Известия НАН Армении, Физика, т.44, № 1, с.35-43 (2009)

УДК 517.957

ДИНАМИКА ДИСЛОКАЦИОННОГО КИНКА В ПОТЕНЦИАЛЕ ЦЕНТРА ПИННИНГА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ВНЕШНИХ СИЛ

А.С. ВАРДАНЯН

Институт радиофизики и электроники НАН Армении, Аштарак

(Поступила в редакцию 2 июня 2008 г.)

Для изучения воздействия точечных дефектов на движение дислокаций по механизму Пайерлса исследована динамика дислокационного перегиба в потенциале пиннинга при воздействии внешних постоянной и переменной сил. В рамках теории возмущений линеаризация уравнений движения кинка позволяет получить уравнение линейных колебаний для скорости кинка.

1. Введение

В ковалентных полупроводниках движение дислокаций контролируется механизмом Пайерлса, что подразумевает образование и миграцию пар кинк-антикинк. Дислокационный перегиб (кинк) образуется, когда различные участки дислокации находятся в соседних долинах периодического рельефа решетки (потенциала Пайерлса). Кинки и антикинки на дислокации описываются уравнением син-Гордон (СГ) солитона. Движение дислокации по механизму Пайерлса принято делить на три этапа [1,2]: образование двойных перегибов, миграция кинка и антикинка в противоположные стороны и аннигиляция движущихся навстречу друг другу кинков различных знаков.

Известно, что различные точечные дефекты (атомы примесей, вакансии) могут препятствовать движению кинка вдоль дислокации, т.е. служить центрами пиннинга кинка. В отсутствие внешних или внутренних напряжений дислокационный перегиб удерживается в потенциале центра пиннинга, а при воздействии постоянной силы может открепляться с определенной вероятностью. Для теоретического определения вероятности открепления кинка от центра пиннинга необходимо исследовать его стохастическую динамику. Однако, так как кинк представляет собой нелинейный объект, т.е. его движение описывается нелинейным уравнением, исследование флуктуационного преодоления кинком потенциала пиннинга представляет собой довольно трудноreализуемую проблему. Простой подход к решению этой проблемы применен в работе [3], где динамика кинка описана уравнением линейного гармонического осциллятора, которому приписана масса кинка. Такое упрощение позволяет в основном описать процесс, однако для дальнейшего развития теории, которое позволит полностью учесть зависимость вероятности открепления от параметров кинка, необходимо правильно линеаризовать уравнения движения кинка. Получение линейных уравнений колебания кинка в потенциале центра пиннинга под воздействием внешних переменной и постоянной сил является целью данной работы.

Линеаризация уравнения движения кинка возможна при помощи своеобразной теории возмущений, развитой в работе Маклафлина и Скотта [4]. Эта теория, хотя и основанная на некоторых допущениях и предположениях, на сегодняшний день представляет, по сути единственный надежный подход к исследованию влияния внешних воздействий на кинк, который применялся в ряде работ (см., например, работу [5] и ссылки в ней). В данной работе будет применена модификация этой теории возмущений, развитая в работе [6]. Этот метод позволяет при линеаризации уравнений движения кинка избежать сложных вычислений, использованных авторами работы [4].

2. Динамика кинка под влиянием переменной силы

Рассмотрим плавный кинк на дислокации, направленной вдоль оси x, т.е. кинк, ширина w которого много больше высоты a. Высота кинка a, которая порядка межатомных расстояний, представляет собой период рельефа Пайерлса (рис.1). Кинк описывается поперечным смещением дислокации φ, равным нулю при $x \to -\infty$ и равным a при $x \to \infty$; ширина кинка соответствует области, в которой $0 < \varphi < a$ (для антикинка, наоборот, φ убывает от a до нуля). Критерием, определяющим плавность перегиба, является малость параметра τ_P / G, где τ_P – напряжение Пайерлса и G–модуль сдвига. Ширина перегиба связана с его высотой соотношением

$$w = a\left(\frac{\pi/2}{\tau_P/G}\right)^{1/2}, \qquad (1)$$

и, следовательно, при $\tau_P / G << 1$ имеем $w >> a$, т.е. перегиб является плавным. В этом случае для описания кинка применима модель струны. Предположим, что кинк находится вблизи точки пиннинга; следуя работам [4,6], взаимодействие кинка с центром пиннинга будем описывать потенциалом

$$U = -\frac{a}{2\pi}\mu\delta(x-\varepsilon)\left(1-\cos\frac{2\pi\varphi}{a}\right), \qquad (2)$$

где параметр μ характеризует силу взаимодействия, а ε указывает положение точки пиннинга на дислокации. Множитель $1-\cos(2\pi\varphi/a)$ в (2) обеспечивает обращение в нуль потенциала пиннинга U вне области кинка.

Как указывалось во введении, нас интересует динамика кинка под действием постоянной и переменной сил. Необходимость учета постоянной силы очевидна – дислокация может двигаться, только если существует напряжение решетки. Учет же переменной силы представляет интерес в основном в связи с рекомбинационно-стимулированным движением дислокаций, суть которого состоит в следующем. В полупроводниках дислокационный перегиб может создавать электронные уровни в запрещенной зоне и способствовать тепловому захвату и рекомбинации носителей заряда [7]. При такой рекомбинации на дислокации выделяется энергия, которая возбуждает дополнительные колебания решетки. Эти колебания, локализованные вблизи дислокационного перегиба, могут стимулировать движение дислокации. Считается, что при движении по механизму Пайерлса рекомбинация в основном способствует миграции кинка вдоль дислокации [2,8]. Рекомбинационно-стимулированное движение дислокаций приводит, в частности, к деградации полупроводниковых устройств. Колебания решетки, которые происходят вследствие рекомбинации, и исполняют роль указанной переменной силы.

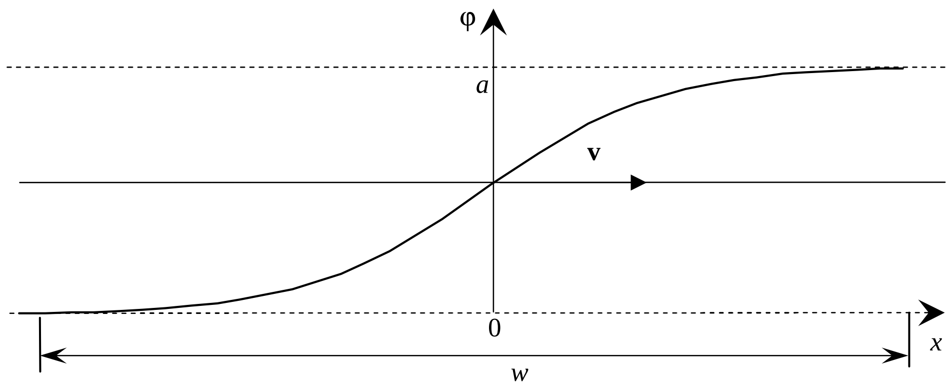

Рис.1. Схематическое изображение плавного кинка. Пунктирными линиями обозначены долины рельефа Пайерлса; **v** есть скорость движения кинка.

Постоянная сила Γ, обусловленная внутренними или внешними напряжениями решетки, стремится удалить кинк от центра пиннинга. Переменную силу $\gamma(t)$, описывающую колебания решетки, возникшие в процессе рекомбинации, будем считать синусоидальной во времени и изотропной в пространстве. Полагая, что энергия внешних воздействий, а также диссипация за счет трения, малы по сравнению с потенциалом Пайерлса, рассмотрим влияние внешних сил как возмущение по отношению к идеальной системе. Напишем возмущенное уравнение колебаний струны при наличии диссипации в периодическом потенциале Пайерлса, который имеет следующий вид [9]:

$$V_P = \frac{a^2 \tau_P}{2\pi} \sin^2\left(\frac{\pi\varphi}{a}\right), \tag{3}$$

т.е. возмущенное уравнение СГ [4]

$$m\varphi_{tt} - \chi\varphi_{xx} = -\frac{\pi a \chi}{2w^2} \sin\frac{2\pi\varphi}{a} + f, \tag{4}$$

где m – масса струны (дислокации) на единицу длины, χ – линейное натяжение единицы длины дислокации. Сила f представляет собой общий параметр возмущения:

$$f = -\eta\varphi_t - \Gamma - \gamma(t) + \mu\delta(x-\varepsilon)\sin\frac{2\pi\varphi}{a}, \tag{5}$$

где η характеризует дислокационное затухание на единицу длины ($\eta > 0$). В (4) учтено, что $\chi \cong Gb^2/2$ [9], где b – модуль вектора Бюргерса (который порядка a), s – скорость звука в твердом теле, а отношение τ_P/G определяется выражением (1).

Если $f = 0$, т.е. система не возмущена, решение уравнения (4) имеет следующий вид [4]: $\varphi = 2a\arctan\left[\exp\left(\pm\pi g(\mathrm{v})(x - x_0 - \mathrm{v}t)/w\right)\right]/\pi$, где x_0 – начальная координата кинка, v – скорость его перемещения вдоль дис

локации ($\mathrm{v} < s$) и $g(\mathrm{v}) = 1\Big/\sqrt{1-(\mathrm{v}/s)^2}$. Здесь знак “плюс” соответствует кинку, а “минус” - антикинку. Такое решение соответствует трансляционной инвариантности кинка вдоль дислокации. Энергия невозмущенной СГ системы дается следующим гамильтонианом [4,6]:

$$H^{СГ} = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{w\tau_P}{2s^2}\dot{\varphi}^2 + \frac{w\tau_P}{2}\varphi_x^2 + \frac{\pi}{w}V_P\right)dx. \tag{6}$$

Подставив решение невозмущенного уравнения СГ в (6) и интегрируя по *x*, получим гамильтониан невозмущенной системы

$$H^{СГ} = \frac{2a^2\chi}{w^2}\left(1-(\mathrm{v}/s)^2\right)^{-1/2}. \tag{7}$$

Если $f << a\tau_P/2$, т.е. все сторонние силы малы по сравнению с амплитудой потенциала Пайерлса, для решения уравнения (4) можно использовать метод возмущения, развитый в работах [4,6]. Полагаем, что решение уравнения (4) имеет вид решения невозмущенного уравнения СГ, однако действие возмущения приводит к модуляции скорости, т.е. здесь v уже является функцией от времени t:

$$\varphi = \frac{2a}{\pi}\arctan\left[\exp\left(\pm\frac{\pi}{w}\left(g(\mathrm{v})x - X(t)\right)\right)\right], \tag{8}$$

где $X(t) = \int_0^t g(\mathrm{v}(t'))\mathrm{v}(t')dt'$ указывает местонахождение центра кинка (в пред

положении, что $x_0 = 0$). В отсутствие членов, описывающих диссипацию и пе

переменную силу в выражении (5), гамильтониан возмущенной системы мож

можно написать в виде

$$H(\varphi) = H^{СГ} + H^{В}, \tag{9}$$

где

$$H^{B} = \frac{\pi}{w}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\Gamma\varphi - \frac{a}{2\pi}\mu\delta(x-\varepsilon)\left(1-\cos\frac{2\pi\varphi}{a}\right)\right)dx \tag{10}$$

описывает энергию стационарного возмущения. В этом случае $H(\varphi)$ постоянна во времени: $dH/dt = 0$. При наличии же нестационарных сил (т.е. силы трения и переменной внешней силы), уравнения движения определяются из условия [10]

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{\pi}{w}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\eta\dot{\varphi}^2 + \gamma(t)\dot{\varphi}\right)dx. \tag{11}$$

Подставляя (9) в (11), получим уравнение для импульса СГ системы

$$\frac{dH^{СГ}}{d\mathrm{v}}\dot{\mathrm{v}} = \frac{\pi}{w}\int_{-\infty}^{\infty} f(\varphi)\dot{\varphi}\,dx, \tag{12}$$

где $\varphi = \varphi\left(g(\mathrm{v})x, X\right)$ есть решение возмущенного уравнения СГ (4), а производная φ по времени равна $\dot{\varphi} \cong \varphi_X g(\mathrm{v})\mathrm{v}$ [6]. Уравнение (12), вместе с уравнением для производной по времени от переменной X

$$\dot{X} = g(\mathrm{v})\mathrm{v} \tag{13}$$

описывает движение кинка. Гамильтониан $H^{СГ}$ в (12) имеет тот же вид, что и гамильтониан невозмущенной системы СГ (6), при этом смещение струны φ определяется выражением (8). Подставляя (8) в (6), после интегрирования получаем выражение для энергии солитона, аналогичное выражению (7):

$$H^{СГ}\left[\phi\left(g(\mathrm{v}(t))x, X(t), \mathrm{v}(t)\right)\right] \cong \frac{2a^2\chi}{w^2}\left(1-\left(\mathrm{v}(t)/s\right)^2\right)^{-1/2}. \tag{14}$$

Предположим теперь, что координата точки пиннинга $\varepsilon = 0$. Подставляя выражения (14) и (5) в (12), после интегрирования получим дифференциальные уравнения с переменными $\mathrm{v}(t)$ и $X(t)$:

$$\begin{cases} M\dfrac{d\mathrm{v}}{dt} = \pm\left[\Gamma+\gamma(t)\right]\left(g(\mathrm{v})\right)^{-3} - \dfrac{2a\eta}{\pi w}\mathrm{v}\left(g(\mathrm{v})\right)^{-2} - \dfrac{2\mu}{w}\left(g(\mathrm{v})\right)^{-2}\mathrm{sech}^2\left(\dfrac{\pi X}{w}\right)\tanh\left(\dfrac{\pi X}{w}\right), \\ \dfrac{dX}{dt} = g(\mathrm{v})\mathrm{v}, \end{cases} \tag{15}$$

где учтено, что $\chi = ms^2$ и $M = 2am/\pi w$ есть эффективная масса кинка. Система уравнений (15) определяет динамику изолированного кинка (т.е. не взаимодействующего с другими кинками), обусловленную общим возмущением *f*.

Исследуем движение кинка в окрестности точки пиннинга. Уравнения
ния (15) обычно анализируются в фазовой плоскости (v, X). Сингулярная точка, где $\dot{\mathrm{v}} = 0$ и $\dot{X} = 0$, в присутствии внешней постоянной силы соответствует

состоянию равновесия кинка [4]. Однако, когда действует также внешняя периодическая сила, определим положение равновесия, учитывая только постоянную силу, в то время как переменная сила приводит к дополнительному смещению от положения равновесия. Иначе говоря, положение равновесия определяется как координата кинка, усредненная на промежутках времени, больших периода переменной силы. Как следует из уравнения (15), положению равновесия соответствуют условия $\mathrm{v}=0$ и $X=X_0$, где X_0 является корнем уравнения

$$\frac{w\Gamma}{2\mu}-\mathrm{sech}^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right)\tanh\left(\frac{\pi X_0}{w}\right)=0. \qquad (16)$$

Для аналитического рассмотрения колебания кинка вокруг точки X_0 линеаризируем уравнения (15) по v, считая, что движение кинка нерелятивистское ($\mathrm{v} << s$), а также по $X - X_0$, полагая, что смещение меньше ширины перегиба ($X - X_0 << w$). В отсутствие внешней переменной силы (т.е. при $\gamma(t)=0$), кинк совершает затухающие колебания вокруг точки пиннинга, где он окончательно приходит в состояние покоя [4]. Если же на кинк действует еще и периодическая сила $\gamma(t)= f_0 \sin\Omega t$, где f_0 – амплитуда внешней периодической силы, а Ω – его частота, то получим

$$\begin{cases} M\dfrac{d\mathrm{v}}{dt}=\pm\left[\Gamma+f_0\sin\Omega t\right]-\dfrac{2a\eta}{\pi w}\mathrm{v}-\dfrac{2\mu}{w}\mathrm{sech}^2\left(\dfrac{\pi X}{w}\right)\tanh\left(\dfrac{\pi X}{w}\right), & (17а)\\ \dfrac{dX}{dt}=\mathrm{v}. & (17б) \end{cases}$$

Дифференцируя $(17\,\mathrm{а})$ по t и используя затем $(17\,\mathrm{б})$, получим

$$M\frac{d^2\mathrm{v}}{dt^2}=\pm f_0\Omega\cos\Omega t-\frac{2a\eta}{\pi w}\frac{d\mathrm{v}}{dt}-\frac{2\pi\mu}{w^2}\mathrm{v}\left[\mathrm{sech}^4\left(\frac{\pi X_0}{w}\right)-2\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right)\tanh^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right)\right]. \qquad (18)$$

Введем следующие обозначения: $\lambda = a\eta/\pi w M$ (λ представляет эффективный коэффициент трения кинка) и

$$\omega_0^2=\frac{2\pi\mu}{w^2M}\left[\mathrm{sech}^4\left(\frac{\pi X_0}{w}\right)-2\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right)\tanh^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right)\right]. \qquad (19)$$

Уравнение (18), которое характеризует динамику кинка в потенциале центра пиннинга, принимает вид

$$\ddot{\mathrm{v}}+2\lambda\dot{\mathrm{v}}+\omega_0^2\mathrm{v}=\pm\frac{f_0\Omega}{M}\cos\Omega t. \qquad (20)$$

Уравнение (20) представляет собой уравнение линейных колебаний для скорости кинка v, где ω_0 играет роль частоты свободных колебаний. Отметим, что в правой части уравнения (20) есть только переменная сила, а постоянная сила определяет лишь положение равновесия и входит неявным образом в выражение для ω_0.

Как следует из уравнения (16), при $\Gamma=0$ положение равновесия $X_0=0$, и из (19) получаем $\omega_0^2 = 2\pi\mu/w^2M$. С ростом постоянной силы ω_0^2 уменьшается; условию $\omega_0^2=0$ соответствует критическое значения силы $\Gamma_c = 4\mu/3\sqrt{3}\,w$, которое определяется из уравнений (16) и (19). Иначе говоря, при значениях Γ больше Γ_c уравнение (16) не имеет корней, т.е. при $\Gamma > \Gamma_c$ дислокационный перегиб преодолевает потенциал пиннинга и может рассматриваться как свободный перегиб.

Как известно, решение уравнения (20) при $\omega_0 > \lambda$ имеет вид

$$\mathrm{v} = Ae^{-\lambda t}\cos(\omega t + \alpha) + B\cos(\Omega t + \delta)\,, \tag{21}$$

где $\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \lambda^2}$, A и $\alpha -$ вещественные постоянные, $B -$ амплитуда колебания кинка $\left(B = f_0\Omega \Big/ M\sqrt{\left(\omega_0^2 - \Omega^2\right) + 4\lambda^2\Omega^2}\right)$ и δ – его начальная фаза $\left(\operatorname{tg}\delta = 2\lambda\Omega \Big/ \left(\Omega^2 - \omega_0^2\right)\right)$. В выражении (21) первый член экспоненциально убывает со временем, так что через достаточно большой промежуток времени остается только второй член, описывающий вынужденные колебания: $\mathrm{v} = B\cos(\Omega t + \delta)$; частота $\Omega = \sqrt{\omega_0^2 - 2\lambda^2}$ представляет собой резонансную частоту.

3. Динамика кинка в потенциале колеблющейся примеси

С точки зрения рекомбинационно-стимулированных процессов, рассмотренное выше воздействие переменной силы на дислокационный кинк соответствует случаю, когда имеет место захват носителя на кинк. Однако, возможен также случай, когда происходит захват на примесь, которая одновременно является центром пиннинга, что приводит к колебанию этой примеси [11]. Для описания такого процесса учтем в формуле (5), что координата центра пиннинга ε становится функцией от времени, и общее возмущение имеет вид

$$f = -\eta\varphi_t - \Gamma + \mu\delta\left(x - \varepsilon(t)\right)\sin\frac{2\pi\varphi}{a}\,.$$

Подставив f в уравнение (4), учитывая, что $\varepsilon(t) << w$, и проделав вычисления, аналогичные вышеприведенным, получим для этого случая уравнения, которые равнозначны системе уравнений (17):

$$\begin{cases} M\dfrac{d\mathrm{v}}{dt} = \pm\Gamma - \dfrac{2a\eta}{\pi w}\mathrm{v} - \dfrac{2\mu}{w}\operatorname{sech}^2\left(\dfrac{\pi}{w}\left(X - \varepsilon(t)\right)\right)\tanh\left(\dfrac{\pi}{w}\left(X - \varepsilon(t)\right)\right), & (22\text{а}) \\ \dfrac{dX}{dt} = \mathrm{v}. & (22\text{б}) \end{cases}$$

Если $\varepsilon(t)$ описывается периодической функцией: $\varepsilon(t) = c\sin\Omega t$, то дифференцируя (22а) по t и подставляя в него (22б), получим уравнение движения кинка

$$\ddot{\mathrm{v}} + 2\lambda\dot{\mathrm{v}} + \omega_0^2\mathrm{v} = F\,, \tag{23}$$

где

$$F = \frac{2\pi\mu}{w^2 M} c\Omega \left[\mathrm{sech}^4\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) - 2\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right)\tanh^2\left(\frac{\pi X_0}{w}\right) \right] \cos\Omega t \,. \qquad (24)$$

Таким образом, колебание точки пиннинга может быть описано при помощи силы F (24), которая играет ту же роль, что и действующая на кинк внешняя периодическая сила.

4. Заключение

Линеаризуя систему нелинейных уравнений, которые характеризуют динамику дислокационного кинка в потенциале центра пиннинга при воздействии внешних сил, мы показали, что скорость кинка можно описать уравнением линейных колебаний (20). В дальнейшем этот результат может быть использован для описания флуктуационного открепления кинка от центра пиннинга. Это уравнение справедливо также в случае, когда вместо воздействия переменной силы на кинк имеет место колебание центра пиннинга. Однако в этом случае роль переменной силы играет выражение (24), которое определяется как амплитудой колебания примеси, так и пара-метрами кинка.

Автор выражает благодарность А.А. Ктеяну и Р.А. Варданяну за плодотворные обсуждения и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. **T.Suzuki, S.Takeuchi, H.Yoshinaga.** Dislocation dynamics and plasticity. Berlin–New York, Springer-Verlag, 1991.
2. **K.Maeda, S.Takeuchi,** in: F.R.N.Nabarro and M.S.Duesbery (eds.), Dislocations in Solids, Amsterdam, North-Holland, 1996, pp.443-504.
3. **R.A.Vardanian, T.V.Zakarian.** Solid State Commun., **86**, 7 (1993).
4. **D.W.McLaughlin, A.C.Scott.** Phys. Rev. A, **18**, 4 (1978).
5. **N.R.Quintero, A.Sanchez.** Eur. Phys. J. B, **6**, 133 (1998).
6. **D.R.Gulevich, F.V.Kusmartsev.** Phys. Rev. B, **74**, 214303 (2006).
7. **A.S.Vardanyan, R.A.Vardanyan, A.A.Kteyan.** J. Phys. Chem. Sol., **69**, 2785 (2008). (dx.doi.org/10.1016/j.jpcs.2008.06.138). **А.С.Варданян, Р.А.Варданян.** Ученые Записки ЕГУ, **2**, 41 (2008).
8. **J.W.Yang, X.J.Ning, P.Pirouz.** Proc. Japan–U.S. Workshop on Functional Fronts in Advanced Ceramics, Tsukuba, 1994, p.55.
9. **Дж.Хирт, И.Лоте.** Теория дислокаций. М., Атомиздат, 1972.
10. **И.Р.Свиньин.** ТМФ, **22**, 1 (1975).
11. **Р.А.Варданян, В.Я.Кравченко.** ДАН СССР, **266**, 82 (1982).

ԴԻՍԼՈԿԱՑԻՈՆ ԿԻՆԿԻ ԴԻՆԱՄԻԿԱՆ ՊԻՆՆԻՆԳԻ ԿԵՆՏՐՈՆԻ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՈՒՄ ԱՐՏԱՔԻՆ ՈՒԺԵՐԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ՏԱԿ

Ա.Ս. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ

Պայերլսի մեխանիզմով դիսլոկացիայի շարժման վրա կետային արատների ազդեցությունը ուսումնասիրելու համար հետազոտված է դիսլոկացիոն կինկի շարժման դինամիկան պիննինգի պոտենցիալում արտաքին հաստատուն և փոփոխական ուժերի ազդեցության տակ: Խոտորման տեսության շրջանակներում գծայնացնելով կինկի շարժման հավասարումները՝ ստացված է գծային տատանումների հավասարում կինկի արագության համար:

DYNAMICS OF DISLOCATION KINK IN THE PINNING CENTER POTENTIAL UNDER INFLUENCE OF EXTERNAL FORCES

A.S. VARDANYAN

Dynamics of dislocation kink affected by external dc and ac forces in the pinning potential is analyzed for study of the point defects role in dislocation motion by the Peierls mechanism. Within the framework of perturbation theory, the linearization of equations of motion of the kink results in the linear oscillation equation for the kink velocity.