

УДК 548.0 : 537.634

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ КРИСТАЛЛАХ С ВЫСОКИМ ПАЙЕРЛСОВСКИМ РЕЛЬЕФОМ

В. М. Винокур, И. Р. Сагдеев

Методом численного моделирования исследовано движение дислокаций в неупорядоченных кристаллах с высоким пайерлсовским рельефом. Показано, что введение дефектов в кристалл стимулирует генерацию кинков на дислокации. Обнаружено, что в области слабых постоянных внешних напряжений происходят резкое падение подвижности кинков и, как следствие, падение подвижности дислокаций. Исследовано движение дислокаций в неупорядоченных кристаллах под действием импульсного внешнего напряжения. Показано, что подвижность дислокаций падает с увеличением частоты импульсов при постоянной скважности и с увеличением скважности при постоянной частоте. Результаты моделирования сопоставлены с результатами аналитических расчетов и данными реальных экспериментов.

Основные представления о характере движения дислокации в высоком пайерлсовском рельефе были сформированы в работах Лоте и Хирта [1] и Казанцева и Покровского [2]. Дислокация описывается как упругая струна, находящаяся в периодическом потенциале, причем первоначально прямолинейная дислокация полностью лежит в одной из долин. Под действием тепловых флуктуаций на дислокации зарождаются парные перегибы (кинки), которые затем разбегаются под действием внешнего напряжения и аннигилируют с кинками других пар, что и приводит к перемещению дислокации в направлении, перпендикулярном пайерлсовским долинам. Экспериментальные данные показали, что важную роль в формировании подвижности дислокаций играют также точечные дефекты, всегда присутствующие в реальных кристаллах. В частности, было обнаружено [3-5] ускоряющее действие примесей на движение дислокаций. Этот эффект может быть объяснен в рамках модели [1, 2] как результат локального понижения пайерлсовского барьера из-за взаимодействия дислокации с примесями (Петухов [6-8]). К сожалению, количественного сопоставления экспериментальных и теоретических данных, которое позволило бы однозначно определить физические параметры, описывающие дислокации и дефекты, до сих пор провести не удалось. Одним из главных факторов, затрудняющих сравнение теории и эксперимента, является большое количество параметров, определяющих движение дислокаций: высота пайерлсовского барьера, энергия образования кинка, концентрация примесей и их энергия взаимодействия с дислокацией, коэффициент диффузии кинка вдоль дислокационной линии и т. д. В то же время практически единственной измеряемой величиной является среднее (по ансамблю дислокаций) смещение дислокации под действием приложенной нагрузки. В этой связи значительным продвижением представляется серия работ Никитенко, Фарбера и Иунина [9, 10], в которой предпринято исследование движения дислокаций в пайерлсовском рельефе под действием импульсной нагрузки. Исползованная методика позволила проследить не только за смещением отдельной дислокации но и — независимо — за диффузией кинков вдоль дислокационной линии. Было обнаружено резкое падение подвижности

дислокаций при увеличении частоты импульсов внешней нагрузки (при неизменной скважности, т. е. отношении промежутка между соседними импульсами к длительности одного импульса), а также значительное падение подвижности дислокаций при увеличении скважности и неизменной длительности импульса. Кроме того, обработка результатов работ [9, 10] показала, что движение дислокаций в кристаллах с высокими пайерлсовскими барьерами действительно происходит путем последовательного перемещения из одной пайерлсовской долины в соседнюю. Целью нашей работы является численное моделирование движения дислокаций в пайерлсовском рельефе в присутствии примесей. Мы попытались проверить правильность существующих представлений о характере динамики дислокаций в присутствии дефектов. В работе одного из авторов [11] было показано, что при умеренных внешних напряжениях примеси и дефекты могут играть определяющую роль в формировании подвижности дислокаций. В частности, если внешние напряжения таковы, что величина $q = 2T\sigma / cV^2 < 1$ (T — температура, σ — приложенное внешнее напряжение, V — энергия взаимодействия дефекта с дислокацией, c — концентрация дефектов), то дрейф кинков вдоль дислокации становится нелинейным по времени (сублинейный закон): $x \sim t^q$ (x — смещение кинка за время t) и, как следствие, подвижность дислокации резко падает. Мы провели в числе прочего исследование динамики дислокаций под действием импульсной нагрузки и нашли, что падение подвижности при увеличении частоты импульсов действительно может объясняться $x \sim t^q$ эффектом.

В качестве модели дислокации при численном моделировании использовалась модель упругой струны, уравнение движения которой можно записать в разностном виде следующим образом:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + [c_1 (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) + V(u_i^n) + f + \xi_i^n] \Delta t, \quad (1)$$

где u_i^n — смещение i -го элемента дислокационной линии в момент времени t , u_i^{n+1} — смещение в момент времени $t + \Delta t$, Δt — шаг по времени, $c_1 = \chi \cdot \Gamma$, $f = F \cdot \Gamma$, $V(u_i^n) = \Gamma \cdot dV/du$. Здесь предполагается, что в начальный момент времени дислокация лежит вдоль оси x ; потенциал $V = V_0 \sin(2\pi u/a) + V_a$; V_0 — высота пайерлсовского рельефа; Γ — кинетический коэффициент; χ — линейное натяжение дислокации; $F(t)$ — внешняя сила, действующая на единицу длины дислокации; $V_a(x, u)$ — случайная величина, описывающая искажение пайерлсовского рельефа дефектами; a — постоянная решетки. Последнее слагаемое в скобках в правой части (1) представляет собой ланжевендовскую силу, являющуюся источником тепловых флуктуаций дислокационной линии. Численные значения коэффициентов в (1) выбирались близкими к реальным экспериментальным значениям. Внешнее поле задавалось либо постоянным, либо в виде прямоугольных импульсов с периодом T и длительностью t_p .

Ланжевендовскую силу ξ мы имитировали последовательностью импульсов случайной амплитуды с нормальным распределением и дисперсией $\sim T$. Промежуток между импульсами, соответствующий времени столкновения данного элемента дислокации с фононами τ_{ph} , выбирался из экспоненциального распределения со средним τ_{ph} . Дефекты помещались в случайно выбранные узлы решетки с вероятностью $\bar{c} = ac$ (где a — период решетки, c — объемная концентрация примесей) и считались короткодействующими (действующими лишь на расстояниях, не больших периода решетки). В ходе численного эксперимента моделировалось движение дислокаций длиной $N = 1000 \div 4000$ периодов решетки как при наличии, так и в отсутствие дефектов в постоянном и импульсном внешнем поле. При этом вычислялись средняя скорость дислокации, концентрация кинков N_k и подвижность отдельного кинка.

Для проверки численной модели и программы мы провели исследование движения дислокации в отсутствие дефектов и сопоставили результаты нашего машинного эксперимента при температуре $T = 0.25 U_0$ с ана-

литического результатом Бюттикера и Ландауэра [12], изучавших модель (I) без дефектов. При этом численные и аналитические [12] результаты оказались совпадающими с хорошей точностью. Далее снималась зависимость скорости движения дислокации v и концентрации кинков N_k от величины внешнего постоянного поля (сплошная линия на рис. 1). Согласно существующим представлениям, при большой внешней силе зависимость концентрации кинков и скорости дислокации от силы будет экспоненциальной [1]. При силе $F \ll U_0$ концентрация кинков на дислокации слабо зависит от силы и скорость ее скольжения просто пропорциональна F (линейный режим). Результаты численного эксперимента хорошо согласуются с этими представлениями, причем переход от экспоненциального режима к линейному происходит при $F/U_0 \approx 0.12$, что хорошо согласуется с теоретическими оценками [1]. Сначала мы исследовали зависимость v и N_k от частоты импульсной внешней силы (в нелинейном режиме) при

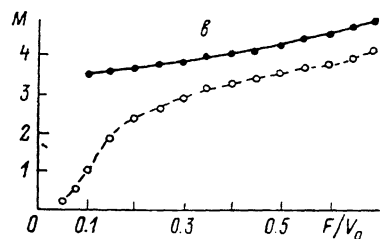
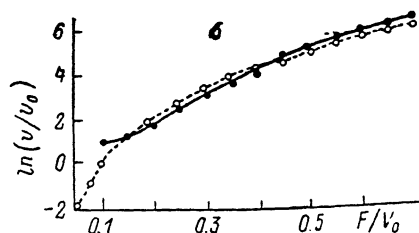
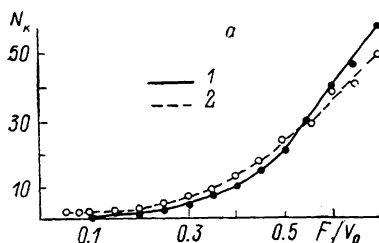


Рис. 1. Зависимость концентрации кинков N_k (на 1000 постоянных решеток) (а), скорости скольжения дислокации v (б) и подвижности кинка $M = v/(N_k F)$ (в) от величины внешней силы F в кристаллах без примесей (1) и с примесями (2).

$c=0.5$, $V_d=0.5 V_0$, сила нормирована на высоту барьера Пайерлса. За единицы скорости и подвижности взяты их значения при $F=0.1 V_0$.

постоянной скважности импульсов 1:1 (рис. 2). Скорость движения дислокации под действием высокочастотной силы оказалась приблизительно равна скорости ее движения под действием низкочастотной силы, вдвое меньшей амплитуды, как и следовало ожидать. Отметим, что в данном случае (отсутствие дефектов, нелинейный режим) зависимость скорости дислокации от частоты полностью определяется частотной зависимостью концентрации кинков.

Зависимость концентрации кинков, скорости и подвижности дислокации от внешней силы в кристалле с дефектами показана на рис. 1 штриховой линией. В интервале внешних напряжений $0.15U_0 < F < 0.4U_0$ скорость дислокации в кристаллах с дефектами больше, а вне этого интервала меньше, чем в бездефектном кристалле (рис. 1, б). Такое поведение скорости легко объяснить в рамках модели [11]. При силах, близких к пайерлсовским $0.4U_0 < F < U_0$, когда энергия образования перегиба достаточно мала и дефекты не вносят заметного вклада в генерацию перегибов, роль дефектов сводится к слабому торможению кинков, распространяющихся вдоль дислокации. При $F < 0.4U_0$ основными поставщиками кинков становятся уже места скопления дефектов, где пайерлсовский барьер понижен. Таким образом, при $F < 0.4U_0$ дефекты стимулируют генерацию кинков (рис. 1, а), торможение кинков еще невелико и скорость дислокации возрастает по сравнению с ее значением в бездефектном кристалле. При дальнейшем уменьшении внешней силы в кристаллах с дефектами происходит, согласно [11] (при некотором пороговом значении силы $F = F_0$, когда $q = 2F_0 T/cV^2 = 1$), резкое изменение режима движения

перегибов вдоль дислокации — оно становится сублинейным. Наблюдаемое при $F \approx 0.15V_0$ резкое падение подвижности (и, следовательно, скорости) дислокации в кристаллах с дефектами (рис. 1, *в*) есть следствие указанного замедления распространения кинков при $F < 0.15U_0$. Экспериментальное значение параметра $q=1.2$ хорошо согласуется с предсказанным ($q=1$). Ясно видно, что падение подвижности приходится на интервал напряжений, в котором концентрация кинков N_k уже не зависит от приложенной силы, т. е. на область линейного режима.

Для исследования влияния дефектов на движение дислокации в условиях нестационарной нагрузки в нелинейном режиме к дислокации была приложена переменная внешняя сила $F(t)$, имевшая вид последовательности прямоугольных импульсов с амплитудой $F=0.5U_0$. Сквасность (отношение длительности промежутка между импульсами к длительности

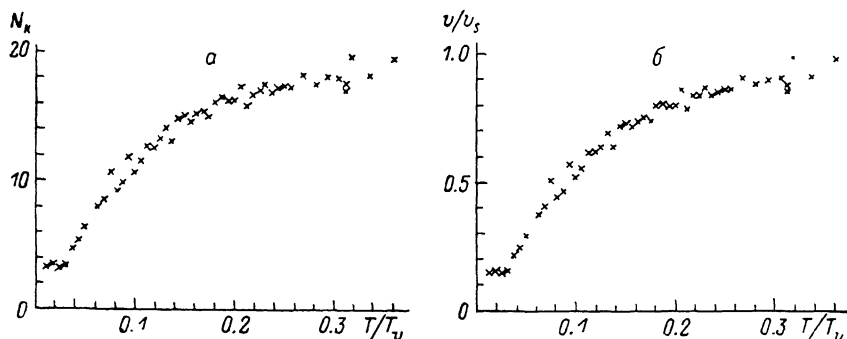


Рис. 2. Зависимость концентрации кинков (*а*) и скорости скольжения дислокации (*б*) от периода внешней импульсной силы в кристалле без примесей при $T=0.5V_0$, $F=0.5V_0$.

Единицы измерения те же, что и на рис. 1, кроме периода импульсов, нормированного на время прохождения дислокацией расстояния в 1 постоянную решетку под действием стационарной внешней силы.

импульса) была выбрана равной 1. Именно такой вид импульсной нагрузки использовался в работах [9, 10]. Температура T выбиралась равной $T=V_0/3$, концентрация и потенциал дефектов соответственно $c=0.3$, $U_d = \pm 0.1U_0$ (знак случайный). Оказалось, что зависимость скорости от частоты как в присутствии дефектов, так и в бездефектном кристалле фактически повторяет соответствующие зависимости для концентрации кинков N_k . При этом концентрация кинков и, следовательно, скорость дислокации в присутствии дефектов возрастают приблизительно в 1.5 раза. Полученные результаты показали, что роль дефектов в нелинейном режиме сводится к увеличению скорости генерации кинков: дислокации легче выбрасывать «языки» в соседнюю долину в местах скопления дефектов, понижающих пайерлсовский барьер. Общего же характера зависимости скорости дислокации от длительности импульса дефекты не изменяют.

В линейном режиме, как показано выше, заметную роль начинает играть торможение кинков дефектами. Согласно нашим представлениям, особо важным этот эффект должен оказаться для движения дислокаций под действием импульсной нагрузки в линейном режиме, соответствующем условиям экспериментов [9, 10]. Зависимость концентрации кинков и скорости дислокации от периода импульсов при их постоянной амплитуде и сквасности в присутствии дефектов показана на рис. 3. При этом амплитуда импульсной силы выбиралась чуть выше порогового значения для стационарной силы ($F=0.1U_0$). Видно, что при низкой частоте импульсов скорость скольжения дислокации и концентрация кинков такие же, как и в случае стационарной силы (в пересчете на активное время). Однако при высоких частотах импульсной силы наблюдается резкое падение скорости движения дислокации с ростом частоты. Интересной особенностью этого падения скорости дислокации является то, что оно не сопровождается

ется (в отличие от линейного режима) уменьшением концентрации кинков. Напротив, последняя даже возрастает с ростом частоты. Таким образом, приведенные данные свидетельствуют о том, что падение скорости дислокации вызывается именно торможением кинков дефектами.

Кроме частотных зависимостей скорости скольжения дислокации и средней концентрации кинков, мы также получили зависимости этих величин от скважности импульсной силы при постоянной длительности импульсов. Эти зависимости (не пересчитанные на активное время) при-

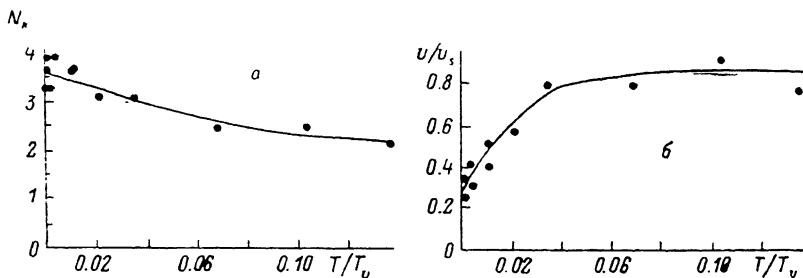


Рис. 3. Зависимость концентрации кинков (а) и скорости дислокации (б) от периода импульсной внешней силы в кристалле с примесями ($c=0.5$, $V_d=0.5V_0$).

ведены на рис. 4 и хорошо воспроизводят результаты экспериментов [9, 10]. Следует отметить, что при увеличении скважности также имеет место (как видно из рис. 4) накопление кинков у препятствий. Это означает, что движение дислокации при большой скважности импульсной нагрузки фактически нестационарно.

Перейдем теперь к обсуждению результатов численного моделирования. Мы исследовали влияние дефектов на динамику дислокации в пайерлсовском рельефе в условиях стационарной и нестационарной нагрузок. Было показано, что в условиях стационарной нагрузки дефекты приводят к уменьшению подвижности дислокации в линейном режиме ($F < < 0.2V_0$) за счет торможения кинков дефектами и к увеличению подвиж-

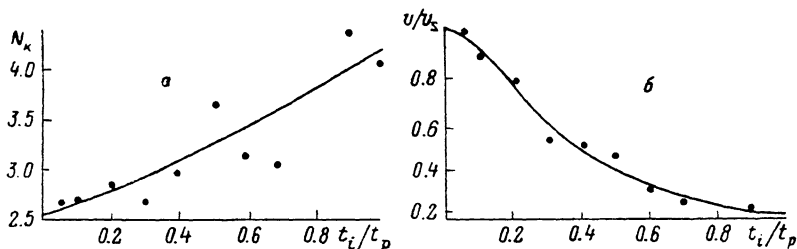


Рис. 4. Зависимость концентрации перегибов (а) и скорости движения дислокации (б) от длительности паузы между импульсами, отнесенной к постоянной длительности импульса, в кристалле с дефектами ($c=0.5$, $V_d=0.5V_0$).

ности дислокаций (разупрочнению) при больших значениях $F > 0.2V_0$ внешней нагрузки вследствие увеличения скорости генерации кинков в местах скопления дефектов, благоприятствующих зарождению двойных перегибов. Значение силы, при которой наблюдается резкое падение подвижности дислокации, оказалось близким к силе F_0 , при которой происходит переход от линейного $x \sim t$ к сублинейному $x \sim t^q$, $q < 1$ закону движения кинков, предсказанному [11]. Исследование зависимости скорости отдельного кинка от постоянной внешней силы показало, что при прохождении порога $F=F_0$ характер движения кинка действительно радикально меняется и большую часть времени кинк проводит в ловушках (местах скопления дефектов). Было показано, что дефекты не меняют характера движения дислокаций в условиях нестационарной нагрузки при больших значениях амплитуды импульсов, соответствующих нели-

нейному режиму. При малых же значениях амплитуды внешней силы, близких к значению F_0 — порогу возникновения сублинейного движения кинков, — наблюдается резкое падение скорости движения дислокаций с увеличением частоты импульсов. Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что наблюдавшееся в экспериментах [9, 10] резкое падение подвижности дислокаций при повышении частоты импульсов внешней нагрузки может быть обусловлено торможением кинков дефектами, а не подавлением генерации кинков на высоких частотах. Последний эффект в линейном режиме вообще отсутствует. Действительно, скорость движения дислокации в бездефектном кристалле есть [1, 2]

$$v \sim uN_k \sim u \exp(-W(F)/T), \quad (2)$$

где u — скорость кинков; $W(F)$ — энергия образования двойного перегиба, зависящая от постоянной приложенной внешней силы F .

Если частота внешней силы много меньше средней частоты зарождения двойного перегиба, соответствующей постоянной силе той же величины, то

$$v_{ij} \sim \langle \exp(-W(F(t))/T) \rangle, \quad (3)$$

где угловые скобки означают среднее по периоду. В обратном же предельном случае высоких (т. е. много больших частоты зарождения двойного перегиба) частот

$$v_{hf} \sim \exp(-W(F)/T). \quad (4)$$

Переход же от v_{hf} к v_{if} должен происходить достаточно плавно (рис. 2). В линейном же режиме энергия образования двойного перегиба W вообще не зависит от приложенной нагрузки, поэтому после пересчета на активное время нагружения $v_{if} = v_{hf}$. Другими словами, в бездефектном кристалле в линейном режиме при переходе от высоких (в указанном смысле) частот внешней нагрузки к низким трудно ожидать сколько-нибудь заметного изменения скорости дислокации.

Отметим, что в нелинейном режиме после пересчета на активное время, как видно из (3), (4), должно выполняться соотношение

$$v_{if}/v_{hf} = v(F)/v(F/2), \quad (5)$$

где $v(F)$ — скорость дислокации в постоянном внешнем поле F , равном амплитуде приложенного импульса. Сопоставляя результаты, полученные для движения в условиях стационарной нагрузки и отсутствия дефектов, с результатами рис. 2, б, нетрудно убедиться, что соотношение (6) выполняется с хорошей точностью.

Все значения параметров, использованные нами при численном моделировании, за исключением температуры, близки к реальным значениям, существующим в полупроводниковых кристаллах с высокими барьерами Пайерлса. Значения температуры, использовавшиеся при моделировании, были существенно выше температуры реального эксперимента. Выбор таких значений T определялся возможностями имевшейся в нашем распоряжении вычислительной техники. В то же время можно ожидать, что при более низких температурах, близких к реальным, продемонстрированные нами зависимости (порог подвижности дислокаций, частотная зависимость скорости дислокаций в линейном режиме, нелинейность в движении кинка) окажутся гораздо более резкими и ярко выраженными.

Авторы благодарны В. И. Никитенко, Б. Фарберу и В. Я. Кравченко за чрезвычайно полезные дискуссии и обсуждение результатов работы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Lothe J., Hirth J. P. Phys. Rev., 1959, vol. 115, N 3, p. 543—552.
- [2] Казанцев П. А., Покровский В. Л. ЖЭТФ, 1970, т. 58, № 2, с. 677.
- [3] Patel J. R., Chaudhuri A. R. Phys. Rev., 1966, vol. 143, N 2, p. 601—608.

- [4] *Erofeev V. N., Nikitenko V. I., Osvenskii V. B.* Phys. St. Sol., 1969, vol. 35, N 1, p. 79—88.
- [5] *Ерофеев В. Н., Никитенко В. И.* ФТТ, 1971, т. 13, № 1, с. 146—151.
- [6] *Петухов Б. В.* ФТТ, 1971, т. 13, № 5, с. 1445—1449.
- [7] *Петухов Б. В., Сузарев В. Я.* ФТТ, 1980, т. 22, № 2, с. 456—462; 1981, т. 23, № 4, с. 1093—1096.
- [8] *Петухов Б. В.* ФТТ, 1983, т. 25, № 6, с. 1822—1829.
- [9] *Никитенко В. И., Фарбер Б. Я., Иунин Ю. Л.* Письма в ЖЭТФ, 1985, т. 41, № 3, с. 103—105.
- [10] *Farber B. Ya., Iunin Yu. L., Nikitenko V. I.* Phys. St. Sol. (a), 1986, vol. 97, N 2, p. 469—478
- [11] *Vinokur V. M.* J. Physique, 1986, vol. 47, N 9, p. 1425—1429.
- [12] *Buttiker M., Landauer R.* Phys. Rev., 1981, vol. A23, N 3, p. 1397—1410.

Институт физики твердого тела АН СССР
Черноголовка
Московская область

Поступило в Редакцию
29 июля 1987 г.
В окончательной редакции
25 марта 1988 г.