{12} T^{(2)}(i) = \hat{R}. \quad (8)$$

则薛定谔方程(6)式可改写成

$$[\hat{Q}(\nabla') + \hat{R} - E]\phi(\mathbf{r}) = 0. \quad (9)$$

式中 $\phi(\mathbf{r})$ 是将 \mathbf{m} 看做连续变化时的电子波函数 $C(\mathbf{m})$. 由于沿着 z 轴方向保持晶体平移对称性, 因此只对 z 轴方向进行傅里叶变换, 这样在垂直于螺位错轴的平面内(9)式变成

$$[\hat{Q}(\nabla', k_z) + R(k_z) - E]\phi(\mathbf{r}) = 0. \quad (10)$$

式中 $\hat{H} = \hat{Q}(\nabla', k_z) + \hat{R}(k_z)$ 相当于哈密顿量. 这同长波近似中用二次方程表示的能带相似. 从而哈密顿量的形式是

$$\hat{H} = \hbar^2 \left(-\frac{1}{2m_{xx}^i} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{m_{xy}^i} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - \frac{1}{2m_{yy}^i} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - i \frac{k_z}{m_{xz}^i} \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{k_z}{m_{yz}^i} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{k_z^2}{2m_{zz}^i} \right). \quad (11)$$

四、用基尔霍夫-惠更斯积分方程表示散射波

对薛定谔方程(10)实行下列规范变换:

$$\phi(\mathbf{r}) = e^{-i \frac{\theta}{2\pi} \sqrt{z} k_z} \psi(\mathbf{r}). \quad (12)$$

这样使方程(10)变成沿着螺旋面的空间表示式, 即

$$[\hat{Q}(\nabla, k_z) + \hat{R}(k_z) - E]\psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (13)$$

在(13)式中虽然完成了 $\nabla' \rightarrow \nabla$ 的变换, 然而, 进行规范变换以后, 在 $y = 0, x > 0$ 的平面上, 空间变成不连续, 即

$$\psi(x, 0_+) = \psi(x, 0_-) e^{i\sqrt{z} k_z}. \quad (14)$$

因此, 每当利用(13)式时, 应注意不连续面的前提条件下解方程.

为了求出散射解时的方便起见引入格林函数

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\hat{Q}(\nabla'^+, -k_z) + \hat{R}(k_z) - E] = \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (15)$$

式中 ∇'^+ 中上标+表示算符 ∇' 作用于左侧. 格林函数也可改写成

$$G_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}, b} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \alpha_{\mu b}(\mathbf{k}) G_{bb}(\mathbf{k}) \alpha_{b\nu}(\mathbf{k}). \quad (16)$$

式中 α 满足(4)式的本征函数系, 是么正矩阵. 进行 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \times (13) + (15) \times \psi(\mathbf{r}')$ 的运算, 可得

$$\psi(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\hat{Q}(\nabla'^+, -k_z) - \hat{Q}(\nabla', k_z)] \psi(\mathbf{r}'). \quad (17)$$

(17)式属于面积分, 可利用格林定理改写成线积分的形式. 为此将(17)式中的被积函数改写成如下形式:

$$\frac{1}{2} \nabla [G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{Q}(\nabla'^+ - \nabla') \psi(\mathbf{r}') - i k_z G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{Q}^z \psi(\mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{Q} \psi(\mathbf{r}')].$$

利用上式由格林定理, (17)式变成为

$$\phi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \int dCG(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\mathbf{n} \cdot \hat{Q}(\nabla'^+ - \nabla') - ik_z \mathbf{n} \cdot \hat{Q}^z - \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}] \phi(\mathbf{r}'). \quad (18)$$

如上所述,实行(12)式的规范变换,就产生了不连续面. 然而,应用格林定理时,空间一定要连续. 为解决这些矛盾,要引入双螺位错模型. 这就是在 x 轴上离原点 L 处放入位移矢量与原来螺位错相反的另一个螺位错,如图3所示,这样,把不连续面控制在有限的 $\overline{OO'}$ 间.

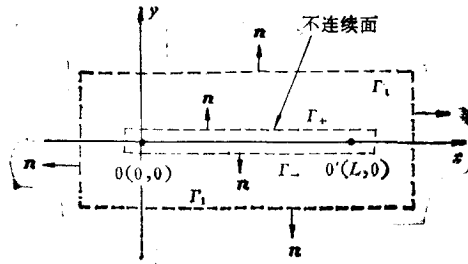


图3 包围不连续面的积分路程

因而积分路程是 Γ_1 和 Γ_{\pm} , 其中 Γ_1 的贡献等于从无穷远处入射的入射波 ϕ_{pb} . Γ_{\pm} 的贡献是根据波函数的连续条件:

$$\begin{aligned} \phi(x, 0_+) &= e^{i\sqrt{2}k_z} \phi(x, 0_-), \\ (-\mathbf{n} \cdot \hat{Q}\nabla - ik_z \mathbf{n} \hat{Q}^z - \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}) \phi(x, 0_+) \\ &= e^{i\sqrt{2}k_z} (-\mathbf{n} \cdot \hat{Q}\nabla - ik_z \mathbf{n} \hat{Q}^z - \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}) \\ &\quad \times \phi(x, 0_-) \quad \text{但 } \mathbf{n} = \langle 010 \rangle. \end{aligned} \quad (19)$$

(18)式变为

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= \phi_{pb}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} (e^{i\sqrt{2}k_z} - 1) \int_0^L dCG(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\mathbf{n} \hat{Q}(\nabla'^+ - \nabla') \\ &\quad - ik_z \mathbf{n} \hat{Q}^z - \mathbf{n} \hat{q}] |_{y=0} \phi(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (20)$$

然后将上式的积分上限 $L \rightarrow \infty$, 上式即变成由一个螺位错引起的散射方程,即

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= \phi_{pb}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} (e^{i\sqrt{2}k_z} - 1) \int_0^{\infty} dCG(\mathbf{r}, \mathbf{r}') [\mathbf{n} \hat{Q}(\nabla'^+ - \nabla') \\ &\quad - ik_z \mathbf{n} \hat{Q}^z - \mathbf{n} \hat{q}] |_{y=0} \phi(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (21)$$

式中 ϕ_{pb} 代表属于能带 b 中的动量为 \mathbf{p} 的入射粒子的波函数. (21)式称为基尔霍夫-惠更斯形式^[8]的散射方程.

五、Aharonov-Bohm 函数

求解由螺位错引起的散射波的问题归结为解上述基尔霍夫-惠更斯的积分方程的问题. 为求解(21)式,需要对波函数 $\phi(x, 0_-)$ 的形状做一个假定. 考虑与入射波 $e^{ip^i x}$ 成比例的项和与格林函数中出现的 $e^{ip^i x}/\sqrt{x}$ 成比例的项,对波函数及其微分做如下假定:

$$\phi(x, 0_-) = \sum_i \left[C_1^i e^{ip^i x'} + C_3^i e^{ip^i x'} \sqrt{\frac{p^i}{2\pi x'}} \right] \quad (22)$$

$$\widehat{DQ}\phi(x, 0_-) = \sum_i C_2^i e^{ip^i x'} \sqrt{\frac{p^i}{2\pi x'}} \quad (23)$$

式中

$$\widehat{DQ} = -n\hat{Q}\nabla - ik_z n\hat{Q}^z - n\hat{q}. \quad (24)$$

把(22)和(23)式代入(21)式,得

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_{pb} + \frac{1}{2} (e^{i\sqrt{2}k_z} - 1) \sum_i [C_1^i F_1^i(\mathbf{r}) - C_2^i F_2^i(\mathbf{r}) + C_3^i F_3^i(\mathbf{r})]. \quad (25)$$

式中 \sum_i 是对于不同能带 i 求和, (25)式中的 F_1^i, F_2^i, F_3^i 称为 AB 函数, 其表示式为

$$F_1^i(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dx' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (n\hat{Q}\nabla'^+ - ik_z n\hat{Q}^z - n\hat{q})|_{y'=0_-} e^{ip^i x'}, \quad (26)$$

$$F_2^i(\mathbf{r}) = -\int_0^\infty dx' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{y'=0_-} e^{ip^i x'} \sqrt{\frac{p^i}{2\pi x'}}, \quad (27)$$

$$F_3^i(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dx' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (n\hat{Q}\nabla'^+ - ik_z n\hat{Q}^z - n\hat{q})|_{y'=0_-} e^{ip^i x'} \sqrt{\frac{p^i}{2\pi x'}}. \quad (28)$$

上式中的格林函数表示为

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{\alpha_{\mu j} \alpha_{i \nu}}{E - E_j(\mathbf{k})}. \quad (29)$$

上式中 p^i 的定义如下: 当能带 b 中具有动量为 \mathbf{p} 的入射粒子的能量等于 E_{pb} 时, 在电子的群速度满足 $V_y^i(k_x, k_y) = 0, V_x^i(k_x, k_y) > 0$ 的条件下, 满足 $E_{pb} = E_i(k_x, k_y)$ 的 k_x 就是 p^i .

电子的群速度可用下列方法求出. 如上所述, α 属于本征函数系, 因此满足下列方程:

$$\begin{aligned} E_j(\mathbf{k})\alpha_{\mu j} &= T_{\mu\nu}^{(0)}\alpha_{\nu j} + \sum_i T_{\mu\nu}^{(1)}(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_i)\alpha_{\nu j} + \frac{1}{2} \sum_i T_{\mu\nu}^{(1)}(i)(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_i)^2\alpha_{\nu j} \\ &+ \sum_i T_{\mu\nu}^{(2)}(i)(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_i)\alpha_{\nu j} + \frac{1}{2} \sum_i T_{\mu\nu}^{(2)}(i)(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_i)^2\alpha_{\nu j}. \end{aligned} \quad (30)$$

利用上式, 群速度 $V_y^i(k_x, k_y)$ 是

$$V_y^i(k_x, k_y) = \alpha_{j\mu} (i\hat{q}_{\mu\nu}^y - \hat{Q}_{\mu\nu}^{yx} k_x - \hat{Q}_{\mu\nu}^{yy} k_y - \hat{Q}_{\mu\nu}^{yz} k_z) \alpha_{\nu j}. \quad (31)$$

式中 $\alpha_{j\mu} \hat{Q}_{\mu\nu}^{yx} \alpha_{\nu j}$ 是(11)式的哈密顿量中的质量的倒数, 即

$$\alpha_{j\mu} \hat{Q}_{\mu\nu}^{yx} \alpha_{\nu j} = -\frac{1}{m_{xy}^j}; \quad \alpha_{j\mu} \hat{Q}_{\mu\nu}^{yy} \alpha_{\nu j} = -\frac{1}{m_{yy}^j}; \quad \alpha_{j\mu} \hat{Q}_{\mu\nu}^{yz} \alpha_{\nu j} = -\frac{1}{m_{yz}^j}. \quad (32)$$

关于复杂能带的 AB 函数的计算结果如(33)–(40)式所示 (具体计算过程可参阅附录).

$$[F_1^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} = \text{signy} \cdot \delta_{\mu\rho} e^{ip^i x}. \quad (33)$$

$$[\widehat{DQF}_i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} \begin{cases} = 0 & (p^i \neq p^j), \\ = 2 \sum_{j=i} e^{i\chi_j} \hat{Q}_{\mu\nu}^{yy} [\alpha_{\mu_j} \alpha_{j\rho}] \bar{\theta}_0 \frac{\left(\frac{dg}{d\theta}\right)_{\bar{\theta}_0}}{|V_{y\pm}^j(p^i, p^j)|} \\ \quad \times \frac{p^i V_x^j(p^i, p^j) e^{ip^i x}}{\sqrt{2\pi |f'_j(\bar{\theta}_0)|}}. \end{cases} \quad (34)$$

$$[F_2^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} \begin{cases} = -\frac{1}{2} \text{sign}y \sum_{j \neq i} [ik_z \hat{Q}^{yz} + \hat{q}^y]_{\mu\nu}^{-1} [\alpha_{\mu_j} \alpha_{j\rho}] e^{ip^i x} \sqrt{\frac{p^i}{2\pi x}} + \frac{1}{2} e^{\frac{3}{2}\pi i} \\ \quad \times \sum_{j \neq i} e^{i\chi_j} [\alpha_{\mu_j} \alpha_{j\rho}]_{\theta_0} \frac{p^i \left(\frac{dg}{d\theta}\right)_{\theta_0}}{|V_{y\pm}^j(\theta_0)|} \sqrt{\frac{2}{1 - \left(\frac{p^i}{p^j}\right) g(\theta_0)}} \\ \quad \times \frac{e^{ip^i x}}{\sqrt{2\pi |f'_j(\theta_0)|}}, \end{cases} \quad (36)$$

$$= \frac{1}{2} e^{\frac{\pi}{4}i} \sum_{j=i} \alpha_{\mu_j} \sqrt{\frac{p^i}{\alpha_{j1} \hat{Q}_{lm}^{yy} \alpha_{m1} V_x^j(p^i, p^j)}} \alpha_{j\rho} e^{ip^i x}. \quad (37)$$

$$-[\widehat{DQF}_2^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} = [F_3^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} \begin{cases} = \frac{1}{2} \text{sign}y \sum_{j \neq i} [\alpha_{\mu_j} \alpha_{j\rho}] e^{ip^i x} \sqrt{\frac{p^i}{2\pi x}}, \\ = \frac{1}{2} \text{sign}y \sum_{j=i} e^{\frac{\pi}{4}i + i\chi_j} [\alpha_{\mu_j} \alpha_{j\rho}]_{\theta_0} p^i \left(\frac{dg}{d\theta}\right)_{\theta_0} \\ \quad \times \sqrt{\frac{2}{1 - g(\theta_0)}} \frac{e^{ip^i x}}{\sqrt{2\pi |f'_j(\theta_0)|}}. \end{cases} \quad (38)$$

$$[\widehat{DQF}_3^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} = 0. \quad (40)$$

在(33)–(40)式中各种符号的定义如下: 在 $V_x^i(k_x, k_y) > 0$, $V_y^i(k_x, k_y) = 0$ 的条件下, $k_x = p^i$ 满足 $E = E_i(k_x, k_y)$ 时, k_y 就是 p_y^i . 因为 p_y^i 是 $E = E_i(k_x, k_y)$ 的解, 因此若 $k_x \approx p^i$, p_y^i 存在两个 $p_{y\pm}^i$. 将 k_x 做为 θ 的函数, 进行下列变换:

$$k_x = p^i g(\theta), \quad p_{y\pm}^i(k_x) = p_{y\pm}^i(\theta). \quad (41)$$

设

$$f_j(\theta) = k_x x + p_{y\pm}^j y, \quad (42)$$

$f_j(\theta)$ 的最速下降点为 θ_0 . 从而得

$$f'_j(\theta_0) = \left(\frac{dk_x}{d\theta}\right)_{\theta_0}^2 \frac{1}{V_y^j(\theta_0)} \left[x \left(\frac{dV_{y\pm}^j}{dk_x}\right)_{\theta_0} - y \left(\frac{dV_x^j}{dk_x}\right)_{\theta_0} \right]. \quad (43)$$

在 $y = 0$ 的极限情况下, $g(\theta_0) = 1$, $\left(\frac{dg}{d\theta}\right)_{\theta_0} = 0$, χ_j 是 $f_j(\theta_0)$ 的最速下降方向. 若最速下降点和极点一致时, 设

$$\tilde{f}_j = k_x x + \frac{1}{2} [p_{y\pm}^j(k_x) + p_y^j(p^i)] y. \quad (44)$$

\tilde{f}_j 的最速下降点为 $\tilde{\theta}_0$, \tilde{f}_j 的最速下降方向为 $\tilde{\chi}_j$. 因而得

$$f'' = \left(\frac{dk_x}{d\theta} \right)_{\theta_0}^2 \frac{1}{V_y^i(\theta_0)} \left[x \left(\frac{dV_{y\pm}^i}{dk_x} \right)_{\theta_0} - \frac{y}{2} \left(\frac{dV_x^i}{dk_x} \right)_{\theta_0} \right]. \quad (45)$$

六、圆形等能线模型(确定系数 C_1^i, C_2^i, C_3^i)

在 Γ 附近把能带近似地假设为具有圆形等能线。因而在 Γ 附近电子的能谱近似地写成

$$E = \gamma_j(k_x^2 + k_y^2). \quad (46)$$

从而电子的群速度为

$$V_x^i = 2\gamma_j k_x; \quad V_y^i = 2\gamma_j k_y. \quad (47)$$

γ_j 可由(47)式和(31)式相比较,可根据下式确定:

$$V_x^i(k_x, k_y) = -\alpha_{i\mu} \hat{Q}_{\mu\nu}^{xx} \alpha_{\nu j} k_x = 2\gamma_j k_x, \quad (48)$$

$$V_y^i(k_x, k_y) = -\alpha_{i\mu} \hat{Q}_{\mu\nu}^{yy} \alpha_{\nu j} k_y = 2\gamma_j k_y. \quad (49)$$

根据圆形等能线模型,可做下列变换:

$$k_x = p^i \cos(\theta + \phi). \quad (50)$$

因此,考虑(41)式,可得

$$g(\theta) = \cos(\theta + \phi). \quad (51)$$

在(46)式中的 k_y 为

$$k_y = p_{y\pm}^i = \pm \sqrt{E/\gamma_j - k_x^2}. \quad (52)$$

从(47)和(50)式求出 $dk_x/d\theta$, dV_x^i/dk_x , $dV_{y\pm}^i/dk_x$, 将此结果代入(43)和(45)式,并考虑 $x = r \cos \phi$, $|y| = r \sin \phi$ 及 $r = \tilde{r} \cos \phi$, $|y|/2 = \tilde{r} \sin \phi$, 可得

$$f_i(\theta) = p^i r \cos \theta; \quad \tilde{f}_i(\theta) = p^i \tilde{r} \cos \theta. \quad (53)$$

上述 $f_i(\theta)$ 和 $\tilde{f}_i(\theta)$ 两者的最速下降点 θ_0 及 $\tilde{\theta}_0$ 和最速下降方向 χ_i 及 $\tilde{\chi}_i$ 互相一致,亦即

$$\theta_0 = \tilde{\theta}_0 = 0; \quad \chi_i = \tilde{\chi}_i = \frac{3}{4} \pi. \quad (54)$$

从而得

$$f_i'(\theta_0) = -p^i r; \quad \tilde{f}_i'(\theta_0) = -p^i \tilde{r}. \quad (55)$$

把上述结果代入(33)–(40)式中,就能得到圆形等能线模型时,复杂能带的 AB 函数的渐近式,其结果如下式所示:

$$[F_i]_{\mu\rho} = \text{sign } y \cdot \delta_{\mu\rho} e^{ipix}. \quad (56)$$

$$[\widehat{DQ}F_i]_{\mu\rho} \begin{cases} = 0 & (i \neq j), \\ = 4e^{\frac{3}{4}\pi i} \sum_{j=i} \gamma_j [\alpha_{\mu j} \alpha_{j\rho}] \tilde{\theta}_0 \sqrt{\frac{p^j}{2\pi x}} e^{ipix}. \end{cases} \quad (57)$$

$$[F_i^i]_{\mu\rho} \begin{cases} = \frac{i}{2} \sum_{j \neq i} \frac{[\alpha_{\mu j} \alpha_{j\rho}]_{\theta_0}}{2\gamma_j} \sqrt{\frac{2}{1 - (p^j/p^i)}} \sqrt{\frac{p^j}{2\pi x}} e^{ipix}, \\ = \frac{1}{2} e^{\frac{\pi}{4}i} \sum_{j=i} \frac{[\alpha_{\mu j} \alpha_{j\rho}]_{\theta_0}}{2\gamma_j} e^{ipix}. \end{cases} \quad (59)$$

$$(60)$$

$$[F_3^i]_{\mu\rho} = -[\widehat{DQ}F_2^i]_{\mu\rho} \begin{cases} = \frac{1}{2} \text{sign}y \sum_{j \neq i} [\alpha_{\mu j} \alpha_{j\rho}] \sqrt{\frac{p^j}{2\pi x}} e^{ip^j x}, & (61) \\ = \text{sign}y \sum_{j=i} [\alpha_{\mu j} \alpha_{j\rho}] \sqrt{\frac{p^j}{2\pi x}} e^{ip^j x}. & (62) \end{cases}$$

$$[\widehat{DQ}F_3^i]_{\mu\rho} = 0. \quad (63)$$

设入射粒子的波函数为

$$\phi_{pb} = \alpha C_0 \exp(ip^b x + ip^b_y y). \quad (64)$$

对上式进行

$$\widehat{DQ} = -\hat{Q}^{yx} \frac{\partial}{\partial x} - \hat{Q}^{yy} \frac{\partial}{\partial y} - \hat{Q}^{yz} i k_z + i \hat{q}^y \quad (65)$$

的演算,就得出

$$C_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

在价带的 Γ'_{25} 附近存在三个能带。计算(56)–(63)式中的求和 \sum_i 时,只对能带中具有那些与给定的电子能量 E 相同状态的能带进行。因而只考虑 Γ'_{25} 附近的三个能带即可。把(25)式改写成

$$\begin{aligned} \phi(x, 0_-) = & \phi_{pb}(x, 0_-) + \frac{1}{2} (e^{i\sqrt{2}k_z} - 1) \sum_i [C_1^i F_1^i(x, 0_-) \\ & - C_2^i F_2^i(x, 0_-) + C_3^i F_3^i(x, 0_-)]. \end{aligned} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} \widehat{DQ}\phi(x, 0_-) = & \frac{1}{2} (e^{i\sqrt{2}k_z} - 1) \sum_i [C_1^i \widehat{DQ}F_1^i(x, 0_-) \\ & - C_2^i \widehat{DQ}F_2^i(x, 0_-) + C_3^i \widehat{DQ}F_3^i(x, 0_-)]. \end{aligned} \quad (67)$$

将(22)与(66)式,(23)和(67)式相比较可以得出关于 C_1^i, C_2^i, C_3^i ($i = 1, 2, 3$)的联立方程组。解该联立方程组可以确定 9 个系数 C_1^i, C_2^i, C_3^i 。其结果如表 1 和(68)式所示。

表 1 C_1^i, C_2^i, C_3^i 的值

能带 i	1	2	3
$[C_1^i]_{\mu}$	$[C_1^i]_{\mu}$	0	0
$[C_2^i]_{\mu}$	$[C_2^i]_{\mu}$	0	0
$[C_3^i]_{\mu}$	0	0	0
	↑ 入射能带		

$$\alpha_{1\rho} [C_1^i]_{\rho} = e^{-\frac{\sqrt{2}}{2} i k_z} \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_z\right),$$

$$\alpha_{1\rho} [C_2^i]_\rho = 4\gamma_1 e^{(-\frac{3}{4}\pi i - \frac{\sqrt{2}}{2} i k_x)} \sin\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_x\right),$$

$$[C_3^i]_\rho = 0. \quad (68)$$

从表 1 可知, 入射粒子在 x 轴上不能以跃迁到另外能带来消除螺位错下游侧产生的影子. 把上述结果代入(22),(23)和(25)式, 并考虑用粒子入射能带的标号 b 代替 c 和 F 的右上角标, 就得

$$\phi(x, 0_-) = C_1^b e^{i p^b x}, \quad (69)$$

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_{pb} + \frac{1}{2} (e^{i\sqrt{2}k_x} - 1) [C_1^b F_1^b(\mathbf{r}) + C_2^b F_2^b(\mathbf{r}) + C_3^b F_3^b(\mathbf{r})], \quad (70)$$

$$\widehat{DQ}\phi(x, 0_-) = C_2^b e^{i p^b x} \sqrt{\frac{p^b}{2\pi x}}. \quad (71)$$

若 $\alpha_{1\rho} = 1$ 时, 上述系数 C_1, C_2, C_3 的结果同能带具有圆形等能线时的结果完全相同.

七、结果与讨论

为了讨论复杂能带的散射问题, 考虑了硅 $\langle 110 \rangle$ 螺位错引起的电子散射. 其结果系数 C_1^i, C_2^i, C_3^i 中除两个以外都是零. 设入射粒子的能带为 b , 由(68)式可得

$$C_1^b = e^{-\frac{\sqrt{2}}{2} i k_x} \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_x\right) \alpha C_0,$$

$$C_2^b = 4\gamma_1 \exp\left(-\frac{3}{4}\pi i - \frac{\sqrt{2}}{2} i k_x\right) \sin\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_x\right) \alpha C_0. \quad (72)$$

能带为圆形等能线时满足下列关系:

$$\widehat{DQ} = -\hat{Q}^{yy} \frac{\partial}{\partial y} = 2\gamma_b \frac{\partial}{\partial y}. \quad (73)$$

因此, 在 x 轴上波函数及其在 y 方向的微商是

$$\phi(x, 0_-) = e^{-\frac{\sqrt{2}}{2} i k_x} \cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_x\right) e^{i p^b x} \alpha C_0, \quad (74)$$

$$\frac{\partial \phi(x, 0_-)}{\partial y} = 2 \exp\left(-\frac{3}{4}\pi i - \frac{\sqrt{2}}{2} i k_x\right) \sin\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_x\right) e^{i p^b x} \sqrt{\frac{p^b}{2\pi x}} \alpha C_0. \quad (75)$$

这些散射解的特征就表现为位错下游侧电子波的影子的存在. 也就是说, 由(74)式可知, 在 x 轴上波函数的振幅小于 1 的事实. 尤其是 $k_x \sqrt{2} = \pi$ 时, 其值为零. 散射波只具有入射粒子的项 b , 因此, 在 x 轴上不因散射而引起能带之间跃迁, 因而产生完整的影子. 根据(70)式可以写出稍微偏离 x 轴的领域内散射波的表示式为

$$\phi(\mathbf{r}) = \alpha C_0 \left\{ e^{i p^b x} + i \sin\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_x\right) \left[\cos\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_x\right) F_1(\mathbf{r}) \right. \right. \\ \left. \left. - 2e^{-\frac{3}{4}\pi i} \sin\left(\frac{\sqrt{2}}{2} k_x\right) F_2(\mathbf{r}) \right] \right\}. \quad (76)$$

从(33)–(40)式可知, AB 函数中除了与入射粒子波函数有关的项 $\exp(ip^i x)$ 以外, 还存在着在其他能带中做为散射波按 $x^{-\frac{1}{2}}$ 规律衰减的项. 由此可知, 电子因散射而产生能带之间跃迁. 这就是说, 属于 b 能带的入射电子, 在其入射方向上的位错下游侧产生电子波的影子. 不仅如此, 还因能带之间跃迁而在其他能带也产生散射波. 因螺位错而出现入射粒子的影子是完整的, 不能由于跃迁到其他能带的散射而消除入射粒子的影子. 由此可得出结论说, 不仅在单一能带的情况下位错的下游侧产生电子波播及不到的影子, 而且在具有能带之间跃迁的复杂能带结构的硅晶体的情况下也在位错的下游侧产生影子.

附 录

具有复杂能带结构晶体在 x 轴附近 AB 函数的渐近式

把(29)式代入(26)–(28)式, 并将关于 x' 的下列积分

$$\int_0^{\infty} dx' \exp(ip^i x' - ik_x x') = \frac{1}{i(p^i - k_x + i\delta)}, \quad (\text{A.1})$$

$$\int_0^{\infty} dx' \exp(ip^i x' - k_x x') \sqrt{\frac{p^i}{2\pi x'}} = \sqrt{\frac{p^i}{2(p^i - k_x)}} e^{\frac{\pi}{4}i} \quad (\text{A.2})$$

应用到(26)–(28)式, 可得

$$[F_1^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} = - \sum_j \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{\alpha_{\mu j} \alpha_{j\rho}}{E - E_j(\mathbf{k})} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{p^i - k_x + i\delta}, \quad (\text{A.3})$$

$$[F_2^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} = - \frac{1}{2} e^{\frac{\pi}{4}i} \sum_j \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{\alpha_{\mu j} \alpha_{j\rho}}{E - E_j(\mathbf{k})} \sqrt{\frac{2p^i}{p^i - k_x}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (\text{A.4})$$

$$[F_3^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} = \frac{1}{2} e^{\frac{3}{4}\pi i} \sum_j \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{\alpha_{\mu j} V_j^i \alpha_{j\rho}}{E - E_j(\mathbf{k})} \sqrt{\frac{2p^i}{p^i - k_x}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (\text{A.5})$$

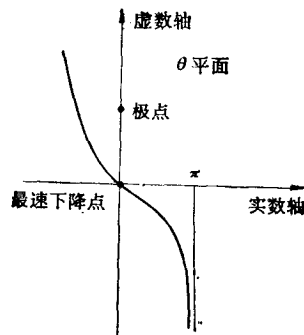
将上式对 k_x 进行积分, 得

$$[F_1^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} = i \text{sign} y \sum_j \int \frac{dk_x}{2\pi} \alpha_{\mu j} \alpha_{j\rho} \frac{\exp(ik_x x + ip_j^i y)}{p^i - k_x + i\delta}, \quad (\text{A.6})$$

$$[F_2^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} = \frac{1}{2} e^{\frac{3}{4}\pi i} \sum_j \int \frac{dk_x}{2\pi} \frac{\alpha_{\mu j} \alpha_{j\rho}}{|V_j^i|} \sqrt{\frac{2p^i}{p^i - k_x}} \exp(ik_x x + ip_j^i y), \quad (\text{A.7})$$

$$[F_3^i(\mathbf{r})]_{\mu\rho} = \frac{1}{2} \text{sign} y e^{\frac{\pi}{4}i} \sum_j \int \frac{dk_x}{2\pi} \alpha_{\mu j} \alpha_{j\rho} \sqrt{\frac{2p^i}{p^i - k_x}} \exp(ik_x x + ip_j^i y). \quad (\text{A.8})$$

上式中 p_j^i 是 $E - E_j(k_x, k_y) = 0$ 的解 k_y . (A.6)–(A.8) 式对 k_x 的积分要用最速下降法 (method of steepest descent) 进行计算. 然而, 对 k_x 的积分不仅要考虑最速下降点的贡献, 而且还要考虑 $k_x = p^i$ 的极点的贡献, 又要考虑分枝点的贡献. 应用最速下降法时要利用(33)–(40)式的变换. 极点的位置在 θ 平面上随着 p^i/p^i 比



附图 1 $y = 0$ 附近

值的变化,实数轴上从0到 π ,虚轴上从0到 ∞ 移动,尤其是 $p^i = p^j$ 时,极点同最速下降点重合。

先计算 F_i , $i \neq j$ 时,因为最速下降点和极点分离(如附图1所示),因此对最速下降点和极点可以分开计算。设 $f_i(\theta) = k_x x + p_y^\pm y$,最速下降点是 $f'_i(\theta_0) = 0$,此时最速下降方向定为 χ_i 。当 $i \neq j$ 时,把(A.6)式对 k_x 积分,得

$$[F_i]_{\mu\rho} = \text{signy} \sum_{i \neq j} [\alpha_{\mu i} \alpha_{j\rho}]_{(p^i)} \exp(ip^i x + ip^j y) + i \text{signy} \sum_{i \neq j} e^{ix_j} \\ \times [\alpha_{\mu i} \alpha_{j\rho}]_{\theta_0} \frac{(dg/d\theta)_{\theta_0}}{(p^i/p^j) - g(\theta_0)} \frac{\exp(ip^i g(\theta_0)x + ip^j y)}{\sqrt{2\pi |f'_i(\theta_0)|}}. \quad (\text{A.9})$$

式中 $\lim_{y \rightarrow 0} g(\theta_0) = 1$, $\lim_{y \rightarrow 0} \left(\frac{dg}{d\theta}\right)_{\theta_0} = 0$, $i = j$ 的情况下,最速下降点和极点相一致。这时采取加上和减去极值的方法排除奇异点。用 $\tilde{f}_i(\theta) = k_x x + \frac{i}{2}(p_y^\pm(k_x) - p_y^\pm)y$ 的变换,从(A.6)式可得

$$[F_i]_{\mu\rho} = \text{signy} \sum_{i \neq j} [\alpha_{\mu i} \alpha_{j\rho}]_{(p^i)} \exp(ip^i x + ip^j y) - 2 \text{signy} \sum_{i \neq j} e^{ix_j} \\ \times [\alpha_{\mu i} \alpha_{j\rho}]_{\tilde{\theta}_0} \frac{(dg/d\theta)_{\tilde{\theta}_0}}{1 - g(\tilde{\theta}_0)} \sin \left[\frac{p_y^\pm(\theta_0) - p_y^\pm}{2} y \right] \\ \times \frac{\exp \left[ip^i g(\theta_0)x + \frac{i}{2}(p_y^\pm(\theta_0) - p_y^\pm)y \right]}{[2\pi |f''(\theta_0)|]^{1/2}}. \quad (\text{A.10})$$

当 $y \rightarrow 0$ 时,将(A.9)和(A.10)两式可归纳成一个公式,

$$[F_i]_{\mu\rho} = \text{signy} \cdot \delta_{\mu\rho} e^{ip^i x}. \quad (\text{A.11})$$

其次计算 $\widehat{DQ}F_i$,利用(65)式,可得

$$(\widehat{DQ})_{\mu\nu} \exp(ik_x x + ip_y^\pm y) = i \alpha_{\mu i} V_y^\pm(k_x) \alpha_{i\nu}. \quad (\text{A.12})$$

将算符(65)式作用于 $[f'_i(\theta_0)]^{-1/2}$ 或 $[\tilde{f}'_i(\theta_0)]^{-1/2}$,就出现比 $x^{-1/2}$ 更迅速趋近于零的项,因此将其演算结果看成零。把(65)式演算于(A.9)和(A.10)式的第一项就出现 $V_y^\pm(p^i)$ 的项,它在 $y=0$ 时变成零。因而在(A.9), (A.10)两式中只剩下 $i=j$ 的项,因此当 $y=0$ 时得

$$[\widehat{DQ}F_i]_{\mu\rho} \begin{cases} = 0 & (i \neq j) \\ = 2 \sum_{j=i} e^{ix_j} \hat{Q}_{\mu\nu} [\alpha_{\mu i} \alpha_{i\rho}]_{\tilde{\theta}_0} \frac{p^i \left(\frac{dg}{d\theta}\right)_{\tilde{\theta}_0} V_y^\pm(p^i, p_y^\pm)}{|V_y^\pm(p^i, p_y^\pm)|} \frac{p^i p^i x}{[2\pi |f''(\tilde{\theta}_0)|]^{1/2}}. \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

对于 F_i , F_j 的计算大体上与 F_i 的计算方法相似,在此不详述。

参 考 文 献

- [1] K. Kawamura, *Z. Physik B* **29** (1978), 101.
- [2] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.*, **115** (1959), 485.
- [3] G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev.*, **160** (1967), 649.
- [4] J. C. Slater and G. F. Koster, *Phys. Rev.*, **94** (1954), 1498.
- [5] K. Kawamura, *Z. Physik B* **30** (1978), 1.
- [6] 川村 清,日本物理学会志, **34**(1979), 961.
- [7] H. J. Huang and K. Kawamura, *Solid State Comm.*, **41** (1982), 939.
- [8] 石黑浩三,光学(共立出版,1953),第二章,§2.

SCATTERING OF ELECTRONS BY SCREW DISLOCATIONS IN SILICON CRYSTALS

HUANG HENG-JI

(Department of Physics, Yanbian University)

YASUNARI ZEMPO

(Department of Materials Science, Hiroshima University, Japan)

ABSTRACT

In this paper, the scattering of electrons by $\langle 110 \rangle$ -screw dislocations in silicon crystals is discussed. We use the tight-binding approximation, only electrons in the s and p state are taken into account. With the long wave length approximation, only scattering of electrons near Γ in the first BZ is considered. A scattering theoretical approach yields an integral equation of Kirchhoff-Huygens type. The scattering equation has been solved by means of gauge transformation and Green's function. It is confirmed that, as in the case of single band in the case of many bands the shadow, which is the region that can not be affected by electron flux, appears in the down stream side of dislocations as well.