

Аномальная кинетика дислокационных кинков в неупорядоченной атмосфере адсорбированных дислокацией примесей

© Б.В. Петухов

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Российской академии наук,
119333 Москва, Россия

E-mail: petukhov@ns.crys.ras.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 17 января 2008 г.)

Показано, что учет статистических флуктуаций в распределении адсорбированных на дислокациях примесей приводит к изменению характера подвижности дислокаций вследствие перехода к аномальному режиму движения кинков. Характеристики соответствующего динамического фазового перехода зависят от взаимодействия между адсорбированными примесями, которое в зависимости от знака может как усиливать, так и ослаблять размах флуктуаций потенциала для кинков. Результаты расчета могут быть использованы также при описании кинетики одномерных систем другой физической природы.

PACS: 61.72.Lk, 61.72.Yx

1. Введение

Изучению движения частиц в неупорядоченных средах посвящено большое и непрерывно увеличивающееся число работ. Широкий интерес обусловлен как многообразием практических приложений, так и своеобразием физических явлений, связанных с этой проблемой (см. обзоры [1–4]). Одним из любопытных теоретических результатов исследований в этой области стало предсказание существования динамического фазового перехода с обращением в нуль средней скорости движения одномерных частиц. Описываемое явление было обнаружено на физически мотивированной модели движения дислокационных кинков в примесном кристалле [5]. Впоследствии его описание было формализовано математиками [6] и распространилось на многие области физики, химии, биологии. В разных работах это явление фигурирует под различными названиями: квазилокализация [1,7], нелинейный дрейф в поле случайной силы [8], гетерогенная динамика [9], переход в фазу крипа [10] и др. К сожалению, вместо одного из этих названий, отражающих тот или иной аспект явления, большее распространение получила безличная формулировка „аномальная кинетика“.

Выяснение закономерностей аномальной кинетики может быть полезным и иметь практические приложения в тех случаях, когда требуется радикально уменьшить подвижность частиц, например при необходимости иммобилизации дислокаций в изделиях полупроводниковой микроэлектроники, что имеет первостепенное значение для обеспечения их стабильной работы (см., например, [11]).

Считается, что вследствие диффузии примесных атомов, например кислорода или азота, к дислокациям в кремнии происходит закрепление последних (так называемый пиннинг). Сила пиннинга зависит от индивидуальной энергии связи примеси с дислокацией u и от избыточного количества примесей c_d в дислокационном ядре (в расчете на один период решетки a). Возможны

случаи, когда роль „примесных центров“, о которых идет речь, в действительности играют стабильные примесные комплексы, например димеры.

Для изучения закономерностей дислокационного пиннинга были проведены детальные эксперименты с предварительной термообработкой образцов, изменяя длительность которой можно создавать контролируемый избыток примесей в дислокационных ядрах [12]. Эти эксперименты продемонстрировали зависимость напряжения пиннинга σ_p не только от условий термообработки, при которой создается избыточная примесная атмосфера, но и от температуры эксперимента по страгиванию дислокаций с места, что свидетельствует о существенности кинетики преодоления центров закрепления.

Как известно [13], дислокации в материалах с высоким кристаллическим рельефом движутся посредством зарождения и распространения дислокационных перегибов (кинков). Дислокационный кинк является наиболее типичной физической реализацией одномерной „частицы“, потенциальная энергия взаимодействия которой с хаотически распределенными примесями $E(l)$ задается не последовательностью локальных пиков (или ям), а случайно блуждающей (с изменением длины пробега l) по шкале энергии величиной. $E(l)$ при встрече кинка с примесью увеличивается или уменьшается на величину порядка энергии связи примеси с дислокацией в зависимости от того, накладывается дислокационное ядро на примесь (переход кинка из положения 1 в положение 2 на рис. 1) или отрывается от нее (переход из положения 2 в положение 3). Такой потенциал, предложенный в [5] (без учета возможного взаимодействия примесей между собой), впоследствии получил название „поля случайной силы“. Его частным предельным случаем является „броуновский потенциал“, когда энергия $E(l)$ „диффундирует“ с некоторым коэффициентом „диффузии“ D_E по шкале энергии вокруг среднего значения $\langle E \rangle$ при изменении длины пробега кинка l с функцией распределения $P_E(E) = (2\pi D_E l)^{-1/2} \exp[-(E - \langle E \rangle)^2 / (2D_E l)]$.

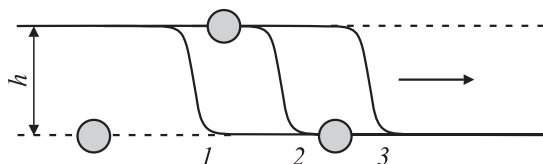


Рис. 1. Случайные вариации энергии ядра дислокации при перемещении кинка через хаотически распределенные примесные центры (показаны кружками). При переходе кинка из положения 1 в положение 2 энергия ядра понижается на величину энергии связи примеси с дислокацией, при переходе из положения 2 в положение 3 энергия повышается на ту же величину. h — расстояние между долинами периодического кристаллического рельефа. Стрелка показывает направление движения кинка.

Предсказанный в [5] динамический фазовый переход заключается в том, что при напряжении σ , меньшем некоторого порогового σ_{th} , средняя скорость дрейфа кинков обращается в нуль, и возникает новый режим движения. В этом режиме длина пробега кинка $l(t)$ зависит от времени t не по универсальному линейному закону, а определяется видом спектра времен задержек $P(t)$ на флуктуациях случайного потенциала $l(t) \sim P(t)^{-1}$. Полученное в [5] точное решение модели в предельном случае броуновского случайного потенциала дало для асимптотики $P(t)$ при больших t выражение $P(t) \sim t^{-\delta(\sigma)}$, убывающее с увеличением t степенным образом с показателем степени $\delta(\sigma) = \sigma hb k T / D_E$. Здесь b — величина вектора Бюргерса дислокации, k — постоянная Больцмана, T — температура. Отсюда следует, что среднее время задержки на случайных препятствиях $\langle t \rangle = \int t [dP(t)/dt] dt$ расходится (и средняя скорость движения обращается в нуль) при $\delta(\sigma) < 1$, при этом зависимость пробега от времени приобретает аномальный вид

$$l(t) \sim t^{-\delta(\sigma)} \quad (1)$$

($\delta(\sigma) < 1$ при $\sigma < \sigma_{th}$).

При характерном для поля случайной силы степенном убывании спектра времен задержек $P(t) \sim t^{-\delta(\sigma)}$ имеется набор динамических фазовых переходов при различных значениях δ с расходимостью различных средних по распределению случайного потенциала от степеней времени задержки $\langle t^m \rangle$ (моментов). Физический интерес представляет, в частности, расходимость коэффициента диффузии частицы вокруг среднего смещения при $\delta = 2$ [14]. Случай отсутствия внешней движущей силы, т.е. $\delta = 0$, является особым и не описывается формулой (1). Как было показано в работе [15], среднеквадратичное смещение частицы дается при этом выражением $\langle l^2(t) \rangle \sim \ln^4(t)$.

Расчет в работах [5,7,16,17] относился преимущественно к случаю низких концентраций примесей $c_d \ll 1$ в пренебрежении их взаимодействием между собой. Для описания экспериментов с искусственно создаваемым избытком примесей в ядрах дислокаций вплоть до со-

здания равновесных примесных атмосфер (так называемое „старение дислокаций“) [12] требуется обобщение прежних расчетов для более высоких концентраций. Учет роли возникающего при повышенной концентрации примесей взаимодействия между ними является целью настоящей работы.

2. Описание модели

Наиболее распространенным способом учета статистических свойств случайного потенциала является задание его в гауссовом виде, характеризуемом парной корреляционной функцией $\langle E(l)E(l') \rangle = K(l-l')$. В большинстве случаев корреляцией потенциала в разных точках пренебрегается, т.е. рассматривается так называемый „белый шум“, когда $K(l-l')$ представляет собой δ -функцию. Иногда корреляцию вводят искусственно, задавая некоторую функцию $K(l-l')$ с конечным характерным размером. В настоящей работе используется другой способ задания статистических свойств случайного потенциала, мотивированный экспериментами по изучению пиннинга состаренных дислокаций [12]. Будем считать, что статистические свойства распределения примесной атмосферы определяются тепловым равновесием (устанавливаемым, например, с участием так называемой трубочной диффузии вдоль дислокации) при температуре T_0 , при которой производится термическая обработка образца. При этом общее содержание примесей на дислокации зависит от времени термообработки, и лишь при достаточной длительности этого процесса происходит установление полного равновесия с объемной примесной подсистемой. Варьируя температуру T_0 термообработки, можно изменять степень корреляции случайного потенциала для движения кинков. Высокая температура $T_0 \rightarrow \infty$ соответствует отсутствию корреляции, в то время как достаточно низкая температура T_0 отвечает сильной корреляции пространственных флуктуаций потенциала.

Ядро дислокации будем моделировать линейной цепочкой занимаемых примесными центрами ячеек, например междоузлий, являющихся центрами притяжения примесей. Вне ядра распределение примесей будем считать хаотическим, отвечающим разбавленному твердому раствору. Средняя концентрация примесей в объеме образца c будет предполагаться малой по сравнению с концентрацией примесей, адсорбированных на дислокации c_d , и поэтому их взаимодействием между собой вне дислокации можно пренебречь.

Конфигурацию примесной подсистемы на дислокации обозначим символом Γ . Ее можно характеризовать набором чисел заполнения ячеек $\{n_i\}$: если в ячейке с номером i отсутствует примесь, то $n_i = 0$; если имеется примесь, то $n_i = 1$. Очевидно, полное число примесей n на рассматриваемом дислокационном сегменте длиной $l = aN$ равно $n = \sum_{i=1}^N n_i$. Изменение энергии $E\{\Gamma\}$ дисло-

кационного сегмента из-за наличия примесей запишем в виде суммы энергий связи примесей с дислокацией $-u$ и энергий взаимодействия примесей, оказавшихся в соседних ячейках u_1 ,

$$E\{\Gamma\} = -u \sum_{i=1}^N n_i + u_1 \sum_{i=1}^{N-1} n_i n_{i+1}. \quad (2)$$

Предпочтительность нахождения примесей в ядре дислокации учитывается отрицательным значением энергии связи $-u$ ($u > 0$). Во внимание принимается только взаимодействие между примесями, занимающими соседние ячейки в дислокационном ядре. Значение $u_1 < 0$ моделирует наличие притяжения между примесями, значение $u_1 > 0$ моделирует наличие отталкивания. Первое слагаемое в (2) описывает асимметричные случайные блуждания по шкале энергии вокруг среднего значения $-c_d u N$. Учет взаимодействия между примесями вводит корреляцию в шаги случайного блуждания по энергии и тем самым обобщает первоначальную модель поля случайной силы [5,8,15], позволяя, в частности, учесть роль комплексообразования.

Среднее от любой величины A , зависящей от конфигурации примесей в ядре дислокации, записывается в виде

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\Gamma} A\{\Gamma\} \exp \left[\frac{\mu n - E\{\Gamma\}}{kT_0} \right]. \quad (3)$$

Здесь μ — химический потенциал примесей на дислокации, Z — статсумма большого канонического ансамбля

$$Z = \sum_{\Gamma} \exp \left[\frac{\mu n - E\{\Gamma\}}{kT_0} \right] = \sum_{n=0}^N \chi^n Z_n, \quad (4)$$

где $\chi = \exp(\mu/kT_0)$ — так называемая „активность“, Z_n — статсумма канонического ансамбля. Суммирование в (3) и (4) выполняется по всевозможным распределениям примесей по ячейкам в дислокационном ядре, Z_n вычисляется суммированием по конфигурациям с фиксированным числом примесей n .

3. Содержание примесей на дислокации и напряжение пиннинга

Средняя концентрация примесей на дислокации c_d может быть выражена через Z как

$$\begin{aligned} c_d &= \frac{\langle n \rangle}{N} = \frac{1}{NZ} \sum_{\Gamma} n\{\Gamma\} \exp \left[\frac{\mu n - E\{\Gamma\}}{kT_0} \right] \\ &= \frac{kT_0}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu}. \end{aligned} \quad (5)$$

При вычислении Z естественно использовать метод, разработанный для модели Изинга (см., например, [18]).

Введем вспомогательную величину Z_N^v , представляющую собой сумму слагаемых $\exp\{(\mu n - E\{\Gamma\})/kT_0\}$, вычисленную по всем конфигурациям Γ при определенном состоянии последнего междоузлия — либо с примесью ($v = 1$), либо пустом ($v = 0$). Воспользовавшись явным видом выражения для энергии конфигурации (2), можно записать рекуррентные соотношения для дислокационных сегментов с длиной, отличающейся на одно звено,

$$Z_{N+1}^0 = Z_N^0 + Z_N^1, \quad (6)$$

$$Z_{N+1}^1 = Z_N^0 \exp[(\mu + u)/kT_0] + Z_N^1 \exp[(\mu + u - u_1)/kT_0]. \quad (7)$$

Вводя матрицу перехода $V_{v\mu}$, элементы которой ясны из формул (6), (7), можно переписать рекуррентные соотношения в виде

$$Z_{N+1}^v = \sum_{\mu} V_{v\mu} Z_N^{\mu}. \quad (8)$$

N -кратное применение соотношения (8) позволяет выразить Z_{N+1}^v через вектор состояния первого звена Z_1^v и произведение переходных матриц

$$Z_{N+1}^v = \sum_{\mu} (V^N)_{v\mu} Z_1^{\mu}. \quad (9)$$

Зависимость Z_N^v от N при больших N , как известно из теории матриц, дается фактором λ_1^N , где λ_1 есть максимальное собственное значение переходной матрицы (при больших N влияние граничных условий становится несущественным, и V^N зависит от N так же, как след этой матрицы $\text{Tr}(V^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N$ с преобладающим вкладом максимального собственного значения λ_1).

Решая характеристическое уравнение для матрицы V , находим

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{1}{2} \left\{ 1 + \chi \exp \left(\frac{u - u_1}{kT_0} \right) \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\left[1 - \chi \exp \left(\frac{u - u_1}{kT_0} \right) \right]^2 + 4\chi \exp \left(\frac{u}{kT_0} \right)} \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Соответственно $Z \approx \lambda_1^N$ и, согласно (5),

$$\begin{aligned} c_d &= \frac{\chi}{2\lambda_1} \left\{ \exp \left(\frac{u - u_1}{kT_0} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{2 \exp \left(\frac{u}{kT_0} \right) - \exp \left(\frac{u - u_1}{kT_0} \right) \left[1 - \chi \exp \left(\frac{u - u_1}{kT_0} \right) \right]}{\sqrt{\left[1 - \chi \exp \left(\frac{u - u_1}{kT_0} \right) \right]^2 + 4\chi \exp \left(\frac{u}{kT_0} \right)}} \right\}. \end{aligned} \quad (11)$$

При равновесии примесей в дислокационной атмосфере и в объеме материала химический потенциал μ своему объемному значению, которое можно принять

соответствующим идеальному разбавленному раствору $\mu = kT_0 \ln c$. Таким образом, равновесное содержание примесей на дислокации получается из (11) заменой χ на c . Соотношение (11) может быть обращено

$$\chi = \exp\left(-\frac{u}{kT_0}\right) \times \frac{1 + 2\xi^2 c_d(1 - c_d) - (1 - 2c_d)\sqrt{1 + 4(\xi - 1)c_d(1 - c_d)}}{2\xi^2 c_d(1 - c_d)}, \quad (12)$$

что позволит в дальнейшем получать явные концентрационные зависимости рассчитываемых величин. Здесь $\xi = \exp(-u_1/kT)$.

Представляет интерес также плотность средней энергии примесной подсистемы на дислокации $\langle E_d \rangle/N$, характеризующая усредненную глубину потенциальной „ямы“, из которой дислокация должна „выбираться“. Из определения статсуммы (4) нетрудно вывести соотношение $\langle E_d \rangle/N = \mu c_d + (kT_0^2/N)\partial \ln Z/\partial T_0 = \mu c_d + kT_0^2 \partial \ln \lambda_1/\partial T_0$ и, используя результаты (10), (12), получить

$$\frac{\langle E_d \rangle}{N} = c_d(-u + u_1) + \frac{u_1}{2(\xi - 1)} \left[1 - \sqrt{1 + 4(\xi - 1)c_d(1 - c_d)} \right]. \quad (13)$$

Дислокация может оторваться от своей примесной атмосферы, лишь если работа внешнего напряжения при переходе в следующую долину кристаллического рельефа σhab превысит энергию пиннинга $-\langle E_d/N \rangle$ (13). Равенство этих величин и определяет напряжение пиннинга $\sigma_p = -\langle E_d/N \rangle/(hab)$.

4. Термодинамическое описание статистики флуктуаций числа частиц в примесной атмосфере

Ввиду случайно неоднородного характера примесной атмосферы на дислокации, образующейся в результате хаотической диффузии примесей в ее ядро, следует рассмотреть модификацию кинкового механизма полем случайно расположенных вдоль дислокации примесных центров. Флуктуации плотности примесей вдоль дислокации создают случайный спектр барьеров с различными временами задержки кинков на них t_1, t_2, \dots . Так как нас будут интересовать флуктуации, содержащие большое число частиц, допустимо макроскопическое термодинамическое их описание. Вероятность P_n наличия в интервале n частиц решеточного газа равна согласно статистической механике (см., например, [19])

$$P_n = \chi_d^n Z_n/Z, \quad (14)$$

где χ_d обозначает активность, соответствующую средней концентрации примесей на дислокации c_d . Используя

термодинамические формулы и полученное выше решение для Z , получаем выражение для статсуммы Z_n

$$Z_n \sim \exp\{N \ln \lambda(\chi_n) - n \ln \chi_n\}. \quad (15)$$

Здесь χ_n есть корень уравнения

$$\chi \frac{\partial \ln[\lambda_1(\chi)]}{\partial \chi} = \frac{n}{N}, \quad (16)$$

аналогичного (5) с заменой c_d на неравновесную концентрацию $c_n = n/N$. Подставляя (15) в (14), получаем

$$P_n \sim \exp\left\{N \ln \frac{\lambda_1(\chi_n)}{\lambda_1(\chi_d)} - n \ln \frac{\chi_n}{\chi_d}\right\}. \quad (17)$$

Формула (17) при отсутствии взаимодействия между примесями ($u_1 = 0$) переходит в известное выражение для идеального решеточного газа

$$P_n \sim \exp\left\{N \ln \frac{1 - c_d}{1 - c_n} - n \ln \frac{c_n(1 - c_d)}{c_d(1 - c_n)}\right\}, \quad (18)$$

являясь его обобщением для неидеального одномерного решеточного газа.

Вероятность флуктуаций при относительно небольших отклонениях от средней концентрации примесей можно описывать распределением Гаусса

$$P_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle (n - n_d)^2 \rangle}} \exp\left(-\frac{(n - n_d)^2}{2 \langle (n - n_d)^2 \rangle}\right), \quad (19)$$

где $n_d = Nc_d$. Вместо того чтобы разлагать по степеням $n - n_d$ общее громоздкое выражение (17), можно использовать для вычисления среднеквадратичного отклонения $\langle (n - n_d)^2 \rangle$ термодинамическую формулу (см., например, [19])

$$\langle (n - n_d)^2 \rangle = kT_0 \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{T_0}. \quad (20)$$

Здесь μ — химический потенциал, соответствующий концентрации $c_n = n/N$. Зависимость $n(\mu)$, необходимая для вычисления правой части уравнения (20), дается общей формулой (11) (с заменой c_d на $c_n = m(\mu)/N$). Производя дифференцирование, после несложных преобразований получаем

$$\langle (n - n_d)^2 \rangle = Nc_d(1 - c_d)\sqrt{1 + 4(\xi - 1)c_d(1 - c_d)}. \quad (21)$$

Из этой формулы можно видеть, что флуктуации усиливаются при наличии притяжения между адсорбированными примесями (когда $\xi \gg 1$) и ослабляются при отталкивании (когда $\xi \ll 1$). Рис. 2 иллюстрирует усиление флуктуаций при наличии притяжения между примесями расчетом общей функции распределения P_n (17). Кроме того, этот рисунок показывает, что гауссовское приближение для функции распределения, часто используемое

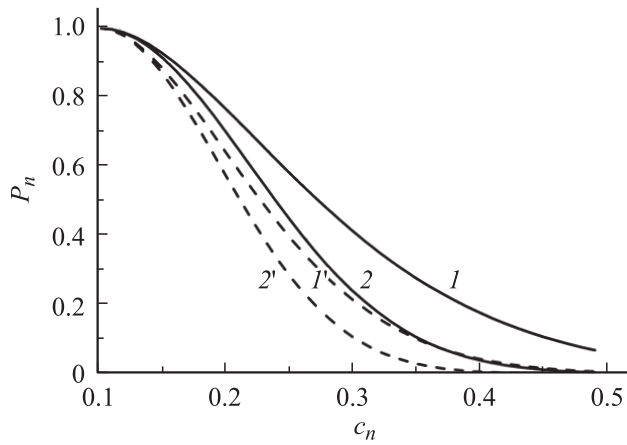


Рис. 2. Вероятность P_n встретить флуктуационное скопление примесей с неравновесной концентрацией c_n (равновесная концентрация $c_d = 0.1$, размер скопления $N = 10$) при наличии взаимодействия примесей ($u_1/u = -0.25$, кривая 1) и при отсутствии взаимодействия (кривая 1'). Кривые 2 и 2' описывают те же зависимости в гауссовом приближении.

в расчетах аномальной кинетики, применимо лишь в весьма ограниченной области концентраций.

Нам понадобится также плотность средней энергии $\varepsilon_n = \langle E_n \rangle / N$ флуктуации из n примесей. По известной статсумме Z_n (15) посредством формулы $\langle E_n \rangle / N = (kT_0^2 / N) \partial \ln Z_n / \partial T_0$ получаем аналогично (13)

$$\varepsilon_n = c_n(-u + u_1) + \frac{u_1}{2(\xi - 1)} \left[1 - \sqrt{1 + 4(\xi - 1)c_n(1 - c_n)} \right]. \quad (22)$$

5. Спектр времен задержек кинка

Изменение характера движения кинков из-за обращения в нуль их средней скорости обусловлено вкладом больших времен задержек кинков на случайных примесных скоплениях. Изучим спектр больших времен задержек более подробно. Используем для этой цели так называемый метод оптимальной флуктуации [20], основанный на нахождении из полного спектра флуктуаций, обладающих требуемым свойством, такой, вероятность встретить которую максимальна.

Так как нас интересует только значение энергии в точке максимума потенциального барьера, дающее энергию активации, будем характеризовать случайное скопление двумя параметрами: длиной aN и полным количеством примесей n в нем. Вероятность встретить такое примесное скопление дается формулой (17). Ансамбль из n примесей, распределенных на интервале длиной aN , создает потенциальную яму для кинка глубиной $-E_n$. При большом числе примесей в скоплении флуктуации энергии вокруг среднего значения E_n относительно малы, поэтому будем использовать для характеристики создаваемого скоплением энергетического

барьера выражение (22). Для выхода из ямы требуется термическая активация. Внешнее напряжение понижает высоту барьера до величины

$$-E_n - \sigma habN. \quad (23)$$

Время задержки t кинка в яме вычисляется по формуле Аррениуса

$$t = \tau_* \exp \left\{ \frac{N(\varepsilon_n - \sigma hab)}{kT} \right\}. \quad (24)$$

Предэкспоненциальный множитель τ_* в первом приближении считается постоянным. Функция распределения $P(t)$ времен задержки определяется вероятностью P_n встретить яму с заданным временем t выхода из нее. Это условие фиксирует один из двух случайных параметров, входящих в P_n , например N ,

$$N = \frac{kT \ln(t/\tau_*)}{\varepsilon_n - \sigma hab}. \quad (25)$$

В качестве второго параметра естественно выделилась флуктуационная концентрация примесей $c_n = n/N$. Ее следует выбрать таким образом, чтобы получить наиболее часто встречающиеся скопления примесей с требуемыми свойствами, т.е. из условия максимальности вероятности P_n по c_n . Условие экстремальности приводит к уравнению на оптимальное значение c_n

$$\sigma hab = \varepsilon_n + \left\{ u - u_1 \left[1 - \frac{1 - 2c_n}{\sqrt{1 + 4(\xi - 1)c_n(1 - c_n)}} \right] \right\} \times \frac{\ln[\lambda(\chi_n)/\lambda(\chi_d)] - c_n \ln(\chi_n/\chi_d)}{\ln(\chi_n/\chi_d)}. \quad (26)$$

Подставляя решение уравнения (26) в P_n и вводя обозначение

$$kT_g = -(\varepsilon_n - \sigma hab) / \left\{ \ln \left[\frac{\lambda(\chi_n)}{\lambda(\chi_d)} \right] - \frac{n}{N} \ln \left(\frac{\chi_n}{\chi_d} \right) \right\}, \quad (27)$$

приходим к выражению для функции распределения $P(t)$ при больших t

$$P(t) \sim \left(\frac{\tau_*}{t} \right)^{T/T_g}. \quad (28)$$

Пара уравнений (26), (27) дает параметрическое представление зависимости T_g от напряжения (через параметр c_n). Рис. 3 иллюстрирует эту зависимость при различных значениях средней концентрации адсорбированных примесей. Демонстрируется также расширение температурного интервала аномальной кинетики при наличии притяжения между примесями.

Величина T_g характеризует вероятность больших времен задержки кинка при его движении вдоль дислокации. Большая величина T_g означает медленное убывание

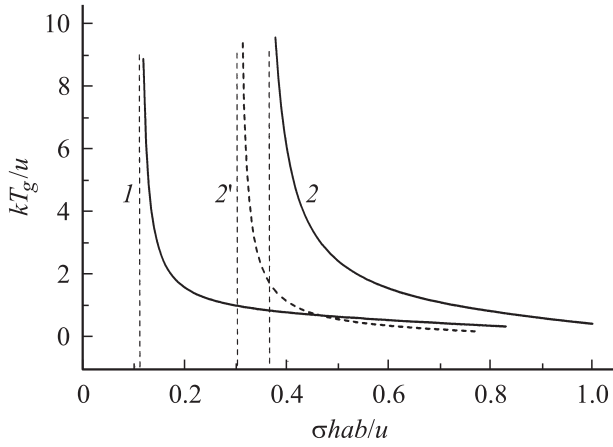


Рис. 3. Зависимость температуры динамического фазового перехода T_g от внешнего напряжения при наличии взаимодействия примесей $u_1/u = -0.25$ (1, 2) и без взаимодействия $2'$. $c_d = 0.1$ (1) и 0.3 (2, $2'$). Вертикальные штриховые линии отмечают значения напряжения пиннинга.

вероятности наличия больших времен задержки и, следовательно, большое среднее время задержки $\langle t \rangle$

$$\langle t \rangle = \int_0^{\infty} t \frac{dP(t)}{dt} dt = \int_0^{\infty} P(t) dt. \quad (29)$$

Более того, при $T \leq T_g$ убывание $P(t)$ становится столь медленным, что интеграл в (29) расходится и среднее время задержки обращается в бесконечность. Подвижность приобретает аномальный характер, при котором средняя длина пробега $l(t)$ определяется средним расстоянием между барьерами с временем задержки, превышающим t ,

$$l(t) \sim \frac{\Delta l}{P(t)} \sim \Delta l \left(\frac{t}{\tau_*} \right)^{T/T_g}, \quad (30)$$

т.е. растет медленнее, чем при обычном линейном дрейфе под действием внешнего напряжения. Размерный параметр Δl в (30) не определяется в рассматриваемом приближении и считается некоторой константой.

При отсутствии взаимодействия между примесями нетрудно получить явное аналитическое соотношение для T_g

$$kT_g \ln\{1 + c_d[\exp(u/kT_g) - 1]\} = \sigma hab, \quad (31)$$

согласующееся с прежним результатом [16]. Формула (30) является обобщением кинетического закона (1) с явным указанием температурной зависимости показателя $\delta = T/T_g$ при температуре динамического перехода T_g , зависящей помимо напряжения σ от средней концентрации адсорбированных примесей c_d , энергий их связи с дислокацией u и взаимодействия между собой u_1 , а также от температуры термообработки T_0 .

Представляет интерес изучение предельного случая напряжений, мало отличающихся от напряжения пиннинга $\sigma_p = \langle E_d \rangle / (Nhab)$. При этом достаточно относительно небольших флуктуаций, когда их вероятность можно описывать распределением Гаусса (19). Реализуя в явном виде описанную выше схему вычисления T_g , приходим к выражению

$$kT_g = \frac{[(u_1 - u)\sqrt{1 + 4(\xi - 1)c_d(1 - c_d)} - u_1(1 - 2c_d)]^2 c_d(1 - c_d)}{2\sqrt{1 + 4(\xi - 1)c_d(1 - c_d)}(\sigma - \sigma_p)hab}, \quad (32)$$

которое выявляет характер демонстрируемой на рис. 3 сингулярной зависимости T_g от напряжения вблизи напряжения пиннинга σ_p .

6. Заключение

В настоящей работе развита теория движения дислокационных кинков в случайном потенциале, образованном адсорбированными на дислокации примесными атомами. Статистические свойства примесного распределения описаны с учетом короткодействующего взаимодействия между примесями, которое в зависимости от его знака может как усиливать, так и ослаблять флуктуации случайного потенциала. Благодаря двум обстоятельствам удается получить сравнительно простое описание кинетики движения кинков. Первое обстоятельство — это существенность для аномальной кинетики редких сильных флуктуаций, что позволяет использовать для расчета хорошо разработанный в теории неупорядоченных систем метод оптимальных флуктуаций. Второе обстоятельство — это простое устройство оптимальной флуктуации, характеризуемое лишь двумя параметрами: размером и полным числом примесей в нем. Это позволило использовать аппарат термодинамики в расчете статистики примесных скоплений. В итоге получено распределение больших времен задержек дислокационных кинков на флуктуациях плотности примесей, рассчитана температура T_g динамического фазового перехода с обращением в нуль средней скорости движения кинков в зависимости от параметров системы, найден кинетический закон движения кинков в аномальной области $T < T_g$: $l(t) \sim (t/\tau_*)^{T/T_g}$.

Полученные результаты расчета наглядно показывают, что „диффузионность“ случайного рельефа для кинков увеличивается при взаимном притяжении примесей ($u_1 < 0$) и уменьшается при отталкивании примесей ($u_1 > 0$). Наличие притяжения между примесями на дислокации, способствующего комплексообразованию в атмосфере адсорбированных примесей, может заметно увеличивать силу пиннинга дислокаций. Это обстоятельство полезно принимать во внимание, в частности, при интерпретации экспериментов по влиянию магнитного поля на пиннинг дислокаций в кристаллах полупроводников [21,22], поскольку выдержка образцов в магнит-

ном поле может влиять как на энергию связи примесей с дислокацией, так и на энергию адсорбированных примесей между собой.

Список литературы

- [1] S. Alexander, J. Bernasconi, W.R. Schneider, R. Orbach. *Rev. Mod. Phys.* **53**, 175 (1981).
- [2] J.W. Haus, K.W. Kehr. *Phys. Rep.* **150**, 263 (1987).
- [3] J.-P. Bouchaud, A. Georges. *Phys. Rep.* **195**, 127 (1990).
- [4] F. Igloi, C. Monthus. Strong disorder RG approach of random systems. *Cond-mat/0502448/2005*.
- [5] Б.В. Петухов. *ФТТ* **13**, 1445 (1971).
- [6] H. Kesten, M.V. Kozlov, F. Spitzer. *Compositio Mathematica* **30**, 145 (1975).
- [7] Б.В. Петухов. *ФТТ* **30**, 2893 (1988).
- [8] V.M. Vinokur. *J. Phys. (Paris)* **47**, 1425 (1986).
- [9] Б.В. Петухов. *ФТТ* **35**, 1121 (1993).
- [10] J.-P. Bouchaud, A. Georges. *Comments Cond. Mater. Phys.* **15**, 125 (1991).
- [11] K. Sumino. In: *Defects and properties of semiconductors: defect engineering* / Eds J. Chikawa, K. Sumino, K. Wada. KTK Scientific Publ., Tokyo (1987). P. 227.
- [12] S. Senkader, A. Guannattasio, R.J. Falster, P.R. Wilshaw. *Solid State Phenom.* **95–96**, 43 (2004).
- [13] J.P. Hirth, J. Lothe. *Theory of dislocations*. 2nd ed. Wiley-Interscience, N. Y. (1982). [Д. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. Атомиздат, М. (1972). 598 с.].
- [14] B. Derrida. *J. Stat. Phys.* **31**, 433 (1983).
- [15] Я.Г. Синай. *Теория вероятностей и ее применения*. **28**, 247 (1982).
- [16] Yu.L. Iunin, V.I. Nikitenko, V.I. Orlov, B.V. Petukhov. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3137 (1997).
- [17] Б.В. Петухов. *ФТТ* **49**, 242 (2007).
- [18] R.J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. Academic Press, London etc. (1982). [Р. Бэксстер. *Точно решаемые модели в статистической механике*. Мир, М. (1985). 488 с.].
- [19] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика*. Наука, М. (1976). Ч. 1. 584 с.
- [20] И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур. *Введение в теорию неупорядоченных систем*. Наука, М. (1982). 360 с.
- [21] М.В. Бадылевич, Ю.Л. Иунин, В.В. Кведер, В.И. Орлов, Ю.А. Осипьян. *ЖЭТФ* **124**, 664 (2003).
- [22] E.V. Darinskaya, E.A. Petrzhik, Yu.M. Ivanov, S.A. Erofeeva, M.R. Raukman. *Phys. Status Solidi C* **2**, 1873 (2005).