

## Коллективные колебания решетки винтовых дислокаций как пример динамики акустической сверхрешетки

А.М. Косевич

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины  
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина  
E-mail: kosevich@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 17 марта 2003 г.

Сформулированы уравнения малых колебаний дислокационной решетки в простой однокомпонентной модели. Решетка образована периодической системой параллельных прямолинейных винтовых дислокаций. Описаны длинноволновые коллективные колебания, среди которых обнаружены колебания, подобные плазменным в системе электрических зарядов. Указана возможность возникновения щели в частотном спектре вблизи аналога плазменной частоты.

Сформульовано рівняння малих коливань дислокаційної ґратки у простій однокомпонентній моделі. Ґратку побудовано періодичною системою паралельних прямолінійних гвинтових дислокацій. Описано довгохвильові колективні коливання, серед яких виявлено коливання типу плазмових у системі електричних зарядів. Зазначено можливість виникнення щілини у частотному спектрі поблизу аналога плазмової частоти.

PACS: 61.72.Lk

Последние годы множество статей было посвящено динамике решетки вихрей, особенно в теории сверхпроводимости (решетки вихрей Абрикосова — см., например, обзоры [1,2]). Винтовые дислокации в кристалле аналогичны вихрям, однако динамика и взаимодействие дислокаций отличаются от таковых для вихрей. Винтовые прямолинейные дислокации взаимодействуют подобно прямолинейным электрическим зарядам, и можно ожидать появления плазменных колебаний в динамике дислокационной решетки [3,4]. К сожалению, авторы публикации [5] пропустили рассмотрение плазменных колебаний в системе прямолинейных дислокаций.

В настоящей работе решетка параллельных винтовых дислокаций рассмотрена на основе простой модели. Использована однокомпонентная *скалярная модель* колебаний кристалла, в которой предполагается, что все атомы смещаются только в одном направлении [6]. Такая модель дает правильное описание упругого поля, созданного в изотропной среде параллельными винтовыми дислокациями. Решение подобной задачи в реальной векторной

схеме смещений, в принципе, может быть найдено аналитически, но оно позволяет получить закон дисперсии дислокационной решетки только в неявной форме. При этом в интересующей нас проблеме колебаний плазменного типа такое рассмотрение не дает качественно новых результатов по сравнению с полученными в скалярной модели.

Под дислокационной решеткой мы будем понимать систему параллельных винтовых дислокаций, ориентированных вдоль оси  $z$  и пересекающих плоскость  $xy$  в дискретных периодически расположенных точках, образуя  $2D$  решетку, элементарная ячейка которой имеет площадь  $S_0$ :  $S = NS_0$ , где  $S$  — площадь сечения образца в плоскости  $xy$ , а  $N$  — число дислокаций. Координаты указанных точек в равновесной решетке

$$\mathbf{x}(\mathbf{n}) = \mathbf{R}_n \equiv \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha} n_{\alpha}, \quad \mathbf{n} = (n_1, n_2, 0), \quad (1)$$

где  $\mathbf{a}_{\alpha}$  ( $\alpha = 1, 2$ ) — основные трансляционные векторы решетки ( $a_{\alpha} \sim a$  — расстояние между соседними дислокациями).

Если имеются прямолинейные винтовые дислокации, направленные вдоль оси  $z$ , то упругое поле удобнее описывать не смещением  $w$  вдоль оси  $z$  как функцией координат и времени, а дисторсией и скоростью смещений. Для описания сдвигового поля винтовых дислокаций достаточно ввести вектор дисторсии  $\mathbf{h}$  и скорость  $v$ :

$$\mathbf{h} = \text{grad } w \quad (\mathbf{h}_i = \nabla_i w = \frac{\partial w}{\partial x_i}), \quad i = 1, 2, 3;$$

$$v = \frac{\partial w}{\partial t}. \quad (2)$$

Напряжение будет характеризоваться вектором  $\boldsymbol{\sigma}$ , причем  $\sigma_i = Gh_i$ , где  $G$  — модуль сдвига.

Тогда волновое уравнение для упругого поля (1) принимает вид

$$\text{div } \mathbf{h} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial v}{\partial t} = 0, \quad (3)$$

где  $c^2 = G/\rho$ , а  $\rho$  — плотность вещества (масса единицы объема).

Присутствие дислокации порождает новое уравнение

$$\text{rot } \mathbf{h} = -\boldsymbol{\eta}, \quad (4)$$

где  $\boldsymbol{\eta}$  — плотность дислокаций, которая в случае отдельной дислокации, пересекающей плоскость  $z = \text{const}$  в точке  $\mathbf{x}_0 = (x_0, y_0)$ , равна

$$\boldsymbol{\eta} = \tau b \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = \tau b \delta(x - x_0) \delta(y - y_0);$$

здесь  $b$  — величина вектора Бюргерса,  $\boldsymbol{\tau}$  — вектор касательный к дислокации — для статической дислокации его удобно выбрать так:  $\boldsymbol{\tau}(0, 0, -1)$ . Плотность дислокаций в решетке

$$\boldsymbol{\eta} = \tau b \sum_{\mathbf{n}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}). \quad (5)$$

Если дислокации движутся (колеблются), то уравнения (3) и (4) не меняются, однако появляется новая динамическая переменная дислокационной структуры — вектор смещения дислокационной линии в плоскости  $xy$ :  $\mathbf{u} = (u_x, u_y, 0)$  (конечно,  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{n}, t)$  для  $\mathbf{n}$ -дислокации), который определяет мгновенную координату элемента дислокации

$$\mathbf{x}_{\mathbf{n}} = \mathbf{R}(\mathbf{n}) + \mathbf{u}(\mathbf{n}, t).$$

Зависимость вектора смещения  $\mathbf{u}$  от времени определяет скорость элемента дислокации  $\mathbf{V}$ :  $V_{\alpha} = \partial u_{\alpha} / \partial t$ .

Наличие поля скоростей дислокаций порождает новую динамическую характеристику системы дислокаций — плотность потока дислокаций  $\mathbf{j}$ . Введение плотности потока дислокаций есть узловым момент построения динамического упругого поля

движущихся дислокаций. Вектор  $\mathbf{j}$  возникает в следующем динамическом уравнении [3,6]:

$$\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} = \text{grad } v + \mathbf{j}. \quad (6)$$

Из сравнения (6) и (4) вытекает условие

$$\frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial t} + \text{rot } \mathbf{j} = 0 \quad (7)$$

Плотность потока, созданного отдельной дислокацией, в линейном по  $\mathbf{u}$  и  $\mathbf{V}$  приближении определяется формулой:

$$j_{\alpha} = b \varepsilon_{\alpha\beta} V_{\beta}(\mathbf{n}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}(\mathbf{n})), \quad (8)$$

где матрица  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  равна

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (9)$$

Плотность дислокационного потока в решетке есть сумма величин (8) по всей решетке

$$j_{\alpha} = b \varepsilon_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{n}} V_{\beta}(\mathbf{n}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}(\mathbf{n})). \quad (10)$$

Собирая вместе уравнения (3), (4) и (6), мы получаем полную систему уравнений, описывающих упругие поля в образце, если известны распределения дислокаций и их потоков. Чтобы замкнуть эту систему, необходимо записать уравнения движения дислокаций под действием упругих полей. Простейшая форма такого уравнения [3]:

$$m \frac{\partial V_{\alpha}}{\partial t} = f_{\alpha} + S_{\alpha}, \quad (11)$$

здесь  $m$  — эффективная масса единицы длины дислокации:

$$m = \frac{\rho b^2}{4\pi} \log \left( \frac{R_0}{r_0} \right), \quad (12)$$

где  $R_0$  — это либо длина дислокационной линии, либо расстояние между дислокациями  $a$  (в нашем случае);  $r_0$  — межатомное расстояние.  $\mathbf{f}$  — сила упругого взаимодействия с остальными дислокациями, которая равна

$$f_{\alpha} = b \varepsilon_{\alpha\beta} \sigma_{\beta} = b G \varepsilon_{\alpha\beta} h_{\beta}. \quad (13)$$

В случае искривленной дислокационной линии выражение (13) включает силу самодействия разных элементов той же дислокации, пропорциональную кривизне дислокационной линии в данной точке. При анализе рассматриваемых нами колебаний искривление дислокаций не учитывается, и сила (13) включает только напряжения, созданные остальными дислокациями.

$\mathbf{S}$  — сила, обусловленная дискретностью решетки, включая диссипативные силы. Интересуясь законом дисперсии малых колебаний, мы пренебрежем последними и возьмем силу  $\mathbf{S}$  в виде

$$\mathbf{S} = -m\omega_0^2 \mathbf{u}, \quad (14)$$

где  $\omega_0$  — частота колебаний дислокационной струны в долине рельефа Пайерлса.

Изучим длинноволновые колебания дислокационной решетки, полагая длину волны колебаний значительно превышающей период решетки  $a$  ( $ak \ll 1$ ). В этом приближении распределение дислокаций можно считать непрерывным, характеризуя его плотностью  $n(\mathbf{x}, t)$ . В равновесии  $n = n_0$ , где  $n_0 = 1/S_0 = \text{const}$ . Динамика решетки определяется в основном средней плотностью дислокационного потока  $\mathbf{j}$ , который в линейном приближении имеет отличные от нуля компоненты

$$j_\alpha(\mathbf{x}, t) = bn_0 \varepsilon_{\alpha\beta} V_\beta(\mathbf{x}, t), \quad \alpha = 1, 2, \quad (15)$$

где  $\mathbf{V}$  — средняя скорость дислокаций. Скорость  $\mathbf{V}$  должна определяться уравнением движения дислокации (11). Перепишем уравнение движения (11), используя (13) и (14):

$$\frac{\partial V_\alpha}{\partial t} + \omega_0^2 u_\alpha = \frac{bG}{m} \varepsilon_{\alpha\beta} h_\beta. \quad (16)$$

Продифференцируем (16) по времени и воспользуемся уравнением (6), а также выражением (15). После элементарных вычислений получаем

$$\frac{\partial^2 V_\alpha}{\partial t^2} + (\omega_0^2 + \omega_{pl}^2) V_\alpha = \frac{bG}{m} \varepsilon_{\alpha\beta} \frac{\partial v}{\partial x_\beta}, \quad (17)$$

где

$$\omega_{pl}^2 = \frac{b^2 G n_0}{m}. \quad (18)$$

Частота  $\omega_{pl}$  — это аналог плазменной частоты.

Продифференцируем теперь уравнение (3) по времени и снова воспользуемся соотношением (6):

$$\left( \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) v = -bn_0 \varepsilon_{\alpha\beta} \nabla_\alpha V_\beta. \quad (19)$$

Пара уравнений (17) и (19) описывает коллективную динамику дислокационной решетки и упругого поля. Легко заметить, что уравнение для «продольных» колебаний решетки отделяется. Действительно, для переменной величины  $P = \text{div} \mathbf{V} = \nabla_\alpha V_\alpha$  из уравнения (17) следует

$$\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + \omega_l^2 P = 0, \quad \omega_l^2 = \omega_0^2 + \omega_{pl}^2, \quad (20)$$

где величина  $\omega_l$  играет роль частоты продольных колебаний решетки.

Продольная составляющая средней скорости дислокации потенциальна:  $V_\alpha^{(l)} = \nabla_\alpha Q$ ,  $\alpha = 1, 2$ . Учитывая последнее, мы видим, что «продольные» колебания упругого поля  $v = v(z)$  не зависят от колебаний решетки. Итак, одна ветвь коллективных колебаний (мы назвали ее ветвью «продольных» колебаний) отвечает независимым колебаниям упругого поля  $v = v(z, t)$  с законом дисперсии  $\omega = ck_z$  и колебаниям сжатия–растяжения дислокационной решетки  $P = P(z, t)$  с плазменным законом дисперсии  $\omega = \omega_l$ .

Для описания «поперечных» колебаний введем переменную

$$M = bn_0 (\text{rot} \mathbf{V})_z \equiv bn_0 \varepsilon_{\alpha\beta} \nabla_\alpha V_\beta. \quad (21)$$

Уравнение для этой переменной следует из (17):

$$\frac{\partial^2 M}{\partial t^2} + \omega_l^2 M = -\omega_{pl}^2 \frac{\partial^2 v}{\partial x_\alpha^2}. \quad (22)$$

«Поперечные» коллективные колебания описываются уравнением (22) и уравнением, вытекающим из (19) для функции  $v(x, y, t)$ :

$$\left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} \right) v = M. \quad (23)$$

Из условий совместности (22) и (23) вытекает закон дисперсии для волны с волновым вектором  $\mathbf{k} (k_x, k_y, 0)$ :

$$\omega^4 - (\omega_l^2 + c^2 k^2) \omega^2 + \omega_0^2 c^2 k^2 = 0. \quad (24)$$

Уравнение (24) относительно  $\omega^2$  имеет два корня, отвечающих низкочастотным и высокочастотным колебаниям. Не выписывая тривиальных выражений для этих решений в радикалах, отметим следующее.

*Низкочастотная ветвь.* При  $ck \ll \omega_0$  дисперсионное соотношение имеет вид

$$\omega = \frac{\omega_0}{\omega_l} ck. \quad (25)$$

Колебания характеризуются скоростью поперечного звука, величина которой меньше скорости звука в среде без дислокаций  $c$ .

*Высокочастотная ветвь.* При  $ck \gg \omega_l$  инерционная дислокационная решетка не вовлекается в движение, и наблюдаются только колебания упругого поля с обычным звуковым законом дисперсии  $\omega = ck$ . Наконец, в длинноволновом пределе ( $ck \ll \omega_0$ ) получаем

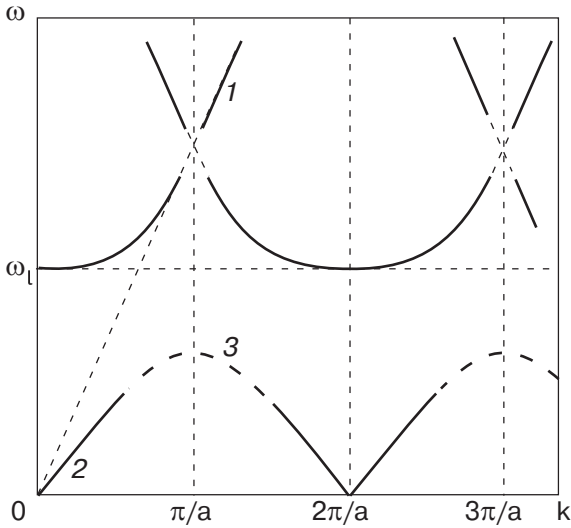


Рис. 1. Схема закона дисперсии: 1 —  $\omega = ck$ , 2 — график зависимости (26), 3 — ожидаемый вид графика в коротковолновой области.

$$\omega^2 = \omega_l^2 + \left(\frac{\omega_{pl}}{\omega_l}\right)^2 c^2 (k_x^2 + k_y^2). \quad (26)$$

Сопоставляя графики обеим ветвям закона дисперсии, нужно быть особенно внимательным, отражая низкочастотную ветвь. Дело в том, что закон дисперсии (24) справедлив при  $\lambda \gg a$  (или  $ak \ll 1$ ). При больших  $k$  проявляется периодическая зависимость закона дисперсии решетки от квазиволнового вектора с периодом обратной решетки  $\mathbf{G}$ :  $\omega(\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k} + \mathbf{G})$ . Поэтому полученный закон дисперсии справедлив фактически во всех малых окрестностях любых векторов обратной решетки  $\mathbf{g}$ , т.е. при  $a|\mathbf{k} - \mathbf{g}| \ll 1$ . Следовательно, мы вправе рисовать лишь части графиков, изображенные сплошными жирными линиями 1 и 2 на рис.1 для некоторого «хорошего» направления в обратной решетке. Продолжение графиков нижней ветви при  $k \sim \pi/a$ , а также намечающееся пересечение графиков верхней ветви при  $k = (p + 1/2)\pi/a$ ,  $p = 1, 2, 3, \dots$  может быть описано лишь на основе изучения динамики дискретной дислокационной решетки. Но это предмет отдельного исследования. Мы можем лишь утверждать, что графики нижней ветви замыкаются кривыми, изображенными схематически штриховыми линиями 3 на рис. 1. Имеется ли полоса запрещенных частот между верхней и нижней ветвями (щель в спектре), на основе длинноволнового рассмотрения сказать невозможно. Однако можно ут-

верждать, что в частотном спектре есть предельная частота  $\omega_l$ , отмечающая край верхней ветви колебаний, которая заведомо может проявляться в резонансных акустических свойствах кристалла с дислокационной решеткой. Важной отличительной особенностью этой частоты является зависимость ее положения от плотности дислокаций в решетке (от величины периода решетки). Экспериментальное обнаружение указанной резонансной зависимости предельной частоты было бы прямым подтверждением плазменно подобных коллективных колебаний в дислокационной решетке.

Автор благодарен О.В. Чаркиной за помощь в оформлении статьи и Ali Najafi и Ramin Golestani, поскольку ознакомление с рукописью их статьи обратило внимание автора на рассмотренную проблему, а также В.Д. Надику за полезные замечания.

1. G. Blatter, M.V. Feigel'man, V.B. Geshkenbein, A.I. Larkin, and V.M. Vinokur, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125 (1994).
2. Ernst Helmut Brandt, *Rep. Prog. Phys.* **58**, 1465 (1995).
3. А.М. Косевич, *Дислокации в теории упругости*, Наукова думка, Киев (1978); А.М. Kosevich, *Crystal Dislocations and the Theory of Elasticity*, in: *Dislocations in Solids*, F.R.N. Nabarro (ed.), V. 1, North-Holland Publ., Amsterdam, (1979), p. 31.
4. А.М. Косевич, М.Л. Поляков, *ФТТ* **21**, 2941 (1979).
5. В.В. Николаев, А.Н. Орлов, Г.Г. Талуц, *ФММ* **23**, 424 (1967).
6. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)*, Вища школа, Харьков (1988); Arnold M. Kosevich, *The Crystal Lattice. Phonons, Solitons, Dislocations*, WILEY-VCH, Berlin (1999).

### Collective lattice vibrations of screw dislocations as an example of the dynamics of acoustic superlattice

A.M. Kosevich

Equations of small vibrations of a dislocation lattice are proposed on the basis of a simple one component model. The lattice consists of a periodically arranged set of parallel screw dislocations. The longwave collective vibrations of plasmon type are described. It is shown that there may occur a gap in the frequency spectrum near the plasmon frequency.