Физика твердого тела, 2012, том 54, вып. 4

08

Линейные и нелинейные волны в кристаллах с заряженными дислокациями

© А.В. Шекоян

Институт механики НАН Армении,
Ереван, Армения

E-mail: ashotshek@mechins.sci.am

(Поступила в Редакцию 7 июня 2011 г.
В окончательной редакции 30 сентября 2011 г.)

На основе принципа выведена система уравнений, описывающая распространение ультразвуковых волн в диэлектрическом кристалле с заряженными дислокациями. Выведено линейное дисперсионное уравнение, а также найдены скорость ультразвуковой волны и коэффициент поглощения. В случае нелинейной ультразвуковой волны получены уравнения для затухания амплитуды и изменения фазы волны.

В последние годы появились работы, изучающие движение заряженных дислокаций с учетом его влияния на различные свойства диэлектрических или полупроводниковых кристаллов [1–4].

В монографии [1], являющейся фундаментальной работой по теории дислокации, указано, что обычно по своей природе дислокации заряжены. В обзоре [2] на основании анализа структуры дислокации обсуждаются условия, при которых она может быть заряженной или нейтральной. Изучено влияние заряженных дислокаций на физические свойства щелочно-галоидных кристаллов. Уравнение движения дислокации постулируется подобно [5] с учетом электрического облака и приложенной механической силы. В [3] экспериментально показано, что при пластической деформации на поверхности образца появляется заряд. Этот эффект обусловлен движением заряженных дислокаций. В работе [4] исследуется движение заряженных дислокаций в полупроводниковых кристаллах кремния *n*- и *p*-типа. Учитываются дислокационная, решеточная и токовая нелинейности, а также электронное или дырочное облако, окружающее дислокацию. Теоретическая часть представлена схематично. В настоящее время хорошо развита теория распространения линейных и нелинейных волн в кристаллах с дислокациями [6–9].

Целью настоящей работы является исследование линейной и нелинейной волн в диэлектрических кристаллах с заряженными дислокациями с использованием идей, развитых в работах [6–9].

Пусть имеется диэлектрический кристалл, где есть заряженные дислокации. Используем струнную модель дислокаций с учетом существования на них заряда, создающего в кристалле электрическое поле E_i.

Под влиянием волнового поля в диэлектрическом кристалле дислокация будет колебаться. Для описания этого процесса использован метод, предложенный в работе [6], в которой развиты идеи, изложенные в [7,8].

Согласно [6], уравнения распространения ультразвуковой волны записываются в виде

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}, \tag{1}$$

$$A \frac{\partial^2 \xi_i}{\partial t^2} + B \frac{\partial \xi_i}{\partial t} = f_i, \tag{2}$$

где ρ — плотность среды, u_i — смещения, A и B — постоянные коэффициенты, характеризующие массу и затухание колебаний дислокации, ξ_i — компоненты смещения дислокаций под действием ультразвуковой волны.

Поскольку дислокации создают в среде электрическое поле, которое меняется в пространстве и во времени, уравнения (1) и (2) следует дополнить уравнениями Максвелла

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0, \tag{3}$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0, \tag{4}$$

где $\mathbf{D}$ — вектор электрического смещения.

Тензор напряжения σ_{ik}, компоненты силы f_i, действующей на дислокацию, и компоненты электрического смещения D_i, определяются из соотношений

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial F}{\partial u_{ik}}\right)_{\xi_i, E_i}, \quad f_i = -\left(\frac{\partial F}{\partial \xi_i}\right)_{E_i, u_{ik}},$$

$$D_i = - = \left(\frac{\partial F}{\partial E_i}\right)_{\xi_i, u_{ik}}, \tag{5}$$

где F — свободная энергия единицы среды, u_{ik} — тензор деформации.

Свободная энергия записывается с помощью метода, изложенного в [9]. Тогда выражение свободной энергии примет следующий вид:

$$\begin{aligned} F = F_0 &+ \frac{1}{2} c_{ijkl} u_{ij} u_{kl} + \frac{1}{2} \lambda_{jk} \xi_j \xi_k + \frac{1}{2} \beta_{ijkl} (b_i \xi_j + b_j \xi_i) u_{ik} \\ &+ \frac{1}{2} P_{mk} \xi_k E_m + \frac{1}{2} \varepsilon_{jk} E_j E_k + \frac{1}{2} m_{pjk} E_p u_{jk} \\ &+ \frac{1}{3!} Q_{iklmpq} u_{ik} u_{lm} u_{pq} + \frac{1}{3!} \gamma_{jkl} \xi_j \xi_k \xi_l + \frac{1}{3!} q_{iklpq} \\ &\times (b_i \xi_j + b_j \xi_i)(b_k \xi_l + b_l \xi_k) u_{pq} + \frac{1}{3!} d_{mkj} E_m E_k \xi_j \\ &+ \frac{1}{3!} a_{jkm} E_j \xi_k \xi_m + n_{jklm} E_j E_k u_{lm}, \end{aligned} \tag{6}$$

где c_{ijkl} и Q_{iklmpq} — линейные и нелинейные модули упругости, λ_{ik} и γ_{jkl} — тензоры линейной и нелинейной „жесткости“ дислокаций, β_{ijkl}, q_{ijklpq} — тензоры линейного и нелинейного акустодислокационного взаимодействия, ε_{ik} — диэлектрический тензор, $m_{pjk}, P_{mk}, d_{mkj}, a_{jkm}, n_{jklm}$ — тензоры, обусловленные электрическим, акустическим и дислокационным взаимодействием, b_i — компоненты вектора Бюргерса, F_0 — свободная энергия до возмущений.

Выражение (6) ограничено слагаемыми, которые дают в уравнениях квадратичные члены.

Воспользовавшись (5) и (6), ограничиваясь одномерным приближением $\left(\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_2} = 0\right)$ и отбрасывая индексы для простоты записи, можно представить следующую систему уравнений:

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \beta b \frac{\partial^2 \xi}{\partial x} + \frac{m}{2} \frac{\partial E}{\partial x} + (3c + Q) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{4}{3} q b^2 \xi \frac{\partial \xi}{\partial x} + nE \frac{\partial E}{\partial x}, \quad (7)$$

$$A \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} + B \frac{\partial \xi}{\partial t} = -\lambda \xi - b\beta \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{P}{2} E - \frac{1}{2} b\beta \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 - \frac{1}{2} \gamma \xi^2 - \frac{4}{3} q b^2 \xi \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{d}{6} E^2 - \frac{a}{3} E\xi, \quad (8)$$

$$\frac{1}{2} P \frac{\partial \xi}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{1}{2} m \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{d}{6} E \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{d}{6} \xi \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{a}{3} \xi \frac{\partial \xi}{\partial x} + 2n \frac{\partial E}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + 2nE \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (9)$$

Уравнения (7)–(9) записаны в лагранжевых координатах.

Из уравнения (4) следует, что в одномерном приближении E_1 и E_2 — постоянные, поэтому в системе уравнений (6)–(9) они отсутствуют. Оценки показывают, что с ускорением движения заряд дислокаций создает ничтожно слабое электромагнитное излучение, которым можно пренебречь.

Линеаризуя уравнения (7)–(9), решение линейной системы уравнений представляем в виде бегущей волны, тогда можно получить дисперсионное уравнение в следующем виде:

$$-\omega^2 \rho + ck^2 = -\frac{k^2 \left[b\beta \left(\frac{mp}{2\varepsilon} - \beta b\right) + \frac{m^2}{2\varepsilon}(\lambda - \omega^2 A - i\omega B) \right]}{\lambda - \omega^2 A - i\omega B + \frac{p^2}{4\varepsilon}}, \quad (10)$$

где k — волновое число, ω — комплексная частота, $\omega = \omega_0 + \omega_1 + i\alpha = \omega_0 + \omega_2$, ω_1 — действительная частота, α — коэффициент поглощения, а ω_2 — комплексное приращение частоты. Разделяя действительные и мнимые части выражения (10), учитывая малость дисперсии и диссипацию, можно получить

$$\omega_1 = \omega_0 \left\{ 1 - \frac{1}{2v_0^2 \beta} \times \frac{\left[b\beta \left(\frac{mp}{4\varepsilon} - \beta b\right) - \frac{m^2}{2\varepsilon}(\lambda - \omega_0^2 A) \right] \left(\lambda - \omega_0^2 A - \frac{p^2}{4\varepsilon}\right) - \frac{m^2 \omega_0^2}{4\varepsilon} B^2}{\left(\lambda - \omega_0^2 A - \frac{p^2}{4\varepsilon}\right)^2 + \omega_0^2 B^2} \right\}, \quad (11)$$

$$\alpha = -\frac{k^2 B}{2\beta} \frac{b\beta \left(\frac{mp}{4\varepsilon} - b\beta\right) - \frac{m^2}{2\varepsilon}(\lambda - \omega_0^2 A) + \frac{m^2 \omega_0^2}{4\varepsilon} \left(\lambda - \omega_0^2 A - \frac{p^2}{4\varepsilon}\right)}{\left(\lambda - \omega_0^2 A - \frac{p^2}{4\varepsilon}\right)^2 + \omega_0^2 B^2}, \quad (12)$$

где $\omega_0^2 = v_0^2 k^2 = \frac{c}{\rho} k^2$.

Если в соотношениях (11) и (12) пренебрегать величинами, обусловленными электрическим зарядом дислокаций и электрическими свойствами диэлектрика, то они совпадут с соответствующими величинами, полученными в работе [6].

Решение уравнений (7)–(9), которые имеют квадратичные нелинейные члены, из-за наличия дисперсии и диссипации можно искать в виде квазимонохроматических волн, имеющих вид [6,9,10]

$$(u, \xi, E) = \frac{1}{2} \left[(u_0, \xi_0, E_0) e^{i\varphi} + (u_0', \xi_0', E_0') e^{2i\varphi} + (u_0'', \xi_0'', E_0'') + \text{c.c.} \right], \quad (13)$$

где $\varphi = kx - \omega t$.

Подставив (13) в систему уравнений (7)–(9), можно получить новую систему уравнений для медленно меняющихся амплитуд.

Полученная новая система упрощается. В качестве основной функции выбираем u_0, а величину k считаем большой. Малость дисперсии и диссипации дает $\omega_2 \sim k^{\varepsilon_1} u_0$, $\omega_0 \sim k$, причем $0 < \varepsilon_1 < 1$, $\xi_0 \sim E_0 \sim k^{\varepsilon} u_0$. Эти оценки позволяют в уравнениях для амплитуд ξ_0 и E_0 пренебречь нелинейными слагаемыми и исключить их с помощью линейных уравнений. В уравнении для u_0 нелинейные слагаемые, обусловленные ξ_0 и E_0, малы, остаются упругие, геометричесие нелинейности и нелинейность, обусловленная свободным членом. В уравнениях для амплитуд второй гармоники оставляются только нелинейные слагаемые, пропорциональные u_0^2.

Согласно [11], $\frac{\partial}{\partial t} \sim \frac{\partial \omega}{\partial k} \frac{\partial}{\partial x}$, тогда из уравнений для u'' легко найти $\frac{\partial u_0''}{\partial x}$. Итак, получаются следующие уравнения для амплитуд:

$$-2ikc \frac{\partial u_0}{\partial x} - 2i\omega\rho \frac{\partial u_0}{\partial t} - \frac{m}{2} \frac{\partial E_0}{\partial x} \beta b \frac{d\xi_0}{dx} = ik^3 (3c + Q) e^{2\alpha t} u_0' u_0^* - k^2 (3c + Q) u_0 \frac{\partial u_0''}{\partial x}, \quad (14)$$

$$4(k^2 c - \omega^2 \rho) u_0' = -\frac{ik^3}{2} (3c + Q) u_0^2 + 2ikb\beta \xi_0' + ikmE_0^2, \quad (15)$$

$$-A\omega^2\xi_0 - i\omega B\xi_0 - ik\beta u_0 + \frac{p}{2}E_0 + \lambda\xi_0 = 0, \tag{16}$$

$$(-4\omega^2 A - 2i\omega B + \lambda)\xi_0' = -2ik\beta b u_0' - \frac{p}{2}E_0' + \frac{1}{4}b\beta k^2 u_0^2, \tag{17}$$

$$ik\frac{p}{2}\xi_0 + i\varepsilon k E_0 + \frac{mk^2}{2}u = 0, \tag{18}$$

$$2ip\xi_0' + 2i\varepsilon E_0' - 2kmu_0^2 = -\frac{imk^2}{2}u_0^2, \tag{19}$$

$$\frac{\partial u_0''}{\partial x} = \frac{k^3(3c+Q)e^{2\alpha t}}{2\rho v_0\,\frac{\partial\omega_2}{\partial k}}|u_0|^2. \tag{20}$$

Последовательно исключая все функции из системы уравнений (14)–(20), переходя к новой координате $\tau = \frac{x}{v} - t$, где $v = \frac{\omega}{k}$, получаем следующее уравнение относительно u_0:

$$-i\frac{du_0}{dx} = (e_1 + ie_2)|u_0|^2 u_0, \tag{21}$$

где

$$e_1 = \frac{k^3(3c+Q)^2 e^{2\alpha t}}{c'}\left\{\left[\frac{\Re_4\Re_5 + 32\omega_0^2 B^2\rho(v^2 - v_0^2)}{N_3} + \frac{\omega_n}{2\rho v_0(\omega_n^2 + \alpha_n^2)}\right]\right\} = \Omega_1 e^{\frac{2\alpha}{v}x},$$

$$e_2 = \frac{k^3(3c+Q)^2 e^{2\alpha t}\omega_0 B}{c'}\left[\frac{\Re_4 + 16\rho(v_1^2 - v_0^2) - 2\Re_5}{N_3} - \frac{\alpha_n}{2\rho v_0(\omega_n^2 + \alpha_n^2)}\right] = \Omega_2 e^{\frac{2\alpha}{v}x},$$

$$\Re_4 = -\lambda + 4\omega_0^2 A - \frac{p^2}{2\varepsilon} + 2b^2\beta^2 - \frac{m^2p^2}{2\varepsilon^2},$$

$$\Re_5 = -\frac{1}{8}\rho(v^2 - v_0^2)\left(\lambda - 4\omega_0^2 A + \frac{p^2}{2\varepsilon}\right) + 2\left(2b\beta - \frac{mp}{\varepsilon}\right)\left(\frac{mp}{2\varepsilon} - 2b\beta\right),$$

$$\omega_n = \frac{\partial\omega_1}{\partial k}, \quad \alpha_n = \frac{\partial\alpha}{\partial k},$$

$$N_3 = \Re_5^2 + 256\rho^2(v^2 - v_0^2)^2\omega^2 B^2,$$

$$c' = 2c - \frac{1}{\beta b - \frac{mp}{4\varepsilon}} \times \left[m^2\beta b + (mp\rho + 4\rho b\beta)(v^2 - v_0^2) - \frac{m^2\beta b}{4\varepsilon}\right].$$

Обычно дислокации исследуют в ультразвуковом диапазоне; тогда ωt и kx велики, а $kx - \omega t$ конечно для любых заданных волн, т.е. $|kx - \omega t| \ll kx$, $|kx - \omega t| \ll \omega x$, и в показатели экспоненты можно подставлять $t = x/v$, что и сделано в выражениях коэффициентов e_1 и e_2.

В уравнении (21) коэффициент e_1 обусловлен нелинейностями, а e_2 — нелинейной диссипацией.

Сделаем в уравнении (21) подстановку

$$u = L(x)\exp[-iS(k)],$$

где $L(x)$ — действительная амплитуда, а S — эйконал.

Тогда получим уравнения

$$\frac{dL}{dx} = -\Omega_2 e^{\frac{2\alpha}{v}x}L^3, \tag{22}$$

$$\frac{dS}{dx} = -\Omega_1 e^{\frac{2\alpha}{v}x}L^2, \tag{23}$$

Решение уравнения (22) имеет вид

$$L = L_0(1 + 2L_0^2\Omega_2 x)^{-1/2}. \tag{24}$$

Выражение (24) показывает, как меняется амплитуда в пространстве. Если $x > 0$, а $\Omega_2 < 0$, то в точке $x_1 = -\frac{1}{2L_0^2\Omega_2}$ может быть особенность. Если $|L_2\Omega_2| \ll 1$, то x_1 выходит из области реального наблюдения и можно утверждать, что особенности нет. Когда $|L_2^2\Omega_2| \sim 1$, существует особенность, которая может быть результатом резонанса или неустойчивости волны.

Решение уравнения (23) имеет вид

$$S = -\frac{\Omega_1}{2\Omega_2}\ln(1 + 2L_0^2\Omega_2 x).$$

При выводе (24), (25) было учтено, что $\frac{2\alpha}{v}x \ll 1$, и экспоненты были разложены в ряд.

Из выражения (25) видно, что время прохождения импульса волны при $\frac{\Omega_1}{\Omega_2} > 0$ уменьшается, а при $\frac{\Omega_1}{\Omega_2} < 0$ увеличивается. При $x = x_1$, как и для амплитуды L, в решении (25) есть особенность, и все отмеченное для амплитуды L остается в силе и для эйконала.

Автор благодарит А.Г. Багдоева за полезные обсуждения.

Список литературы

[1] Дж. Хирт, И. Лотке. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 509 с.
[2] Н.А. Тяпунина, Э.П. Белозерова. УФН. **156**, 683 (1988).
[3] Л.Б. Зуев. Физика электропластичности щелочно-галоидных кристаллов. Наука, М. (1999). 119 с.
[4] А.А. Скворцов, А.М. Орлов, В.А. Фролов, А.А. Соловьев. ФТТ **42**, 1998 (2000).
[5] A. Granato, K. Lucke. J. Appl. Phys. **27**, 583 (1956).
[6] А.В. Шекоян. Письма в ЖТФ **35**, *7*, 93 (2009).
[7] Г.Н. Бурак, И.В. Островский. Письма в ЖТФ **23**, *18*, 69 (1997).
[8] В.И. Ерофеев. Письма в ЖТФ **34**, *4*, 32 (2008).
[9] А.Г. Багдоев, В.И. Ерофеев, А.В. Шекоян. Линейные и нелинейные волны в диспергирующих сплошных средах. Физматлит, М. (2009), 318 с.
[10] А.В. Шекоян. Изв. АН АрмССР. Физика **23**, 283 (1988).
[11] Дж. Уизем. Линейные и нелинейные волны. Мир, М. (1977). 622 с.