

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ

ЕРЕВАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

АРАКЕЛЯН МИЛЕТА МАРТИРОСОВНА

**РАЗМЕРНО КВАНТОВАННЫЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В
КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

Специальность 01.04.07 – « Физика конденсированного состояния»

Диссертация на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

ЕРЕВАН - 2018

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	5
ЧАСТЬ I. ПОГЛОЩЕНИЕ УЛЬТРАЗВУКА И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ КВАЗИЧАСТИЦ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ.....	18
Глава 1. Обзор литературы по теории поглощения ультразвука и энергетического спектра квазичастиц в твердом теле.....	18
1.1. Квантово-размерные структуры.....	18
1.2. Взаимодействие электрона с фононами в присутствии электромагнитной волны.....	20
1.3. Парамагнитный резонанс.....	23
1.4. Связанные состояния возбуждений.....	26
1.5. Адиабатическое приближение и фононный спектр.....	28
1.6. Некоторые нелинейные эффекты, возникающие при распространении сильной звуковой или электромагнитной волны.....	30
Глава 2. Линейная и нелинейная теория поглощения ультразвука и энергетический спектр квазичастиц в условиях размерного квантования.....	33
2.1. Электронное поглощение ультразвука в поле сильной электромагнитной волны	33
2.2. Особенности распространения звука в одномерно квантованных средах в условиях электронного парамагнитного резонанса.....	38
2.3. Поглощение ультразвука в поле электромагнитной волны при нелинейном электрон-фононном взаимодействии	44
2.4. Фононный спектр.....	53
2.5. Связанные состояния электрона и оптического фонона с учетом электрон-фононного взаимодействия	57
Выводы к главе 2.....	62
ЧАСТЬ II. ДИНАМИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ И РЕЖИМЫ ИХ РАЗВИТИЯ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ.....	64

Глава 3. Солитонная концепция при решении задач физики твердого тела.....	64
3.1. Солитонные решения в полупроводниковой дисперсной среде и моделирование их эволюции	64
3.2. Солитоны в размерно квантованном полупроводнике в присутствии сильной электромагнитной волны	72
3.3. Модель Френкеля- Конторовой	74
3.4. Односолитонное решение синус уравнения Гордона методом обратной задачи рассеяния. Преобразование Беклунда для односолитонного решения.....	76
3.5. Уравнение Кортевега де Фриза.....	77
3.6. Сравнительная характеристика солитонов Френкеля- Конторовой и Кортевега де Фриза. Динамика солитонов Френкеля- Конторовой в полупроводниках	78
Выводы к главе 3.....	86
 Глава4. Некоторые вопросы теории деформации и упрочнения.....	88
4.1. Предельное состояние тонких полупроводниковых пленок в поле сильных звуковых волн.....	91
4.2. Деформационное упрочнение при пластической деформации монокристаллов	95
Выводы к главе 4.....	113
 Глава 5. Характер движения дислокаций Френкеля-Конторовой при различных условиях и возможность управления этим движением.....	114
5.1. Особенности движения и взаимодействия дислокаций Френкеля Конторовой в условиях холодной пластической деформации	114
5.2. Анализ и моделирование процесса движения дислокаций в монокристаллах алюминия	120
5.3. Удаление дислокаций несоответствия из граничных областей гетероперехода	135
5.4. Получение многосолитонных решений уравнения синус-Гордона с	

помощью преобразований Беклунда.....	143
Выводы к главе 5.....	147
 Глава 6. Солитонный подход к решению некоторых задач распространения возмущений в естественных объектах.....	
6.1. Селевая волна как уединенная волна – солитон	150
6.2. Особенности распространения нервного импульса.....	168
Выводы к главе 6.....	174
 ЧАСТЬ III. ИССЛЕДОВАНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ДИНАМИКИ ДИСЛОКАЦИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ ПРИ ВНЕШНЕМ НАГРУЖЕНИИ. РАЗВИТИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ПОДЛОЖЕК ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР КРЕМНИЙ НА САПФИРЕ	
 Глава 7. Режимы формирования дислокационных структур в твердом теле.....	
7.1. Особенности движения дислокаций в полупроводниках	176
7.2. Инверсия отношений скоростей винтовых и 60^0 -ых дислокаций во внешних механических полях для кристаллов кремния с примесями и без примесей	181
7.3. Исследование полей напряжений при радиально симметричном нагружении	187
7.4. Управление структурой тензора напряжений деформированием тугоплавких металлов	191
Выводы к главе 7.....	202
Заключение.....	204
Список литературы.....	209

ВВЕДЕНИЕ

Современные достижения в получении наноструктурированных поверхностей и тонких пленок привели к новому импульсу в развитии такой принципиальной и традиционной уже многие десятилетия отрасли, которая связана с пленочной интегральной микроэлектроникой. При этом новые требования предъявляются к исследованиям, направленным как на изучение процессов получения нового класса полупроводниковых, диэлектрических и металлических наноструктур и тонких пленок, так и на выявление качественных и количественных особенностей физических явлений в подобных объектах.

Речь идет о структурах на поверхности твердого тела и тонких пленках толщиной около 10 нм, в которых реализуются высокая подвижность зарядовых носителей, размерные энергетические состояния с соответствующим разрешением, быстрое действие ряда эффектов, повышенные требования к точности измерения и т.д.

Известно, что при толщине слоев, сравнимой с длиной волны де Бройля квазичастиц, система приобретает качественно новые, квантовые, физические свойства, не имеющие аналогов в массивных образцах. Именно эти квантовые размерные эффекты (КРЭ) и определяют перспективы использования тонкопленочных элементов в современных фотонике и микроэлектронике.

В частности, КРЭ дают возможность создавать устройства с уникальными свойствами, как например: микроэлектронные и криогенные усилители, фотоприемники, переключающие устройства, анализаторы спектра, генераторы монохроматических фононов, элементы для квантовой обработки информации и квантовых вычислений, перестраиваемые по частоте лазеры, тонкопленочные усилители упругих поверхностных волн и т.д. (см. напр. обширную литературу в [1-8]).

Однако, в этой области существует еще много проблем как фундаментального, так и прикладного характера, включая и чисто технологические задачи.

Базовые принципы этой области науки были заложены давно, но не потеряли своей актуальности в главных физических основах. Здесь стоит отметить такие работы как [9-20], являющиеся классикой современной науки и технологий.

Когда речь идет об электрофизических свойствах твердотельной электроники, то необходимо целенаправленно управлять энергетическим спектром зарядов с помощью

различных внешних воздействий. Наиболее часто для управления используют электрические и магнитные поля. Прикладывая внешние поля, меняющие энергетический спектр, можно вызывать контролируемую эволюцию электронной плотности в системе, соответствующую преобразованию физических свойств по заданному/требуемому закону.

Особенное развитие получили многослойные низкоразмерные полупроводниковые гетероструктуры, для которых принципиальное значение имеют качество низкоразмерных слоев, резкость гетерограниц, плотность дислокаций в гетероструктурах. Однако эта давняя проблема возникновения/развития режимов в многослойных низкоразмерных системах еще полностью не решена как в теоретическом, так и в прикладном/технологическом аспектах.

Речь идет, в первую очередь, о волновых процессах, которые являются эффективным средством передачи энергии и информации. Поэтому исследование закономерностей распространения волн различной природы является важной и актуальной задачей. В основе уравнений, описывающих такие процессы, лежат фундаментальные законы природы, в первую очередь – законы сохранения, связанные с симметрией пространства и времени. Именно благодаря этому, такие разные процессы как движение дислокаций в кристаллах, селевые процессы в природе, распространение нервного импульса в организме и др. можно описать одинаковыми по форме дифференциальными уравнениями в частных производных, которые отражают универсальные механизмы процессов, реализующихся в объектах, имеющих такую различную природу.

При этом в перспективе прикладных аспектов акцент делается на разработке нелинейных моделей физических явлений и процессов, ответственных за режимы работы различных устройств, в основе функционирования которых и лежат эти явления. Подобные нелинейные модели требуют решения нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, для которых для ряда задач имеются точные аналитические решения. Для большинства же задач находятся численные решения, которые позволяют выявлять новые особенности развития нелинейных эффектов в исследуемых процессах. К числу наиболее часто используемых для их анализа нелинейных уравнений в частных производных относятся уравнения Кортевега де Фриза и синус Гордона, которые позволяют с общих позиций выявить универсальные

закономерности рассматриваемых многопараметрических динамических явлений (см. напр. [21-25]).

Уравнение Кортевега де Фриза – нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных, описывающее распространение волн малой, но конечной амплитуды, распространяющихся в нелинейной среде с дисперсией. Решением уравнения Кортевега де Фриза является уединенная волна или солитон. Профиль уединенной волны имеет колоколообразную форму, не изменяющуюся в процессе ее распространения. При этом скорость солитона зависит от его амплитуды, а эффективная ширина солитона уменьшается с ростом амплитуды. При столкновении солитонов возможны режимы без неупругих эффектов. Свойство солитонов сохранять свою форму при ряде взаимодействий позволяет назвать солитон «частицеподобным решением» уравнения Кортевега де Фриза, что особенно важно для приложений.

Решения в виде уединенных волн характерны также и для нелинейного уравнения синус Гордона. Оно описывает, например, явления, протекающие в сверхпроводниках, ферромагнетиках, движение дислокаций в кристалле. Уравнение синус Гордона позволяет анализировать задачи с многосолитонным поведением. При этом из одного известного решения методом преобразования Беклунда можно получить новое (неизвестное) решение. Принципиально, что уравнение синус Гордона является полностью интегрируемым в естественных переменных, возникающих при решении обратной задачи рассеяния. Основные свойства уравнения синус Гордона и его решений, имеющих форму нелинейных мод, успешно используются, например, для изучения модели дислокации Френкеля-Конторовой в физике твердого тела.

Существуют разные режимы движения дислокаций. Исследование вкладов различных режимов является актуальным, т.к. позволяет контролировать подвижность дислокаций и выявлять роль различных факторов, влияющих на подвижность дислокаций. При достаточно высоких температурах потенциальный рельеф кристаллической решетки (рельеф Пайерлса) преодолевается термически активационно. При более низких температурах, высоких барьерах Пайерлса или наличии примесей преобладают режимы флуктуционного рождения и разбегания перегибов (солитонов) [26]. При достаточно низких температурах образование и дальнейшее расширение двойных перегибов осуществляется путем квантового туннелирования. Следствием проявления квантовых эффектов является существенное

усиление зависимости скорости дислокации от сил диссипации [27]. Такая зависимость может быть причиной заметного изменения предела текучести и других параметров, характеризующих пластическую деформацию. Механизм диссипации, обусловленный исключительно барьером Пайерлса, сохраняется при самых низких температурах, в отличие, например, от фононных эффектов, которые существенно уменьшаются с понижением температуры [28].

Поэтому представляет интерес дополнить теорию подвижности дислокаций в кристаллическом рельефе областью квантовомеханического механизма движения дислокаций.

Когда речь идет о деформационных процессах в твердом теле, полезной оказывается аналогия с задачами, которые хорошо изучены в такой индустриальной высокотехнологичной области как повышение конструкционной прочности различных изделий. Разработанные методы позволяют создавать новые сплавы с заранее заданными функциональными – физико-механическими свойствами, в т.ч. с использованием термофизических методов упрочнения изделий и деформационного упрочнения. Актуальные и конкурентноспособные для этих задач методы повышения прочности посредством деформационного упрочнения представляют отдельный интерес и для физики твердого тела в целом, для ее разделов, связанных с упругими деформациями, в частности, и получения 3D-изделий сложной топологии, в особенности. Именно достижения в производстве последних подобных структур наиболее интересны для опытно-конструкторских разработок в конечных изделиях для создания современной приборной базы электронных устройств разного масштаба, использующих новые физические принципы функционирования в своем жизненном цикле.

В настоящей диссертационной работе рассмотрена часть этих проблем и приведены результаты исследований по перечисленным ниже направлениям.

По блоку квантово-размерных эффектов и развития динамических структур в полупроводниковых материалах (первый блок).

Электронное поглощение ультразвука в поле сильной электромагнитной волны в условиях размерного квантования.

Особенности распространения звука в одномерно квантованных средах в условиях электронного парамагнитного резонанса.

Электронное поглощение ультразвука в поле сильной электромагнитной волны в условиях размерного квантования при учете нелинейного электрон-фононного взаимодействия.

Нелинейная теория распространения интенсивной звуковой волны в условиях размерного квантования.

Фононный спектр в условиях размерного квантования.

Связанные состояния электрона и оптического фонона в условиях размерного квантования.

Линейная и нелинейная теория поглощения ультразвука в условиях размерного квантования.

Солитонные решения в двумерно квантованной полупроводниковой дисперсной среде и моделирование их эволюции.

Особенности движения и взаимодействия топологических солитонов.

По блоку физических основ и технологических принципов динамических процессов при деформации твердого тела (второй блок).

Проблемы изъятия дислокаций из пограничных слоев гетероструктур.

Квантовые эффекты при движении дислокаций в монокристаллах алюминия.

Движение дислокаций с учетом диссипации.

Экспериментальные исследования конфигураций и закономерностей движения краевых и винтовых дислокаций в полупроводниках.

Расчет тонких полупроводниковых пленок на прочность.

Анализ и моделирование явления деформационного упрочнения в микромасштабе.

Селевые катастрофические процессы в рамках солитонной модели.

Физическая трактовка некоторых процессов распространения нервных импульсов в организме человека с позиции солитонной модели.

Основные результаты и научная новизна выполненных в диссертации работ может быть сформулирована следующим образом.

По первому блоку. Впервые показано, что в поле сильной электромагнитной волны в условиях размерного квантования возможны такие новые эффекты, как усиление звука и индуцированная прозрачность для звуковой волны, зависящие от толщины пленки.

В тонкой полупроводниковой пленке в условиях электронного парамагнитного резонанса на электронах проводимости при определенных частотах возможно усиление звука.

В условиях, обеспечивающих неупругость электрон-фононного взаимодействия, в размерно квантованных средах в присутствии сильной электромагнитной волны имеют место следующие эффекты:

а) из-за взаимодействия электронов с электромагнитной волной и звуком в области скоростей электронов, удовлетворяющих резонансным условиям, наблюдается нелинейный эффект уменьшения коэффициента поглощения с увеличением интенсивности вводимого звука;

б) при определенных условиях может происходить резонансное усиление звука;

в) появляется зависимость коэффициента поглощения от частоты звука, отсутствующая в линейном приближении.

В фононном спектре при учете электрон-фононного взаимодействия при $q_p = 2k_F$ $\text{Re } \omega(\omega - \text{частота фонона})$ остается непрерывной, но ее первая производная по волновому вектору в этой точке расходится – появляются коновские особенности скорости, причем вместо одной особенности возникает целая система особых точек.

Затухание фононов испытывает скачки – гигантские квантовые осцилляции поглощения.

В случае двумерного свободного движения и одномерного квантования электронного и фононного энергетических спектров в электрон-фононной системе (оптические фононы) теоретически доказано существование новой квазичастицы, которая является связанным состоянием электрона и оптического фонона.

Для двумерно квантованной системы в присутствии электромагнитной и продольной звуковой волны доказана и исследована возможность возникновения звукового солитона. Моделированы эволюция возникновения таких солитонов, закономерности их движения и затухания в диссипативной среде.

В сильных звуковых полях в квантованных полупроводниковых пленках найдены зависящие от параметров пленки дополнительные по сравнению с массивным образцом ограничения на величину предельных значений амплитуд внешних воздействий (превышающих допустимые пределы для данного материала и толщины пленки).

По второму блоку. Показано, что в алюминии при комнатной температуре дислокация в рельефе Пайерлса движется неравномерно, замедляясь перед барьером Пайерлса и ускоряясь после преодоления барьера. В окрестности дислокации реализуется область микропластичности. Внешнее переменное упругое поле изменяет длину свободного пробега дислокации в зависимости от частоты. При наличии внешнего упругого поля уменьшается предел текучести материала. Различаются три области, в которых действуют различные механизмы деформации и упрочнения; каждому участку этих областей соответствует различная зависимость коэффициента упрочнения от координаты.

Предложен новый, многосолитонный, метод к решению задачи удаления дислокаций из пограничных областей гетероструктур.

Исследована динамика образующихся в процессе холодной пластической деформации дислокаций в поле периодического потенциала Пайерлса с учетом взаимодействия дислокаций. Поле смещений таких дислокаций зависит от скорости их скольжения; при возрастании скорости оно сначала сжимается по направлению скольжения, а затем меняет знак. В пределе, когда скорость близка к скорости звука, взаимодействие между дислокациями стремится к нулю.

При низких барьерах Пайерлса движение поступательное. В кристаллах с высоким барьером дислокация совершает колебательное движение в направлении скольжения; происходит искажение хвостовых областей поля смещений дислокации. Ширина дислокации в кристаллах с высоким барьером Пайерлса периодически меняется, оставаясь все время меньше, чем в кристаллах с низким барьером. При учете силы трения движение дислокаций замедляется, амплитуда колебаний в направлении скольжения значительно уменьшается.

Разработана модель формирования селя в рамках гидродинамических представлений с учетом нелинейных волновых гидродинамических процессов, в частности – солитонной модели уравнения Кортевега де Фриза и его модификаций. Предлагается механизм контроля развития нелинейных динамических процессов и указывается на возможность управления этими явлениями по аналогии с управляющими системами для технически сложных гидравлических нелинейных объектов с переменными/случайными параметрами, в том числе, порогового типа.

На основании известных данных о том, что прохождение нервного импульса по нейронным сетям имеет автоволновой характер и что в нервном волокне при распространении нервного импульса уравниваются нелинейная зависимость проницаемости мембраны от величины импульса и диффузия ионов через мембрану, движение электрической составляющей нервного импульса – потенциала действия промоделировано как движение солитона Кортвега де Фриза.

Предложено с помощью солитонной модели описывать также мышечную и кровеносную системы сердца. Показано, что, изменяя параметры солитонной модели, можно моделировать патологии нервных проводящих путей, сосудистой и мышечной системы сердца.

В экспериментальной части работы представлены следующие результаты.

Экспериментально и теоретически показано, что без учета взаимодействия с примесями скорость 60° -ных дислокаций больше скорости винтовых, и во всем температурном интервале соотношение скоростей сохраняется.

В кристаллах с примесями при температуре, при которой экспериментально наблюдается инверсия скорости, получено условие инверсии на напряжение. При повышении температуры инверсное значение напряжения уменьшается.

В кристаллах кремния и германия экспериментально исследовано развитие гексагональных полуколец дислокаций, возникающих и развивающихся от уколов алмазного индентора и получено, что равновесная конфигурация петли устанавливается при размерах компонент гексагональных петель, превышающих некоторые критические значения. Показано, что при этом собственная упругая энергия дислокаций намного больше энергии взаимодействия между компонентами и энергии изломов. Установлено также, что эти критические значения зависят от внешних условий. Показано, что в начальных стадиях возникновения дислокационной петли, когда собственная упругая энергия дислокаций порядка энергии взаимодействия между компонентами, компоненты не являются прямыми линиями в строгих кристаллографических направлениях. При дальнейшем развитии процессов дислокация приобретает форму гексагональной петли.

В сочетании теории и эксперимента решена задача о распределении напряжений в бездислокационных кристаллах кремния при двухосном напряженном состоянии под действием сосредоточенной силы, приложенной к центру пластины.

В общем случае на поверхности кристалла реализуются различные варианты двухосных напряженно-деформированных состояний.

Установлены направления наибольших касательных напряжений, вдоль которых реализуется скольжение дислокации в различных областях кристалла, осуществлен переход от рассчитанных из эксперимента касательных и нормальных напряжений в плоскости скольжения к напряжениям в различных областях поверхности кристалла в сложном случае двухосного нагружения, определен тип деформации.

Полученные результаты позволяют определять компоненты тензора напряжений в любых точках двумерной сетки на поверхности кристалла.

Практическая значимость полученных результатов состоит в разработке новых физических принципов создания тонкопленочных систем и расширении возможности использования наноструктурированных систем и тонкопленочных элементов в задачах микроэлектронной техники, в частности, для создания больших интегральных микросхем, функциональных узлов миниатюрных электронно-вычислительных машин, усилителей промежуточных частот трактов цветности, визуализации и изображения звука, конкурентоспособных коммерческих линий задержек на несколько микросекунд и т.д., а также их использования в элементах и системах фононной спектроскопии и фотоники, включая квантовую обработку информации и квантовые вычисления.

Исследования фундаментальных явлений в твердых телах в линейном и нелинейном приближениях, позволяющие выявлять динамику их протекания, служат основой для разработки более совершенных технологий создания приборов с регулируемыми параметрами для нужд микро- и наноэлектроники.

Солитоны Кортевега де Фриза могут быть использованы как для передачи информации по оптическим волокнам на очень большие расстояния, так и в квантовых компьютерах. Устойчивость солитонов по отношению к изменению формы позволила использовать нелинейные эффекты для подавления дисперсии волн и получения солитонных импульсов в оптических линиях связи. Это увеличивает скорость передачи информации по линиям оптической связи на несколько порядков. Можно сказать, что природа давно выбрала такой способ передачи информации с помощью импульсов-солитонов в нервных волокнах. Таким образом, преимущества использования солитонов

– большая скорость передачи очень большого количества информации, малый расход энергии и высокая надежность – наиболее принципиальны для различных приложений.

В частности, предложенная в диссертации трактовка механизмов селеобразования может быть полезна при формулировании дополнительных принципов прогнозирования, контроля и управления этими явлениями и защиты от селевых потоков на некоторых потенциально опасных территориях.

Солитоноподобные решения при описании передачи нервных импульсов описывают широкий круг явлений, которые сопровождают работу сердца, мышечные и кровеносные системы сердца. Возможная патология в сосудистой системе изменяет спектральную картину солитонных волн и позволяет диагностировать различные заболевания нервных путей и сердечно-сосудистой системы.

До недавнего времени основой большинства оптоэлектронных приборов являлись многослойные тонкопленочные структуры. В оптоэлектронных приборах на основе квантовых пленок и проволок (лазеров, светоизлучающих диодов) свойства существенно лучше, чем на основе квантовых ям. Однако высокие требования к однородности и структурному совершенству в таких системах затрудняли создание приборов на их основе. Необходимость совершенствования показателей приборов вызвала активные теоретические исследования кинетики роста и стабильности многослойных структур, условия образования в них дефектов структуры. Практически образование, например, дефектов несоответствия происходит на стадии изготовления гетеросистемы при релаксации напряжений несоответствия. Удаление дислокаций несоответствия и других неоднородностей на границе гетеросистемы помогает существенно улучшить функциональные свойства и эффективность созданных на их основе приборов.

Квантово-механический подход при описании подвижности дислокаций позволяет объяснить низкотемпературные аномалии пластической деформации: уменьшение напряжения течения чистых металлов при температурах (20-30)К.

В различных технологиях современной высокотехнологичной индустрии при формообразовании изделий явление деформационного упрочнения используется как перспективный ресурс повышения прочностных характеристик изделий. В связи с этим выяснение физической природы упрочнения, позволяющее управлять его динамикой, является принципиальной задачей для подобных прикладных задач.

Защищаемые положения.

1. В поле сильной электромагнитной волны при определенных ее параметрах в квантовых пленках в условиях нелинейного взаимодействия возможны различные режимы распространения звука: одномерно квантованная среда становится прозрачной для звука (коэффициент поглощения равен нулю); происходит усиление звука, которое носит осцилляционный характер в зависимости от толщины пленки; появляется зависимость коэффициента поглощения от частоты звука, не наблюдаемая в линейном приближении;

2. Фононный спектр в полупроводниковых пленках напыленных на подложки, имеющие сходные с пленкой упругие свойства, имеет квантовый характер из-за электрон-фононного взаимодействия. При $q_p = 2k_{F_v}$ (k_{F_v} - модуль волнового вектора электрона на поверхности Ферми, q_p - модуль волнового вектора фонона в плоскости пленки) функция $\omega(q_p)$ (ω - частота фонона) остается непрерывной, но ее первая производная $\frac{d\omega}{dq_p}$ в этой точке расходится, т.е. перенормировка скорости фононов за счет электрон-фононного взаимодействия вблизи поверхности Ферми является существенной (фононовская особенность). При переходе от массивного образца к пленке особенность в групповой скорости фононов усиливается (вместо слабой логарифмической особенности для сферической поверхности имеем корневую особенность для цилиндрической поверхности Ферми в пленке). Затухание фононов испытывает скачки – гигантские квантовые осцилляции поглощения.

3. Для двумерного свободного движения и одномерного квантования электронного и фононного энергетического спектра в электрон-фононной системе (оптические фононы) при выполнении определенных условий возникают новые квазичастицы, которые являются связанными состояниями электрона и фонона.

4. В полупроводниковой одномерной среде (квантовая проволока) со слабой дисперсией и слабой нелинейностью в присутствии звуковой и электромагнитной волн при определенных условиях образуется звуковой солитон, описываемый уравнением Кортевега де Фриза и имеющий характерные особенности и пороговый механизм для определенных параметров нелинейности, дисперсии, диссипации и для выбранных

начальных возмущений. В системе происходят явления самоорганизации – возникают новые упорядоченные структуры по бифуркационному сценарию.

5. В алюминии при комнатной температуре дислокация в рельефе Пайерлса движется неравномерно, замедляясь перед барьером Пайерлса и ускоряясь после преодоления барьера. В окрестности дислокации реализуется режим микропластичности. При этом различаются три области, в которых действуют различные механизмы деформации и упрочнения; каждой области соответствует различная зависимость коэффициента упрочнения от координаты. При низких температурах ($t \leq 50\text{K}$) в алюминии с учетом барьера Пайерлса дислокация Френкеля–Конторовой движется посредством туннелирования перегибов на дислокации.

6. В алюминии при воздействии ультразвука различных частот (порядка 10^{12} Гц) и учете диссипации, меняется длина свободного пробега дислокаций Френкеля – Конторовой. Наибольшая длина свободного пробега соответствует резонансной частоте, сопоставимой со временем перехода дислокации в соседнюю долину рельефа Пайерлса. При наличии внешнего упругого поля градиент роста кривой упрочнения уменьшается, а значит уменьшается предел текучести. Наличие резонансной частоты уменьшает коэффициент упрочнения.

7. В алюминии при гелиевых температурах возникают особенности в зависимости истинных значений напряжений от деформации в переменных Эйлера - резкое уменьшение напряжения при почти постоянной деформации, имеющее почти периодический характер.

8. В рамках солитонной модели уравнения Кортевега де Фриза и его модификаций возможно математическое описание (моделирование) различных процессов: природного катастрофического события – селевого процесса, а также распространения нервных импульсов в живом организме. Моделирование позволяет контролировать развитие указанных нелинейных динамических процессов и создает возможность управления ими и выявления и идентификации их режимов (устойчивых и неустойчивых).

9. В беспримесных кристаллах кремния скорость 60° -ных дислокаций больше скорости винтовых, и соотношение скоростей сохраняется в температурном интервале $550^\circ\text{--}700^\circ$ при внешнем механическом напряжении до 10^7 Н/м. В реальных кристаллах кремния с учетом взаимодействия дислокаций с примесями происходит инверсия

скоростей дислокаций при $\sigma \leq 9 \text{ МН/м}^2$ и температуре $T = 853 \text{ К}$. При повышении температуры инверсное значение напряжения уменьшается.

10. При изгибе тонкой пластины кристалла кремния под действием вертикальной сосредоточенной силы (двухосное напряженное состояние) с помощью эксперимента осуществимо локальное тензометрирование, что позволяет определять компоненты тензора напряжений в любых точках двумерной сетки на поверхности пластины кристалла. Вариация внешних параметров позволяет управлять тензором напряжений.

11. В полупроводниковых пленочных приборах, работающих при повышенных токовых и тепловых нагрузках а также при взаимодействии с сильными звуковыми волнами могут возникать напряжения и деформации, превышающие допустимые пределы для данного материала и толщины пленки. Расчет тонких полупроводниковых пленок (кремний, германий) на прочность для температур $T < \theta/n$, где θ –температура Дебая, n -число атомных слоев в пленке, позволяет регулировать предел нагрузки пленок для данного материала при данной деформации.

12. Пластичность зависит от условий деформирования, и ее следует рассматривать не как свойство какого-либо материала, а как его состояние. При деформировании в условиях неравномерного двухосного сжатия при определенных температурно-скоростных режимах деформирования создается возможность деформирования листового молибдена до (70-80) % (вместо (2-5) %, предусмотренных по ГОСТ-у), что гарантирует улучшенное качество гетерограниц при создании гетероструктур.

В диссертации формулы и рисунки пронумерованы по главам двумя цифрами. Каждая первая цифра – номер главы, а вторая – в этой главе последовательная нумерация формул и рисунков. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в виде научных статей и трудов конференций - всего 38 научных публикаций, включая 2 патента.

ЧАСТЬ 1. ПОГЛОЩЕНИЕ УЛЬТРАЗВУКА И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ КВАЗИЧАСТИЦ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ ПО ТЕОРИИ ПОГЛОЩЕНИЯ УЛЬТРАЗВУКА И ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА КВАЗИЧАСТИЦ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

1.1. Квантово-размерные структуры

Известно, что в низкоразмерных структурах происходит изменение энергетического спектра электронов (или других частиц и квазичастиц). Это происходит потому что материал (металл, полупроводник) размерно ограниченных структур (например, пленки) представляет собой потенциальную яму для электронов с глубиной, равной работе выхода, и шириной, равной толщине пленки. В большинстве твердых тел работа выхода электрона порядка 4-5 эВ, а средняя кинетическая энергия при комнатной температуре $kT \sim 0.026$ эВ. В этом случае потенциальную яму для электронов в пленке в хорошем приближении можно считать бесконечно глубокой. Тогда соответствующие волновые функции и энергетические уровни квантовых состояний электрона даются простыми формулами [12]:

$$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} z, \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2},$$

где m - эффективная масса электрона a - толщина пленки, $n = 1, 2, \dots$ - квантовое число.

Полная энергия электронов в тонкой пленке имеет дискретно-непрерывный спектр

$$E = E_n + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m},$$

p_x, p_y - составляющие импульса электрона в плоскости пленки.

Если все электроны имеют энергии, меньшие E_2 , то никакой упругий процесс не может перевести электрон на вышележащий уровень, т.е. движение электронов будет таким же, как движение частиц в двумерном газе.

Если движение носителей ограничено в двух направлениях (нити, проволоки), перпендикулярных оси, то имеем двумерное квантование, определяемое двумя квантовыми числами. Возможны случаи, когда квантовое ограничение действует во всех 3-х направлениях (квантовые точки или нульразмерные структуры). Энергия

движения частиц в квантовых точках является квантованной в каждом из трех направлений. В таких системах энергетический спектр – набор дискретных уровней.

В качестве исходного материала для получения квантовых проволок и точек в настоящее время используют двумерные структуры, в которых движение электронов уже ограничено в одном направлении. Чтобы создать ограничение еще в одном направлении (квантовые проволоки) или в двух направлениях (квантовые точки) используется технология субмикронной литографии (травление), которая позволяет удалять лишние части структуры, формируя проволоки и точки [7,8]. Квантовые точки могут также образовываться в результате процессов самосборки. Например, если на кристаллическую поверхность кремния или GaAs нанести небольшое число атомов другого вещества (например, германия), то через некоторое время можно наблюдать, как эти чужеродные атомы сами собираются в некоторые структуры размером в несколько десятков нанометров. Структуры такого типа являются квантовыми точками, они представляют собой трехмерные ловушки для электронов.

Существует еще ряд других методов изготовления квантовых проволок и точек [7].

Квантовые размерные эффекты наблюдаются при выполнении следующих условий:

$$1. E_{n+1} - E_n \gg kT$$

$$2. E_{n+1} - E_n \gg \frac{h}{\tau}$$

τ - время релаксации импульса, k - постоянная Больцмана. Второе условие можно сформулировать следующим образом: длина свободного пробега электрона должна быть больше, чем ширина области, ограничивающей его движение (например ширина потенциальной ямы). Из этого условия следует, что наблюдение квантовых эффектов возможно, если поверхности, ограничивающие движение электронов в квантовых ямах, нитях и точках, обладают высоким качеством. Размеры шероховатостей должны быть меньше дебройлевской длины волны носителей для того, чтобы отражение от поверхностей «стен» было зеркально упругим.

На практике получить высококачественные пленки очень трудно, т.к. поверхность пленки, различные дефектные структуры являются источниками уровней, лежащих в запрещенной энергетической зоне пленки. Эти дополнительные состояния играют роль

центров рассеяния электрона, существенно уменьшающих время жизни электронов, т.е. нарушается условие $E_{n+1} - E_n > \frac{h}{\tau}$.

В настоящее время для изучения квантовых размерных эффектов используют кремниевые МДП (металл-диэлектрик-полупроводник) структуры или квантовые гетероструктуры- контакты между полупроводниками с различной шириной запрещенной зоны [9]. На таком контакте края энергетических зон испытывают скачки, ограничивающие движение носителей и играющие роль стенок квантовой ямы.

1.2. Взаимодействие электрона с фононами в присутствии электромагнитной волны

На первый взгляд, распространение звука в твердых телах целиком определяется свойством решетки. Роль электронов проводимости, которые в каком-то смысле свободны от взаимодействия с ионами идеальной кристаллической решетки, кажется несущественной. Однако прямые эксперименты, проведенные при достаточно низких температурах показывают, что это не так. Влияние электронов проводимости на распространение звука обусловлено ролью, которую играют электроны в формировании сил, действующих между ионами кристаллической решетки. Таким образом, электрон-фононное взаимодействие является многоэлектронным эффектом, обусловленным реакцией на движение и взаимодействие самих носителей заряда.

При рассмотрении связи медленного электрона с длинноволновыми фононами в кристалле, то есть соответствующими плавными полями (упругими, поляризационными и т.д.), можно использовать континуальную аппроксимацию: приближение эффективной массы и замену решетки однородной и непрерывной средой – континуумом.

Гамильтониан электрон-фононной системы в континуальной аппроксимации обычно называют гамильтонианом Фрелиха. Его можно записать в виде

$$\hat{H}^F = \varepsilon(\hat{k}) + \sum_{\lambda} \omega_{\lambda} b_{\lambda}^+ b_{\lambda} + \sum_{\lambda} [c_{\lambda}(q) b_{\lambda} \exp(i\vec{q}\vec{r})] a^+ a + \text{э.с.},$$

где ω_{λ} - частота фонона с номером ветви λ , b^+, b - бозеевские операторы рождения и уничтожения фононов, a^+, a - фермиевские операторы рождения и уничтожения электронов, $\varepsilon(\hat{k})$ - энергия электрона.

Гамильтониан Фрелиха описывает электрон-фононную связь, сохраняющую полный квазиимпульс системы (квазиимпульсы предполагаются малыми по сравнению с вектором обратной решетки, так что процессы переброса можно не учитывать).

Модель Фрелиха по существу является адиабатической, поскольку в ней энергия электронов предполагается зависящей от мгновенного положения ионов в колеблющейся решетке. Эта модель дает правильное качественное описание эффективного короткодействующего взаимодействия между электронами и ионами и позволяет правильно оценивать величину малых неадиабатических эффектов – электронного вклада в затухание фононов, дисперсию их скорости, а также учесть влияние этого взаимодействия на электроны вблизи поверхности Ферми и т.д. Однако, хотя ряд важных результатов, найденных в рамках модели Фрелиха, оказывается правильным, эта модель не имеет строгого обоснования, так как, как показано в [17], модель Фрелиха не может быть получена из точного полного гамильтониана системы ни при каком выборе нулевого гамильтониана. Более последовательной является адиабатическая теория, которая будет рассмотрена нами ниже.

В ковалентных кристаллах электрон-фононное взаимодействие часто можно считать относительно слабым, и когда в полупроводнике концентрация носителей заряда мала, допустимо пренебрежение экранирующими эффектами, обусловленными взаимодействием носителей между собой, и пользоваться методом потенциала деформации.

Таким образом, в полупроводниках и полуметаллах с плотностью носителей $n \leq 10^{19} \text{ см}^{-3}$ электрон-фононная связь осуществляется через потенциал деформации.

Как было показано выше, эти материалы являются и наиболее благоприятными для наблюдения квантовых размерных эффектов. Используя волновые функции электрона в пленке, для матричного элемента электрон-фононного взаимодействия можно получить выражение [12]:

$$c_{vv'}(\vec{q}) = ic_1 \left(\frac{\hbar q^2}{2\rho_0 v \omega} \right)^{1/2} F_{vv'}(q_y),$$

$$F_{vv'}(q_y) = \frac{4\pi^2 i v v' q_y d \left[(-1)^{v+v'} e^{iq_y d} - 1 \right]}{\left[\pi^2 (\nu + \nu')^2 - q_y^2 d^2 \right] \left[\pi^2 (\nu - \nu')^2 - q_y^2 d^2 \right]},$$

где c_1 – константа деформационного потенциала, $\vec{q}$ – волновой вектор фонона, v – объем, ρ_0 – плотность вещества, ν, ν' – квантовые числа.

Результатом связи между электронами и фононами является ряд эффектов. Например, взаимодействие электронов проводимости с фононами вызывает поглощение (или испускание) фононов. Взаимодействие электронов проводимости со звуковой волной, длина которой мала по сравнению с длиной свободного пробега электрона, можно рассматривать как поглощение и испускание электронами акустических фононов. Этот процесс является одной из основных причин затухания ультразвуковых волн в металлах и полупроводниках. В каждом акте такого испускания или поглощения должны выполняться законы сохранения энергии и квазиимпульса. Из-за этого спектр поглощения звука электронами проводимости будет оставаться непрерывным лишь до тех пор, пока энергия и квазиимпульс фонона малы по сравнению с соответствующими величинами для электрона. Когда же указанные величины станут сравнимыми, законы сохранения налагают существенные ограничения на электрон-фононное взаимодействие, в результате чего появляются области частот, где звуковая волна не поглощается электронами. В качестве примера можно указать на выключение электрон-фононного взаимодействия при $\vec{q} > 2\vec{p}$ ($\vec{p}$ – характерный квазиимпульс электрона, $\vec{q}$ – волновой вектор фонона), гигантские квантовые осцилляции поглощения звука в магнитном поле [18]. Можно ожидать, что отмеченная особенность поглощения звука электронами претерпит существенные изменения, если взаимодействие электронов с фононами происходит в присутствии электромагнитной волны, частота Ω которой соизмерима с характерными электронными частотами или превосходит их. Действительно, при $\Omega\tau \gg 1$ (τ – время релаксации электронов) в аргумент δ – функции, описывающей законы сохранения, наряду с электронными и фононными энергиями входит величина $\pm n\Omega$ (n – целое число), которая компенсирует дефицит (или избыток) энергии, в результате чего область, где электроны взаимодействуют с фононами, должна существенно измениться.

Кроме того, при наличии электромагнитной волны возможно не только поглощение, но и усиление звука. Последняя особенность связана с тем, что поглощение электромагнитной волны электронами проводимости сопровождается поглощением и испусканием фононов, причем области поглощения и испускания оказываются

разнесенными по частоте. Возможность поглощения и усиления звука при $\vec{q} \gg 2\vec{p}$ в присутствии электромагнитной волны была продемонстрирована в [19].

В этой работе было показано, что при распространении звука вдоль квантующего магнитного поля при наличии высокочастотного электрического поля того же направления должны существовать положительные и отрицательные пики в частотной зависимости затухания звука, соответствующие поглощению и усилению последнего. Такое усиление может быть весьма эффективным. При заданной частоте поглощение и усиление носят осцилляционный характер с резкими всплесками при изменении напряженности магнитного поля.

Как известно, в сильном магнитном поле происходит двумерное квантование электронного энергетического спектра [19].

Возникает вопрос, каково электронное поглощение ультразвука в присутствии сильной электромагнитной волны в условиях размерного одномерного квантования. Ясно, что размерное квантование должно проявляться при взаимодействии пленки с излучением и внести свои особенности в поглощение.

1.3. Парамагнитный резонанс.

Парамагнитный резонанс наблюдается как результат индуцированных СВЧ (сверхвысокие частоты) – полем переходов электронов между уровнями, которые возникают в кристалле при наложении постоянного магнитного поля. В магнитном поле $\vec{H}$ энергия уровней повышается и понижается на величину $\vec{\mu}\vec{H}$, где $\vec{\mu}$ – магнитный момент электрона или магнетон Бора. Тогда $\hbar\Omega = \Delta E = g \left(\frac{e\hbar}{2mc} \right) H$, где для электронного спина g -фактор равен 2, а $\mu = \frac{e\hbar}{2mc} = 0,927 \cdot 10^{-20}$ эрг/э. Поглощение СВЧ энергии наблюдается в случае, если удовлетворяется условие резонанса. Такие переходы могут быть индуцированы или электромагнитной (ЭПР), или ультразвуковой (АПР) волной соответствующей частоты. Поглощение СВЧ энергии в кристалле изменяется в присутствии ультразвуковой волны.

Экспериментальное доказательство взаимодействия между высокочастотными ультразвуковыми волнами и электронной спин-системой было получено путем наблюдения изменений, индуцированных в линиях ЭПР (см., например, [20]).

Помимо прямого наблюдения АПР, широкое распространение получил предложенный в [29] метод акустического насыщения парамагнитного резонанса. В [30] развита теория реакции спин-системы на одновременное резонансное воздействие акустических и электромагнитных полей одной и той же частоты. Показано, что при различных частотах может иметь место как поглощение, так и усиление звука, обусловленное действием на спин-систему переменного электромагнитного поля.

Металлы, полуметаллы и полупроводники являются одними из классических объектов, на которых принципиально возможно наблюдение эффекта парамагнитного резонансного поглощения. Причем АПР более эффективен в проводящих средах, чем ЭПР (скин-эффект не мешает проникновению в глубь образца). Обзор имеющихся работ по этому вопросу можно найти в [31].

Спины электронов проводимости могут ориентироваться как по направлению приложенного магнитного поля, так и против него, и поэтому с этими электронами связана как парамагнитная восприимчивость в постоянном поле, так и парамагнитное резонансное поглощение. Однако, вследствие того, что электроны проводимости неразличимы и распределены по всему объему металлического образца, а не связаны с определенными атомами или определенным местом кристаллической решетки, парамагнетизм электронного газа имеет иной характер по сравнению с парамагнетизмом в диэлектриках или полупроводниках.

В частности, необходимость перехода от статистики Больцмана к статистике Ферми-Дирака приводит к важнейшим следствиям. Имеется и ряд других особенностей [31].

В теории парамагнитного резонанса электронов проводимости важным является вопрос о выборе механизма, посредством которого возмущенная спиновая система приходит к равновесию.

В работах Оверхаузера [32] и Эллиота [33] изучались различные типы спиновых взаимодействий, однако только учтенная Эллиотом спин-орбитальная связь электронов с решеткой привела к согласованию вычисленного времени спиновой релаксации с наблюдаемым. Волновые функции электрона в решетке с учетом спин-орбитального взаимодействия для случая щелочных металлов были найдены Яффетом [34] :

$$\psi_{1,2} = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{1,2}(\vec{k}, \vec{r})$$

$$u_{1,2} = \left\{ u_0(\vec{r}) + i\vec{k}\vec{r}u_1(r) \pm c'_1 \left[\vec{k}\vec{r} \right]_z u_2(\vec{r}) \right\} \chi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} + \\ + c'_2 \left[\vec{k}\vec{r} \right]_{x+iy} u_3(r) \chi_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}},$$

где индексы 1,2 относятся соответственно , к ориентациям спина электрона вдоль и против постоянного магнитного поля $\vec{H}$, направление которого выбирается за ось z , $u_1(r) \sim u_2(r) \sim u_3(r)$, $c'_1 \sim c'_2 \sim \Delta g$, где Δg –разность между g -факторами электрона в решетке и свободного электрона, $\chi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}$ -собственные функции оператора Паули σ_z , выражение для $u(\vec{k}, \vec{r})$ приведено в одной ячейке.

Матричный элемент гамильтониана взаимодействия звуковой волны с электронами с изменением спинового состояния для кристаллов со структурой, обладающей центром инверсии, согласно [35], запишется в виде:

$$M_{\vec{k}+\vec{q}, \vec{k}} = AKq^2, \text{ где } A \sim c_1 \Delta g \left(\frac{\hbar^2}{m\varepsilon_g} \right)$$

c_1 -константа деформационного потенциала, $\vec{K} = \vec{k} + \vec{q}/2$, ε_g - энергия щели, Δg -сдвиг g -фактора электрона.

Смешивание спиновых состояний приводит к тому, что в матричном элементе $M_{k+q\downarrow, k\uparrow}$ слагаемые, представляющие модуляцию кулоновского взаимодействия тепловыми колебаниями, дают отличный от нуля вклад, пропорциональный Δg .

В отличие от парамагнитных диэлектриков, парамагнитный резонанс на электронах проводимости в металлах и полупроводниках является еще сравнительно мало изученной областью. В значительной степени это обусловлено трудностями наблюдения эффекта с помощью стандартной техники, связанными главным образом с малой глубиной проникновения высокочастотного поля в металл и , как правило, чрезвычайно короткими временами спин-решеточной релаксаций электронов проводимости. Кроме того, велики потери за счет проводимости.

Поэтому в экспериментах необходимо использовать небольшие порции вещества, распределенные в парафине, тонкие пленки, коллоидные суспензии и другие подобные системы.

Экспериментальные исследования зависимости ширины линии парамагнитного резонанса электронов проводимости от размеров образца с целью выяснения роли поверхностной релаксации предпринимались в ряде исследований [36, 37, 38].

В литературе имеются также работы, выполненные на пленках [39, 40].

В [39] изучен парамагнитный резонанс электронов проводимости на пленках лития толщиной $0,08\mu\text{m} \leq d \leq 80\mu\text{m}$. Для вероятности неупругого рассеяния спина электрона на поверхности (ε) металла получена оценка $\varepsilon \leq 9 \times 10^{-6}$. В [40] измерения проводились на пленках лития толщиной до $0,01\mu\text{m}$ и для ε получено: $\varepsilon \approx 8 \times 10^{-6}$. Температурная зависимость вклада поверхностной релаксации в ширину линии не была обнаружена. Эти работы носят в основном экспериментальный характер.

Спин-орбитальное расщепление в пленке [41] может быть как меньше, так и больше пленочного расщепления. В первом случае оно должно рассматриваться как малое возмущение к уровням, полученным с учетом ограниченности пленки. В случае, когда спин-орбитальное взаимодействие более существенно, чем возмущение, вызванное ограниченностью пленки, спин-орбитальное расщепление становится больше пленочного [42].

Нами исследована возможность усиления гиперзвука в тонких полупроводниковых или полуметаллических пленках в условиях насыщения акустического парамагнитного резонанса. При этом учитываются эффекты размерного квантования, что приводит к ряду особенностей.

1.4. Связанные состояния возбуждений

Характер квазичастичных состояний с энергией, заметно превышающий основной энергетический уровень системы, оставался до недавнего времени мало исследованным. Это объясняется как специфическими трудностями, возникающими в теории, так и тем, что на протяжении длительного времени имеющиеся экспериментальные данные не создавали стимула для тщательного теоретического изучения каких-либо определенных участков спектра возбужденных состояний.

Между тем, исходя из общетеоретических соображений, следует ожидать появления характерных особенностей в электронном спектре при энергиях, близких к порогу испускания оптического фонона. Если пренебречь дисперсией оптических фононов (что справедливо в том случае, когда существенны фононы с малыми

импульсами), то этот порог расположен при $\varepsilon_0 + \omega_0$, где ω_0 – частота фонона. Поэтому когда появились эксперименты, в которых в спектре магнитополяронов [43], экситонов [44], фононов [45] были обнаружены особенности вблизи $\varepsilon_0 + \omega_0$, ситуация резко изменилась. Припороговые особенности превратились в основной предмет исследований в этой области. В работе Вортиса [46] были исследованы связанные состояния двух магнонов, Рувальдс и Завадский [47] и Агранович [48] изучали состояния двух фононов. В [47] теоретически доказано существование связанных состояний двух фононов в алмазе при учете в гамильтониане ангармонического члена. Найдены энергия связи и волновая функция связанного состояния. Показано, что для образования связанных состояний необходимо, чтобы энергия взаимодействия фононов превышала некоторое пороговое значение. В работе Аграновича развивается теория связанных состояний экситонов в молекулярных кристаллах для инфракрасной области спектра. Показано, что в спектре поглощения кристалла возможно возникновение тонкой структуры, которая обусловлена наличием в элементарной ячейке кристалла различно ориентированных молекул. Однако связанные состояния могут и не возникать, если уменьшение энергии за счет ангармонизма при локализации двух квантов колебаний на одной молекуле мало по сравнению с шириной экситонной зоны.

Связанные состояния электронов с фононами рассмотрены Рашбой и Левинсоном [49]. При этом пренебрегается дисперсией оптического фонона. В [50] рассмотрены связанные состояния электрона и фонона в сильном магнитном поле (когда ситуация искусственно становится одномерной), обусловленные электрон-фононным взаимодействием, квадратичным по смещениям решетки.

Мельниковым [51] исследовались связанные состояния электрона и фонона в одномерной системе. В пределе сильной связи получено точное решение задачи. В этой работе фононы считались бездисперсионными, а взаимодействие – контактным. Питаевский [52] показал, что в кристаллах возможно образование связанных состояний двух элементарных возбуждений (двух фононов, фонона и электрона) при сколь угодно слабом взаимодействии между ними. Это происходит вблизи некоторых специальных точек в пространстве квазиимпульсов возбуждений.

Таким образом, образование слабо связанных состояний возбуждений возможно в кристаллах с самыми общими свойствами и должно являться скорее правилом, чем исключением.

Итак, существование связанных состояний электрона и фонона в трехмерном случае рассмотрено достаточно подробно. Исследованы также связанные состояния этих возбуждений в одномерном и квазиодномерном случае.

Представляет интерес рассмотреть, какие особенности вносит рассмотрение возможности образования связанных состояний в промежуточном случае –квантовой полупроводниковой пленки (одномерная потенциальная яма, двумерное свободное движение).

1.5. Адиабатическое приближение и фононный спектр

Как известно, с помощью фононов описывают колебания кристаллической решетки. Фононы могут быть возбуждены в твердых телах любого типа – металлах (нормальных и сверхпроводящих), диэлектриках, полупроводниках и этим отличаются от более специфических возбуждений, таких, как электроны и дырки в металлах и полупроводниках, экситоны в диэлектриках и т.д.

Свойства фононов изучены значительно хуже, чем свойства электронов. Это, по-видимому, объясняется тем, что практические успехи физики твердого тела связаны с проводящими возбуждениями.

Один из возможных подходов к исследованию динамических свойств кристаллической решетки, получивший существенное развитие, состоит в расчете фононных спектров.

При квантомеханическом исследовании свойств молекул и твердых тел приходится рассматривать системы, состоящие из электронов и атомных ядер. Так как атомные ядра в десятки и сотни тысяч раз тяжелее электронов, то в среднем они движутся значительно медленнее электронов. В связи с этим возникает возможность приближенного исследования свойств молекул и твердых тел, считая в нулевом приближении ядра покоящимися, а в последующих приближениях учитывать движение ядер методами теории возмущений. Такое приближенное рассмотрение носит название адиабатического приближения Борна-Опенгеймера [53].

Для длинноволновых фононов роль адиабатического параметра играет отношение частоты акустического фонона $\omega_q = |\vec{q}| |\vec{u}|$ к характерной частоте электронного перехода при взаимодействии с фононом $\varepsilon_{\vec{p}+\vec{q}} - \varepsilon_{\vec{p}} \approx \vec{q} \vec{v}$. Поскольку в формировании фононного спектра участвуют все электроны на поверхности Ферми, то и в пределе длинных волн

адиабатический параметр имеет прежний порядок величины u/v_F . Иными словами, существование единого адиабатического параметра для всех фононов предполагает, что в электронной системе отсутствуют коллективные возбуждения, частота которых при данном q сравнима с энергией фонона ω_q .

Фононный спектр в массивных образцах достаточно хорошо исследован (см., например, [54]). Мигдал [55] и несколько позже Кон [56] обратили внимание на то, что для фононов с волновым вектором $|q| = 2|p_0|$ ($\vec{p}_0$ - граничный импульс сферической поверхности Ферми) электрон-фононное взаимодействие приводит к возникновению особенности логарифмического типа в производной частоты ω по q . Позднее появилась работа Брокхауза [57], в которой сообщалось о прямом обнаружении такого типа особенности в фононном спектре свинца на основе опытов с холодными нейтронами. Связь между положением особенностей и характеристиками поверхности Ферми открывает возможность независимого определения Ферми-поверхности, измеряя фононный спектр.

Афанасьев и Каган [58] показали, что характер коновской особенности зависит от формы поверхности Ферми, причем в ряде случаев особенность может быть существенно усилена. Конечная температура и различные механизмы рассеяния несколько сглаживают особенности.

Особенность имеет место для векторов, соединяющих две точки на поверхности Ферми, имеющие строго противоположно направленные групповые скорости. Причиной существования особенностей является неоднородное заполнение электронами $\vec{p}$ - пространства, т.е. разрыв функции распределения электронов на поверхности Ферми.

Характер тепловых колебаний решетки в пленке существенно отличается от колебаний в массивных образцах.

Вообще говоря, фононный спектр в пленке квантован так же, как и электронный. Расстояние между отдельными пленочными фононными ветвями $\omega(\vec{q})$ ($\vec{q}$ - двумерный вектор) порядка $\pi u/d \sim \theta/n\hbar$, где u - скорость звука. θ - температура Дебая, n - число атомных слоев в пленке. В [59] учитывается влияние ограниченности пленки на характер тепловых колебаний.

В [60] рассматривается фононный спектр в тонких пленках, с учетом размерного квантования фононов. При учете неадиабатической перенормировки фононного спектра

за счет электрон-фононного взаимодействия в групповой скорости фононов наблюдаются особенности типа $|q - q_n|^{-1/2}$. Однако в работе используется закон сохранения поперечной компоненты импульса взаимодействующих электронов и фононов, который не имеет места в пленках. Поэтому приводимые количественные результаты, как подчеркивают авторы, носят ориентировочный характер.

Если пленка лежит на подложке, характер колебаний зависит от соотношения упругих констант пленки и подложки. Если упругие константы пленки и подложки имеют близкие значения, то фононы в пленке можно считать такими же, как в массивном образце.

Представляет интерес рассмотреть задачу о фононном спектре в пленке при учете электрон-фононного взаимодействия в условиях, когда энергетический спектр электронов квантован, а фононный спектр такой же, как в массивном образце. Это, как будет показано, приводит к своеобразному квантованию взаимодействующего с электронами фононного спектра. Система особых точек в фононном спектре пленки, вместо одной особенности в массивном образце, дает информацию о поверхности Ферми в пленках.

1.6. Некоторые нелинейные эффекты, возникающие при распространении сильной звуковой или электромагнитной волны

С общей точки зрения, акустические среды представляют собой важный частный случай нелинейных распределенных систем, так как в них почти отсутствует дисперсия. Нелинейные эффекты при распространении звуковых волн в материальной среде могут быть связаны не только с особенностями поведения электронов в сильном поле звуковой волны, но также с взаимодействием звука с волнами иной породы: светом, спиновыми колебаниями, плазменными колебаниями и т.д. Физические причины, приводящие к появлению нелинейных эффектов, достаточно многообразны.

При низких температурах в очень чистых образцах (с большой длиной свободного пробега электронов) необходимо учитывать неупругость электрон-фононных столкновений. Неупругость электрон-фононного рассеяния обеспечивает обмен энергией между электронами и решеткой. При этом нелинейный коэффициент поглощения дает большую информацию об электрон-фононной системе, чем линейный коэффициент.

Электроны, резонансно взаимодействующие с продольной звуковой волной, при достаточно больших мощностях звука могут захватываться волной, что соответствует сильному искажению их функции распределения в области резонансных импульсов. Величина нелинейности определяется этим искажением, которое зависит как от интенсивности звуковой волны, так и от процессов релаксации импульса электрона, стремящихся сделать функцию распределения электронов изотропной.

Рассмотрению соответствующих эффектов посвящена работа [61]. Порог мощности, начиная с которого становится эффективным захват носителей, определяется условием

$$\omega_0 \tau \gg 1; \quad \omega_0 = q \sqrt{c_1 m^{-1} \text{div} \vec{u}},$$

где c_1 – константа деформационного потенциала, $\vec{u}_1$ – вектор смещения решетки. При выполнении этого условия коэффициент поглощения может существенно уменьшаться (в квантующем поле это приведет к уменьшению амплитуды резонансных осцилляций).

В экспериментальной работе [62] наблюдались нелинейные эффекты при усилении гиперзвуковых волн в антимониде индия в дрейфующем электрическом поле. По мере нарастания интенсивности звука, вводимого в кристалл, наблюдалось заметное уменьшение электронного усиления, обусловленное искажением функции распределения электронов по импульсам из-за их взаимодействия со звуковой волной. При этом нелинейность проявляется при тем меньших интенсивностях звука, чем больше его частота.

Если $\omega_0 \tau \leq 1$, то захват носителей можно не учитывать.

Увеличение пороговой мощности с ростом частоты характерно для другого нелинейного эффекта – концентрационной нелинейности. Если длина волны звука много больше длины свободного пробега электронов ($ql \ll 1$), звуковую волну можно рассматривать как медленно изменяющееся в пространстве внешнее поле, действующее на электроны проводимости. Взаимодействие такой волны с электронами можно описывать в гидродинамическом приближении, причем основным механизмом является концентрационный [63]. Концентрационный механизм нелинейности состоит в захвате части электронов проводимости потенциальными ямами эффективного периодического поля, связанного со звуковой волной. Уменьшение концентрации свободных электронов, в свою очередь, сказывается на электропроводности вещества и изменяет

поглощение и скорость звука. Очевидно, параметром, определяющим эффективность такого механизма нелинейности является величина $e\varphi_0/\bar{\varepsilon}$, где φ_0 – амплитуда потенциала эффективного поля, связанного с волной, $\bar{\varepsilon}$ – характерная энергия электрона.

При достаточно больших амплитудах звука в квантующем поле возможен нелинейный эффект – изменение числа заполненных уровней в поле волны.

Еще одним механизмом нелинейности является разогрев электронного газа полем звуковой волны, возникающий в случае, если энергия, передаваемая электроном от звуковой волны за время релаксации энергии τ_ε порядка средней энергии электрона [64]. В полупроводниках уже при сравнительно небольших плотностях тока j электрическое поле может сообщить носителям заряда на длине свободного пробега l энергию, сравнимую с их средней энергией. В металлах из-за большой плотности носителей заряда средняя энергия электронов проводимости достаточно велика и разогрев током является слабым возмущением электронной системы.

Разумеется, для наблюдения всех перечисленных эффектов необходимо, чтобы звук на длине образца затухал слабо.

Исследование нелинейных эффектов в пленке представляет очевидный интерес для множества экспериментальных задач.

Нами будут рассматриваться эффекты, связанные с электронным поглощением ультразвука в поле сильной электромагнитной волны при учете нелинейного электрон-фононного взаимодействия, а также квадратичные по звуковому полю резонансные эффекты [101].

ГЛАВА 2. ЛИНЕЙНАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ТЕОРИЯ ПОГЛОЩЕНИЯ УЛЬТРАЗВУКА И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР КВАЗИЧАСТИЦ В УСЛОВИЯХ РАЗМЕРНОГО КВАНТОВАНИЯ

2.1. Электронное поглощение ультразвука в поле сильной электромагнитной волны [65].

Пусть имеется вырожденная электрон-фононная система. Ось z направлена параллельно поверхности пленки. Плоская электромагнитная волна с напряженностью электрического поля $\vec{E}$ и частотой Ω распространяется перпендикулярно поверхности в направлении y . Волновой вектор звука ориентирован в плоскости пленки.

Положим $\vec{A} = \vec{A}_\rho$, т.е. вектор-потенциал лежит в плоскости пленки. Тогда гамильтониан электронов в пленке, взаимодействующих с высокочастотным электрическим полем и звуком, можно записать в виде:

$$H(t) = \sum_{\nu, \vec{p}} \varepsilon_\nu \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) a_\nu^+(\vec{p}) a_\nu(\vec{p}) + \sum_{\nu, \nu', \vec{p}, \vec{q}} c_{\nu\nu'}(\vec{q}) \times \\ \times \{ a_\nu^+(\vec{p}) a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) b(\vec{q}) + a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) a_\nu^+(\vec{p}) b^+(-\vec{q}) \} + \sum_{\vec{q}} \omega_0(\vec{q}) b^+(\vec{q}) b(\vec{q}), \quad (2.1)$$

где

$$\varepsilon_\nu(\vec{p}) = \frac{p_\rho^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{2md^2}, \quad \nu = 1, 2, \dots \\ c_{\nu\nu'}(\vec{q}) = ic_1 \left(\frac{\hbar q^2}{2\rho_0 v \omega} \right)^{1/2} F_{\nu\nu'}(q_y), \\ F_{\nu\nu'}(q_y) = \frac{4\pi^2 i \nu \nu' q_y d \left[(-1)^{\nu+\nu'} e^{iq_y d} - 1 \right]}{\left[\pi^2 (\nu + \nu')^2 - q_y^2 d^2 \right] \left[\pi^2 (\nu - \nu')^2 - q_y^2 d^2 \right]}$$

Здесь $c_{\nu\nu'}(q)$ – матричный элемент электрон-фононного взаимодействия в пленке, a^+, a, b^+, b – соответственно, электронные и фононные операторы рождения и уничтожения, $\omega_0(\vec{q}) = |\vec{u}| |\vec{q}|$, $\vec{u}$ – скорость звука, $\omega_0(\vec{q})$ – частота звука, c_1 – константа электрон-фононного взаимодействия, $\vec{p}, \vec{q}$ – соответственно, квазиимпульсы электрона

и фонона, ρ_0 - плотность вещества, v - объем, d - толщина пленки, m - эффективная масса электрона.

Электрическое поле выбираем в виде

$$\vec{E}_0(t) = \vec{E}_0 \sin(\Omega t - s_y y).$$

Используя каноническое преобразование с помощью унитарного оператора:

$$s(t) = \exp \sum_{\nu, \vec{p}} \{ i f(t, \vec{p}) a_{\nu}^+(\vec{p}) a_{\nu}(\vec{p}) \} \quad (2.2)$$

где

$$f(t, \vec{p}) = \int_{-\infty}^t \left\{ \frac{e}{mc} \vec{A}(t') \vec{p} - \frac{e^2 A^2(t')}{2mc^2} \right\} dt',$$

перенесем зависимость от электромагнитного поля с первого члена гамильтониана на второй

$$\begin{aligned} \tilde{H}(t) = s^+ \left\{ -i \frac{\partial}{\partial t} + H(t) \right\} s = \sum_{\nu, \vec{p}} \varepsilon_{\nu}(\vec{p}) a_{\nu}^+(\vec{p}) a_{\nu}(\vec{p}) + \\ + \sum_{\nu, \nu', \vec{p}, \vec{q}} c_{\nu\nu'}(\vec{q}) \{ \exp[i f_1(t, \vec{q})] a_{\nu}^+(\vec{p}) a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) b(\vec{q}) + \\ + \exp[-i f_1(t, \vec{q})] a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu}^+(\vec{p}) b^+(-\vec{q}) \} + \sum_{\vec{q}} \omega_0(\vec{q}) b^+(\vec{q}) b(\vec{q}). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Разлагая $\exp[i f_1(t, \vec{q})]$ в ряд по бесселевым функциям и предполагая адиабатически медленное включение поля при $t \rightarrow -\infty$, приведем гамильтониан к виду

$$\begin{aligned} \tilde{H}(t) = \sum_{\nu, \vec{p}} \varepsilon_{\nu}(\vec{p}) a_{\nu}^+(\vec{p}) a_{\nu}(\vec{p}) + \sum_{s=-\infty}^{\infty} \sum_{\nu, \nu', \vec{p}, \vec{q}} c_{\nu\nu'}(\vec{q}) \times \\ \times \left\{ J_s(aq) e^{is\Omega \left(t - \frac{s_y}{\Omega} y \right)} a_{\nu}^+(\vec{p}) a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) b(\vec{q}) \right. \\ \left. + J_s(aq) e^{-is\Omega \left(t - \frac{s_y}{\Omega} y \right)} a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu}^+(\vec{p}) b^+(-\vec{q}) \right\} + \sum_{\vec{q}} \omega_0(\vec{q}) b^+(\vec{q}) b(\vec{q}), \end{aligned} \quad (2.4)$$

где $a = \frac{eE_0}{m\Omega^2}$ - амплитуда колебаний в поле электромагнитной волны.

С помощью приведенного гамильтониана, используя предположение о малости электрон-фононного взаимодействия, запишем уравнение движения для усредненного фононного оператора уничтожения $\langle b \rangle$ и связанных с ним функций в виде:

$$\begin{aligned}
i \frac{d\langle b \rangle}{dt} &= \omega_0(\vec{q}) \langle b(\vec{q}) \rangle + \sum_{s=-\infty}^{\infty} \sum_{\nu, \nu', \vec{p}} c_{\nu\nu'}(\vec{q}) J_s(aq) \times e^{-is\Omega \left(t - \frac{s_y}{\Omega} y \right)} \langle a_{\nu'}(\vec{p}) a_{\nu}^+(\vec{p} - \vec{q}) \rangle, \\
i \frac{d}{dt} \langle a_{\nu'}(\vec{p}) a_{\nu}^+(\vec{p} - \vec{q}) \rangle &= [\varepsilon_{\nu'}(\vec{p}) - \varepsilon_{\nu}(\vec{p} - \vec{q})] \langle a_{\nu'}(\vec{p}) a_{\nu}^+(\vec{p} - \vec{q}) \rangle + \\
&+ \sum_{s=-\infty}^{\infty} c_{\nu\nu'}(\vec{q}) J_s(aq) e^{is\Omega \left(t - \frac{s_y}{\Omega} y \right)} [n_{\nu}(\vec{p} - \vec{q}) - n_{\nu'}(\vec{p})] \langle b(\vec{q}) \rangle
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Здесь использовано обозначение $\langle x \rangle = Sp[x\rho(t)]$, где $\rho(t)$ – матрица плотности системы, определяемая уравнением

$$i \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\tilde{H}, \rho],$$

$n_{\nu}(\vec{p})$ – числа заполнения состояний с заданным квазиимпульсом в различных подзонах пленки.

Малость электрон-фононного взаимодействия позволяет произвести при получении (2.5) расщепление вида

$$\langle a_{\nu}^+(\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu'}(\vec{p}) b(\vec{q}) \rangle \approx \langle a_{\nu}^+(\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu'}(\vec{p}) \rangle \langle b(\vec{q}) \rangle$$

и из всех величин оставить только диагональные средние.

Перейдем от функций $\langle b(\vec{q}) \rangle$ к их Фурье-образам. Далее из системы уравнений (2.5), пренебрегая членами с $s' \neq s$ (дающих вклад, малый по параметру $c_{\vec{q}}^2/\Omega \ll 1$, $c_{\vec{q}}$ – константа электрон-фононного взаимодействия), полагая $\nu = \nu'$, т.е. рассматривая внутризонные переходы, дающие наибольший вклад, получим следующее дисперсионное уравнение для фононов

$$\omega - \omega_0(\vec{q}) = \sum_{s, \nu} \int d\vec{p} c_{\nu\nu}^2(\vec{q}) J_s^2(aq) \times \frac{[n_{\nu}(\vec{p} - \vec{q}) - n_{\nu}(\vec{p})]}{[\varepsilon_{\nu}(\vec{p} - \vec{q}) - \varepsilon_{\nu}(\vec{p}) + \omega + s\Omega - i\delta]} \tag{2.6}$$

Используя явный вид матричных элементов, отделяя мнимую часть $\alpha(\vec{q}) = Im(\omega/u)$ и переходя от суммирования к интегрированию, получим:

$$\begin{aligned}
\alpha(\vec{q}) &= \frac{2\pi^2 c_1^2}{\rho_0 d \omega_0 u \hbar} \sum_{\nu, s} \frac{\nu^4 q_{\rho}^2 (1 - \cos q_y d) J_s^2(aq)}{(4\pi^2 \nu^2 - q_y^2 d^2)^2 q_y^2 d^2} \times \\
&\times \int d\vec{p} [n_{\nu}(\vec{p} - \vec{q}) - n_{\nu}(\vec{p})] \delta \left[-\frac{\vec{p}\vec{q}}{m} + \frac{q^2}{2m} + \omega + s\Omega \right].
\end{aligned}$$

Интегрируя по $\vec{p}$ в двумерном $\vec{p}$ пространстве пленки $pdpd\varphi$ и отделяя члены с $(+s)$ и $(-s)$, получим

$$\begin{aligned} \alpha(q) = & \frac{4\pi^2 c_1^2}{\rho_0 d^3 \omega_0 u \hbar^2} \sum_{\nu, s=1}^{\infty} \frac{\nu^4 q_\rho^2 (1 - \cos q_y d)}{(4\pi^2 \nu^2 - q_y^2 d^2)^2 q_y^2} \left\{ J_s^2(aq) \times \right. \\ & \times \left(\frac{\hbar q}{2} + mu + \frac{ms\Omega}{q} \right) \frac{m}{\sqrt{8m \left(\mu - \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{2md^2} \right) - \left(\hbar q + 2mu + \frac{2sm\Omega}{q} \right)^2}} + \\ & + J_{-s}^2(aq) \left(\frac{\hbar q}{2} - \frac{ms\Omega}{q} + mu \right) \frac{m}{\sqrt{8m \left(\mu - \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{2md^2} \right) - \left(\hbar q + 2mu - \frac{2sm\Omega}{q} \right)^2}} + \\ & \left. + J_0^2(aq) \left(\frac{\hbar q}{2} + mu \right) \frac{m}{\sqrt{8m \left(\mu - \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{2md^2} \right) - (\hbar q + 2mu)^2}} \right\} \end{aligned} \quad (2.7)$$

где μ - энергия электрона на поверхности Ферми.

При значениях q , удовлетворяющих условиям

$$\begin{aligned} 1) \quad qv_{0\nu} &= qu + s\Omega + \frac{\hbar q^2}{2m} \\ 2) \quad qv_{0\nu} &= qu - s\Omega + \frac{\hbar q^2}{2m} \end{aligned}$$

в поглощении звука наблюдается ряд резонансов с индексами ν и s ($v_{0\nu}$ - скорость электрона на поверхности Ферми).

При выполнении первого условия наибольший вклад дает первое слагаемое в выражении (2.7). При этом мы имеем поглощение звука.

При выполнении второго условия наибольший вклад дает второе слагаемое в выражении (2.7). При этом, если $\hbar q, mu < p_{0\nu}, \frac{m\Omega}{q}$, коэффициент поглощения становится отрицательным, т.е. имеет место усиление звука.

При заданной частоте Ω усиление носит осцилляционный характер в зависимости от толщины пленки.

Усиление наблюдается благодаря тому, что для фермиевских электронов в присутствии электромагнитного поля существует вероятность для процесса поглощения фотона при испускании фонона.

При $\Omega\tau \gg 1$ (τ - время свободного пробега электрона) образуется группа захваченных электромагнитной волной электронов, которые заперты в потенциальной яме периодического потенциала волны, чем и обусловлено их значительное взаимодействие. В данном случае мы имеем бесстолкновительное затухание Ландау электромагнитной волны. В достаточно сильном внешнем электромагнитном поле при $ql \gg 1$ (l - длина свободного пробега электрона) электроны, движущиеся в фазе со звуковой волной, передают энергию фононной подсистеме, и при указанных выше условиях поглощение звука сменяется усилением.

В предельном случае, когда $\hbar q, m v_{0v} \ll \frac{m\Omega}{q}$ коэффициент поглощения равен нулю в нулях функции Бесселя, т.е. среда становится прозрачной для звука. Минимальное значение, при котором $\alpha(q) = 0$ находится из условия $J_0(x) = 0$. При этом получим, что $E_{0\min} \sim 10^6$ В/м. Значение поля велико, но реально достижимо.

Приведем численные оценки, характерные для полуметалла.

Пусть $m \sim 10^{-2} m_0$, $n \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $\Omega \sim 10^{14} \text{ сек}^{-1}$, $v_{0v} \sim 10^8 \text{ м/сек}$, $d = 10^{-6} \text{ см}$, $E_0 \sim 10^4 \text{ В/см}$, $s = 1$. Тогда резонансным является $q \sim 10^6 \text{ см}^{-1}$. Для коэффициента усиления получаем $\alpha(q) \sim 10 \div 10^2 \text{ см}^{-1}$ (в магнитном поле $\alpha(q) \sim 10^3 \div 10^4 \text{ см}^{-1}$ [19]). Эффект выражен слабее, чем в квантующем магнитном поле, так как в отсутствие магнитного поля электроны при взаимодействии с фононами могут рассеиваться на разные углы, и энергия отдачи принимает произвольное значение, поэтому фотон-фононный резонанс менее сильный.

Таким образом, рассмотренный эффект открывает возможность усиления звука очень высоких частот ($\approx 10^{11} - 10^{12} \text{ Гц}$). Усиление таких частот дрейфом носителей тока невозможно из-за выключения электрон-фононного взаимодействия при $q > 2p$.

В [66] излагаются результаты экспериментов, в которых наблюдалось возбуждение звука в висмуте при гелиевых температурах при падении на поверхность образца электромагнитной волны в магнитном поле. Скин – глубина в Bi на наблюдаемых частотах была 10^{-3} см . От величины и направления магнитного поля

зависела только амплитуда пиков, а их положение оставалось неизменным. Изменение толщины образца сдвигало линии пиков на шкале частот.

Мы предполагаем, что механизм возбуждения звука в данном случае соответствует описанному выше.

2.2. Особенности распространения звука в одномерно квантованных средах в условиях электронного парамагнитного резонанса [67,68]

Основные допущения.

Вопрос усиления звука в различных полупроводниковых средах с тем или иным энергетическим спектром частиц представляет значительный интерес. Основное внимание в исследованиях было уделено усилению в условиях дрейфа носителей тока в полупроводниках. Эффекты усиления звуковых волн на основе стимулированного излучения в проводящей системе, в которой наблюдается электронный парамагнитный резонанс, рассматриваются методами магнитной квантовой акустики [69].

В массивных проводящих средах велики потери за счет проводимости, и насыщение резонанса требует больших мощностей. Однако в тонкой пленке, как показано в [70], проводимость убывает с ростом магнитного поля и уменьшением толщины пленки, и потери на проводимость меньше, чем в массивном образце. Поэтому существенный интерес представляет электронный спиновый резонанс на электронах проводимости в полуметаллических и полупроводниковых пленках, в которых существенно размерное квантование.

Рассмотрим размерно квантованную пленку при низкой температуре. Магнитное поле приложено параллельно поверхности пленки вдоль оси Z , плоская электромагнитная волна с напряженностью магнитного поля $\vec{H}$ и частотой Ω_0 падает параллельно Z . Пусть в резонансной среде в направлении X распространяется звук той же частоты, что и электромагнитная волна. Предполагается, что продольные размеры рассматриваемых образцов много меньше длины волны электромагнитного излучения, соответствующего резонансным частотам. При этом амплитуду переменного магнитного поля можно считать постоянной по образцу. Будем считать также, что $1/T_1, 1/T_2 \ll \Omega_0$ (T_1 - время продольной релаксации спин-системы, T_2 - время поперечной релаксации).

Особенности спектра электронов в такой системе состоят в появлении эквидистантных магнитопленочных дискретных уровней с интервалом $\hbar\tilde{\omega}$, которые

вызваны одновременным влиянием на поперечное движение магнитного поля и ограниченности пленки [70]. Рассеяние электронов приводит к размытию уровней, поэтому квазидискретный характер спектра следует учитывать только при условии

$$1) \tilde{\omega}\tau \gg 1, \text{ где } \tilde{\omega} = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2} - \text{магнитопленочная частота, } \omega_c = eH_z/c\sqrt{m_{\parallel}m_{\perp}} -$$

циклотронная частота, ω_0 - пленочная частота, $m_{\perp}$ и $m_{\parallel}$ - поперечная и продольная массы, τ - время релаксации электронов по импульсам. При любом виде пленочного потенциала расстояние между магнитопленочными уровнями больше, чем расстояние между дискретными уровнями в пленке в отсутствие магнитного поля. Поэтому критерий 1) будет заведомо выполняться для пленок с такими параметрами, при которых было обнаружено квантование. Это приводит к тому, что осцилляционные эффекты могут появиться при сравнительно слабых магнитных полях, то есть критерий 1) может быть выполнен не за счет включения сильного магнитного поля, а путем приготовления достаточно тонкой пленки. В этом случае $\omega_0 \gg \omega_c$. Для парамагнитной системы эти магнитопленочные уровни расщепляются в магнитном поле. В [72] экспериментально доказано, что намагниченность монокристалла $\alpha - \text{Bi}_2\text{O}_3$ при низких температурах ($\sim 4,2\text{K}$) и магнитных полях 3-5 кЭ имеет парамагнитный характер.

Основные уравнения и решения.

Гамильтониан системы магнитоквантованных электронов в пленке, взаимодействующих с высокочастотным магнитным полем и звуком, при учете спин-орбитального взаимодействия для кристаллов с центром инверсии имеет вид [69,70,19,34] (потенциал в пленке аппроксимирован параболической потенциальной ямой):

$$\begin{aligned} H(t) = & \sum_{M, \vec{K}} \varepsilon_M \left[\vec{K} - \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right] a_M^+ (\vec{K}) a_M (\vec{K}) + \sum_{M, M'} c_{M, M'} (\vec{K} + \vec{q}) \downarrow \vec{K} \uparrow (\vec{q}) \times \\ & \times \left\{ a_M^+ (\vec{K}) a_{M'} (\vec{K} - \vec{q}) b(\vec{q}) + a_{M'}^+ (\vec{K} - \vec{q}) a_M (\vec{K}) b^+ (-\vec{q}) \right\} + \sum_{\vec{q}} \hbar \Delta_1 \Omega_0 b^+ (\vec{q}) b(\vec{q}), \\ \psi_{M, \vec{K}} = & \frac{1}{\sqrt{L_x L_z}} \exp \{ i (K_z z + K_x x) \} \frac{1}{\sqrt{l}} \varphi_M \left(\frac{y - y_{ky}^0}{l} \right) u_{1,2} (\vec{K}, \vec{r}), \\ \varepsilon_{M, \vec{K}} = & \left(\frac{1}{2} + M \right) \hbar \tilde{\omega} + \frac{\hbar^2 K_z^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\omega_0^2 \hbar^2 K_x^2}{\tilde{\omega}^2 2m_{\parallel}} \pm g\beta \left[\langle s_x \rangle h_x + \langle s_z \rangle h_z + \langle s_y \rangle h_y \right], \\ \vec{h} = & (H_{1x} \exp i\Omega_0 t, \quad H_{1y} \exp i\Omega_0 t, \quad H_z), \end{aligned} \quad (2.8)$$

где индексы 1,2 в $u_{1,2}(\vec{K}, \vec{r})$ относятся к электрону, спин которого направлен соответственно вдоль и против постоянного магнитного поля, ε -энергия электрона, $\langle s_x \rangle$, $\langle s_y \rangle$, $\langle s_z \rangle$ -макроскопические значения эффективной проекции спина единицы объема, оператор проекции спина рассматривается в системе координат, вращающейся с частотой Ω_0 и движущейся вместе с волной вдоль x , M -магнитопленочное квантовое число, K_x, K_z -продольные компоненты двумерного волнового вектора электрона $\vec{K}_\rho, L_x, L_z$ - линейные размеры пленки, φ_M -функция Эрмита M -го порядка, $l = (\hbar/m_\perp \tilde{\omega})^{1/2}$ -магнитопленочная длина, $c_{M,M'}(q)$ -матричный элемент электрон-фононного взаимодействия с изменением спинового состояния, a, a^+, b, b^+ - операторы рождения и уничтожения электронов и фононов, β - магнетон Бора, $\Delta_1 \Omega_0 = \omega - \Omega_0$, $\omega = qu$ - частота фонона, u -модуль скорости продольных волн, g - фактор спектроскопического расщепления.

Чтобы не загромождать работу излишними расчетами, остановимся на случае, когда заполнен один магнитопленочный уровень – при этом специфический характер пленочного квантования проявляется наиболее сильно (в случае пленок Bi $m_\perp \sim 0,01m_0$ концентрация $n \sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при толщине $d \sim 5 \cdot 10^{-6} \text{ см}$ вплоть до комнатных температур заполнена лишь одна подзона).

Установлено, что разрешенные переходы с $\Delta s = 1$ индуцируются не электрическим полем, а его высокочастотным магнитным полем. Тогда, выбирая векторный потенциал в виде

$$A_z = H_{1x} e^{i\Omega_0 t} d, \quad A_y = 0, \quad A_x = 0$$

и выполняя преобразования, аналогичные преобразованиям (5) и (6) работы [65], для коэффициента поглощения звука получим

$$\alpha(q) = \frac{L_x}{2\pi\hbar u} \sum_M |c_{MM'}|^2 \int dK_x [n_M(K_x - q_x) - n_M(K_x)] \times \\ \times \delta \left[-\frac{\hbar^2 \omega_0^2}{m_\parallel \tilde{\omega}^2} K_x q_x + \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{2m_\parallel \tilde{\omega}^2} q_x^2 + 2\beta \hbar_x \int \langle s_x \rangle h(\omega_p) d\omega_p + \hbar \Omega_0 \right], \quad (2.9)$$

где ω_p -резонансная частота.

$$\text{Вычислим } s_x^* = \int \langle s_x \rangle h(\omega_p) d\omega_p .$$

Дайсон [71] в своей теории формы линии показал, что для пленок проводника толщиной $d < 4\delta_0$ (δ_0 - классическая глубина скин-слоя) кривая парамагнитного резонанса имеет лоренцеву форму и не зависит от длины диффузии электронов. Кроме того, при малых толщинах пленки начинает проявляться дополнительный механизм спиновой релаксации из-за рассеяния электронов на поверхности. В результате время спин-спиновой релаксации T_2 уменьшается, а в полной ширине появляется дополнительное слагаемое, обусловленное неупругим рассеянием электронов на поверхности

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_1} + \frac{1}{T_S} \quad (2.9a)$$

где T_S – время спиновой поверхностной релаксации.

В случае, когда толщина пленки меньше или порядка длины свободного пробега то, согласно утверждению Дайсона,

$$T_S = \frac{4d}{\varepsilon_0 v_F}$$

где ε_0 – усредненная по возможным углам рассеяния вероятность переориентации спина при одном акте столкновения электронов проводимости с поверхностью. Величина ε_0 определялась экспериментально в [55,56] и для лития была получена оценка $\varepsilon_0 \leq 9 \cdot 10^{-6}$ [55] и $\varepsilon \approx 8 \cdot 10^{-6}$ [56]. Тогда для пленки толщиной $d \sim 10^{-6}$ см получим $T_S \sim 5 \cdot 10^{-9}$ сек.

Учет размерного квантования изменяет время релаксации электронов по импульсам по сравнению с массивным образцом. Время релаксации по импульсам τ в пленке при низких температурах при условии заполнения одного уровня определяется следующим образом [12]

$$\frac{1}{\tau} = \frac{3m^* c_1^2 \mu}{d \hbar^3 \rho u^2}$$

где c_1 – константа деформационного потенциала. Для пленок Bi с $n \sim 10^{17}$ см⁻³, $m^* \sim 0,01m_0$, $u \sim 10^5$ см/сек., $d \sim 10^{-6}$ см, получаем $\tau \sim 10^{-9}$ сек, μ – химический потенциал.

С другой стороны, из теории Эллиота [33] следует связь между временем релаксации электронов по импульсам и временем спин-решеточной релаксации

$$T_1 = \tau \left(\frac{E_g}{\varepsilon_F} \right)^2 \left(\frac{m}{m^*} \right)^2 \frac{1}{(\delta g)^2},$$

где E_g – энергия щели, δg – сдвиг на краю зоны порядка $\delta g \sim \frac{p^2}{m_{\parallel} E_g} \frac{\Delta}{\Delta + E_g}$, Δ – спин-орбитальное расщепление. Тогда T_1 для висмута с $E_g = 0,015 \cdot 10^{-12}$ эрг (как это следует из магнитопленочных измерений), с электронным g -фактором, равным 2, получаем $T_1 \sim 2 \cdot 10^{-7}$ сек. Подставляя значения T_1 и T_S в выражение (2.9а), получим $T_2 \sim 10^{-10}$ сек.

Таким образом, в пленке $T_1 \gg T_2$, то есть поглощенная энергия передается сначала спин-спиновым степеням свободы и далее от последних в решетку.

В проводящих средах необходимо писать уравнение Блоха с дополнительным членом, учитывающим диффузионное движение электронов проводимости [34]. Однако диффузионное уширение становится очень малым, если размеры образцов малы по сравнению с глубиной скин-слоя, что мы имеем для случая рассматриваемых нами квантованных пленок. Остается еще ширина, которая быстро увеличивается с повышением температуры и потому, вероятно, связана со спин-решеточной релаксацией.

Для лоренцевой неоднородно уширенной линии

$$h(\omega_p) = \frac{\Omega_1 \pi^{-1}}{(\omega_p - \Omega_{\text{ц}})^2 + \Omega_1^2}$$

(Ω_1 – неоднородная ширина линии, $\Omega_{\text{ц}}$ – центральная частота), подставляя значение $\langle s_x \rangle$, найденное из системы уравнений Блоха для случая, когда на спин-систему действуют одновременно два поля – электромагнитное и акустическое [30], получим:

$$\begin{aligned}
s_x^* &= \frac{S_0 M_1 (1 + \Omega_1 T_3)}{(\Omega_0 - \Omega_u)^2 + (\Omega_1 + T_3^{-1})^2} + \frac{S_0 R^* (\Omega_0 - \Omega_u)}{(\Omega_0 - \Omega_u)^2 + (\Omega_1 + T_3^{-1})^2}, \\
M_1 &= \frac{G \Omega_0 f}{u \hbar T_2} - \frac{f \omega_1 \sin(\alpha + \varphi)}{T_2 R} + \frac{g \omega_1 \cos(\alpha + \varphi)}{T_2 R}, \\
R^* &= \frac{G \Omega_0 g}{u \hbar} + \frac{f \omega_1 \cos(\alpha + \varphi)}{R} - \frac{g \omega_1 \sin(\alpha + \varphi)}{R}, \\
T_3 &= T_2 \left\{ 1 + T_1 T_2 \left[(A f + \omega_1 \sin \alpha)^2 + (A g + \omega_1 \cos \alpha)^2 \right] \right\}^{-\frac{1}{2}},
\end{aligned} \tag{2.10}$$

где $A = G q \hbar^{-1}$, $\varphi = \Phi_2(x, t)$, $\omega_1 = -\gamma H_1$, G – константа спин-фононного взаимодействия, электромагнитная волна имеет вид

$$\vec{H}(z, t) = \text{Re } \vec{H}_1(z, t) \exp(i \Omega_0 t)$$

звуковая волна есть

$$\begin{aligned}
u(x, t) &= \text{Re} \left[f(x, t) + i g(x, t) \right] \exp \left[i (\Omega_0 t - q_x x) \right] = \\
&= \text{Re} R(x, t) \exp \left\{ \left[\Omega_0 t - q_x x + \Phi_2(x, t) \right] \right\}
\end{aligned}$$

$R(x, t)$ – амплитуда смещения звуковой волны, $f(x, t)$, $g(x, t)$ – действительные функции, Φ_2 – фаза упругой волны, $\Delta = \Omega_0 - \omega_p$, $\alpha = q_x x$, $S_0 = \frac{1}{2} \text{th} \left(\frac{\hbar \omega_p}{2 k_B T} \right)$ – среднее значение $\langle s_z \rangle$ в термодинамическом равновесии.

Подставляя выражение для матричного элемента $c_{MM'}$ (в полупроводниках и полуметаллах с плотностью носителей $n_e \leq 10^{19} \text{ см}^{-3}$ электрон-фононная связь осуществляется в основном через потенциал деформации) в выражение (2.9) и интегрируя по K_x , для коэффициента поглощения звука $\alpha(\vec{q})$ получим [35], [73]:

$$\alpha(\vec{q}) = \frac{L_x A^2 K^2 q_{\rho'}^4 R^2 \beta s_x^* \hbar m_{\parallel} \tilde{\omega}^2}{\pi \hbar^3 u \omega_0^2 q_x} e^{-q_{\rho'}^2 l^2} \delta \left(\frac{\hbar^2 \omega_0^2 q_x^2}{2 m^* \tilde{\omega}^2} + \hbar \Omega_0 - \mu \right), \tag{2.11}$$

где $A = c_1 \delta g \hbar^2 (m E_g)^{-1}$, $q_{\rho'}^2 = (q_{x'} - q_x)^2 + q_{y'}^2$.

Так как $l^2 = \hbar m^{-1} \left(\sqrt{\frac{\hbar^2 \pi^4}{m_{\perp}^2 d^4} + \frac{e^2 H_z^2}{c (m_{\perp} m_{\parallel})^{1/2}}} \right)^{-1}$, коэффициент поглощения растет с

увеличением H и уменьшением d . Резонансным значением q_x для Bi является $q_x \sim 10^6 \text{ см}^{-1}$. Определим значение величины s_x^* . Для этого сделаем оценку отдельных

слагаемых в формуле (2.10). При этом будем использовать следующие значения физических величин, характерных для висмута : $G \sim 5,7 \cdot 10^{-14}$ эрг, $\Omega_0 \sim 10^{11} \text{ с}^{-1}$, $\Omega_1 \sim 10^9 \text{ с}^{-1}$, $\omega_1 \sim 10^5 \text{ с}^{-1}$, $u \sim 10^5 \text{ см/с}$, $R \sim 10^{-9} \text{ см}$. Тогда вклад второго слагаемого в (2.10), пропорционального $\Omega_0 - \Omega_u$, превышает вклад первого слагаемого и для s_x^* получаем $s_x^* \sim 5,7 \cdot 10^{-3}$.

Таким образом, знак s_x^* зависит от частоты подаваемого электромагнитного поля ($\Omega_0 > \Omega_u$ или $\Omega_0 < \Omega_u$) и от знака S_0 . Тогда в зависимости от знака S_0 и частоты подаваемого переменного магнитного поля коэффициент поглощения может быть положительным или отрицательным (усиление звука). Причем поглощение и усиление происходят при разных частотах. Подставляя в выражение для коэффициента поглощения соответствующие численные значения величин, получим для висмута $\alpha \sim 10 \text{ см}^{-1}$.

Таким образом, резонансное поглощение звука в висмуте является существенным (в щелочных металлах на частоте звука $\Omega_0 \sim 10^9 \text{ Гц}$ $\alpha \sim 10^{-3} \text{ см}^{-1}$ [74]).

Как хорошо известно, в проводнике, кроме рассмотренного нами резонансного поглощения звука электронами проводимости, имеет место затухание звука, связанное с решеточным поглощением. При высоких частотах и высоких температурах доминируют механизмы решеточного поглощения. По мере снижения температуры решеточный вклад в затухание уменьшается, а электронное затухание при высоких частотах остается постоянным.

Таким образом, при рассматриваемых нами высоких частотах и низких температурах доминирующим вкладом в поглощение звука является электронное поглощение.

2.3. Поглощение ультразвука в поле электромагнитной волны при нелинейном электрон-фононном взаимодействии [75]

При распространении ультразвука высокой частоты и переменного электромагнитного поля в твердом теле возможны специфические нелинейные эффекты. В работах, например, [76,77], рассматриваются нелинейные эффекты при усилении гиперзвуковых волн в постоянном электрическом поле для случая $ql \gg 1$. Они связаны с нарушением под действием электрического поля и звука равновесного распределения

носителей по импульсам и последующим влиянием таких неравновесных носителей на условия распространения звука. Известно, что для наблюдения квантовых размерных эффектов необходимо проводить исследования на достаточно совершенных образцах при низких температурах с высокой подвижностью и малой эффективной массой носителей. С другой стороны, при этих условиях при достаточной интенсивности звука необходимо учитывать неупругость электрон-фоонных взаимодействий. Поэтому представляет интерес рассмотреть особенности распространения звука в нелинейном приближении электрон-фоонного взаимодействия в поле электромагнитной волны. Как будет показано, наличие переменного электромагнитного поля и размерного квантования вносят ряд особенностей.

Основные допущения.

Пусть имеется вырожденная размерно квантованная электрон-фоонная система (например, полуметалл) в поле плоской электромагнитной волны частоты Ω , удовлетворяющей неравенствам:

$$1 \ll \Omega \tau < \frac{c}{v_0}; \quad qv_0 \gg \frac{1}{\tau}; \quad \Omega > \omega_p,$$

где $\bar{c}$ – скорость света, $\bar{v}_0$ – скорость электрона на поверхности Ферми, τ – время релаксации электронов по импульсам, $\bar{q}$ – квазиимпульс фонона, ω_p – электронная плазменная частота.

Эти условия обеспечивают проникновение электромагнитной волны в глубь образца, означают, что длина электромагнитной волны гораздо больше длины свободного пробега электрона и длины волны фонона. Условие $\Omega \tau \gg 1$ означает, что электроны успевают совершить много колебаний в поле волны за время между столкновениями τ . Если электронный газ вырожден, и это вырождение не снимается под действием электромагнитного поля и звука, то для вычисления интегральных по энергии величин детальный ход функции распределения электронов по импульсам в области фермиевских импульсов может не иметь значения. В этом случае можно просто заменить функцию распределения ступенькой Ферми. Механизм взаимодействия электронов с ультразвуковым полем будем считать произвольным.

Основные уравнения и решения.

Таким образом, можно ограничиться рассмотрением электрон-фоонной системы в пространственно однородном синусоидальном электрическом поле частоты Ω . Ось z

направлена параллельно поверхности пленки. Электромагнитная волна с напряженностью электрического поля $\vec{E}_0$ распространяется перпендикулярно поверхности в направлении y . Волновой вектор звука ориентирован в плоскости пленки. Положим, $\vec{A} = \vec{A}_p$, то есть вектор-потенциал находится в плоскости пленки. Тогда гамильтониан электронов в пленке, взаимодействующих с высокочастотным полем и звуком, можно записать в виде ($\hbar = 1$) :

$$H(t) = \sum_{\nu, \vec{p}} \varepsilon_{\nu} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) a_{\nu}^+ (\vec{p}) a_{\nu} (\vec{p}) + \sum_{\nu, \nu', \vec{p}, \vec{q}} c_{\nu\nu'} (\vec{q}) \{ a_{\nu}^+ (\vec{p}) a_{\nu'} (\vec{p} - \vec{q}) \times \\ \times b(\vec{q}) - a_{\nu'}^+ (\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu} (\vec{p}) b^+ (\vec{q}) \} + \sum_{\nu, \nu', \vec{p}, \vec{q}} c'_{\nu\nu'} (\vec{q}) \{ a_{\nu}^+ (\vec{p} + \vec{q}) a_{\nu'} (\vec{p} - \vec{q}) \times \\ \times b(\vec{q}) b(\vec{q}) + a_{\nu'} (\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu}^+ (\vec{p} + \vec{q}) b^+ (-\vec{q}) b^+ (-\vec{q}) \} + \sum_{\vec{q}} \omega_0 (\vec{q}) b^+ (\vec{q}) b(\vec{q}),$$

где $c_{\nu\nu'} (\vec{q})$, $c'_{\nu\nu'} (\vec{q})$ –матричные элементы электрон-фононного взаимодействия соответственно в линейном и нелинейном приближении, ν –номер подзоны пленки, $\varepsilon_{\nu} (\vec{p}) = p_{\rho}^2 / 2m + \hbar^2 \pi^2 \nu^2 / 2md^2$, $\nu = 1, 2, \dots$ –энергия электрона в пленке [12], a^+, a, b^+, b – электронные и фононные операторы рождения и уничтожения, $\omega_0 (\vec{q}) = |\vec{u}| |\vec{q}|$, $\vec{u}$ –скорость звука, $\vec{p}$ –квазиимпульс электрона, d –толщина пленки, m –эффективная масса электрона. Электрическое поле выбираем в виде:

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \sin \Omega t.$$

Используя каноническое преобразование с помощью унитарного оператора

$$s(t) = \exp \sum_{\nu, \vec{p}} \{ i f(t, \vec{p}) a_{\nu}^+ (\vec{p}) a_{\nu} (\vec{p}) \} \\ f(t, \vec{p}) = \int_{-\infty}^t \left\{ \frac{e}{mc} \vec{A}(t') \vec{p} - \frac{e^2}{2mc^2} A^2(t') \right\} dt',$$

перенесем зависимость от электромагнитного поля с первого члена гамильтониана на второй

$$\begin{aligned}
\tilde{H}(t) = & s^+ \left\{ -i \frac{\partial}{\partial t} + H(t) \right\} s = \sum_{\nu, \vec{p}} \varepsilon_{\nu}(\vec{p}) a_{\nu}^+(\vec{p}) a_{\nu}(\vec{p}) + \\
& + \sum_{\nu, \nu', \vec{p}, \vec{q}} c_{\nu\nu'}(\vec{q}) \left\{ \exp[if_1(t, \vec{q})] a_{\nu}^+(\vec{p}) a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) b(\vec{q}) - \right. \\
& - \exp[-if_1(t, \vec{q})] a_{\nu}^+(\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu'}(\vec{p}) b^+(\vec{q}) \left. \right\} + \sum_{\nu\nu' \vec{p} \vec{q}} c'_{\nu\nu'}(\vec{q}) \times \\
& \times \left\{ \exp[-2if_1(t, \vec{q})] a_{\nu}^+(\vec{p} + \vec{q}) a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) b(\vec{q}) b(\vec{q}) + \exp[2if_1(t, \vec{q})] \times \right. \\
& \times a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu}^+(\vec{p} + \vec{q}) b^+(-\vec{q}) b^+(-\vec{q}) \left. \right\} + \sum_{\vec{q}} \omega_0(\vec{q}) b^+(\vec{q}) b(\vec{q}).
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Разлагая $\exp[if_1(t, \vec{q})]$ и ряд по бесселевым функциям и предполагая адиабатически медленное включение поля при $t \rightarrow -\infty$, приведем гамильтониан к виду

$$\begin{aligned}
\tilde{H}(t) = & \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu}(\vec{p}) a_{\nu}^+(\vec{p}) a_{\nu}(\vec{p}) + \sum_{s=-\infty}^{\infty} c_{\nu\nu'}(\vec{q}) \left\{ J_s(aq) e^{is\Omega t} a_{\nu}^+(\vec{p}) \times \right. \\
& \times a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) b(\vec{q}) - J_s(aq) e^{-is\Omega t} a_{\nu}^+(\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu'}(\vec{p}) b^+(\vec{q}) \left. \right\} + \\
& + \sum_{s=-\infty}^{\infty} \sum_{\nu, \nu', \vec{p}, \vec{q}} c'_{\nu\nu'}(\vec{q}) \left\{ J_s(a_1 q) e^{is\Omega t} a_{\nu}^+(\vec{p} + \vec{q}) a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) b(\vec{q}) b(\vec{q}) + \right. \\
& + J_s(a_1 q) e^{-is\Omega t} a_{\nu}(\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu'}^+(\vec{p} + \vec{q}) b^+(-\vec{q}) b^+(-\vec{q}) \left. \right\} + \sum_{\vec{q}} \omega_0(\vec{q}) b^+(\vec{q}) b(\vec{q}),
\end{aligned} \tag{2.13}$$

где $a = eE_0/m\Omega^2$; $a_1 = 2a$, a – амплитуда колебаний электрона в поле волны. С помощью приведенного гамильтониана, используя предположение о малости электрон-фононного взаимодействия, запишем уравнения движения для усредненных фононных операторов $\langle b \rangle$ и $\langle b^+ \rangle$

$$i \frac{d\langle b \rangle}{dt} = \sum c_{\nu\nu'}(\vec{q}) J_s(aq) e^{-is\Omega t} \langle a_{\nu'}^+(\vec{p} - \vec{q}) a_{\nu}(\vec{p}) \rangle + \tag{2.14}$$

$$+ \sum \sum 2c'_{\nu\nu'} J_s(aq) e^{-is\Omega t} \langle b^+(\vec{q}) \rangle [n_{\nu}(\vec{p} + \vec{q}) - 1] - \omega_0(\vec{q}) \langle b(\vec{q}) \rangle;$$

$$i \frac{d\langle b^+ \rangle}{dt} = \sum \sum c_{\nu\nu'}(\vec{q}) J_s(aq) e^{is\Omega t} \langle a_{\nu}^+(\vec{p}) a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) \rangle + \tag{2.14a}$$

$$+ 2c'_{\nu\nu'} J_s(a_1 q) e^{is\Omega t} \langle a_{\nu}^+(\vec{p} + \vec{q}) a_{\nu'}(\vec{p} - \vec{q}) \rangle \langle b(\vec{q}) \rangle + \sum \omega_0(\vec{q}) \langle b^+(\vec{q}) \rangle.$$

Здесь мы пользуемся обозначением $\langle x \rangle = Sp[x\rho(t)]$, где $\rho(t)$ – матрица плотности системы, $n_{\nu}(\vec{p})$ – числа заполнения состояний с заданным квазиимпульсом в различных подзонах пленки. Малость электрон-фононного взаимодействия позволяет произвести при получении (2.14), (2.14a) расщепления вида:

$$\langle a_v^+(\vec{p}-\vec{q})a_v(\vec{p})b(\vec{q}) \rangle \approx \langle a_v^+(\vec{p}-\vec{q})a_v(\vec{p}) \rangle \langle b(\vec{q}) \rangle.$$

Входящие в (2.14), (2.14a) функции

$$\langle a_v^+(\vec{p}-\vec{q})a_v(\vec{p}) \rangle, \quad \langle a_v^+(\vec{p})a_v(\vec{p}-\vec{q}) \rangle, \quad \langle a_v^+(\vec{p}+\vec{q})a_v(\vec{p}-\vec{q}) \rangle \langle b(\vec{q}) \rangle$$

определим из уравнений движения на эти функции в линейном приближении (при этом мы пренебрегаем членами, малыми по константе взаимодействия) и подставим полученные выражения в уравнения (2.14), (2.14a). Затем, решая систему уравнений (2.14), (2.14a), полагая $\nu = \nu'$, получим нелинейное уравнение относительно $\langle b^+ \rangle$:

$$\begin{aligned} i \frac{d\langle b^+ \rangle}{dt} = & (-i)c_{\nu\nu'}^2(\vec{q})J_s(aq)J_{s'}(aq)e^{is\Omega t}[n_\nu(\vec{p})-n_\nu(\vec{p}-\vec{q})] \times \\ & \times e^{-[\varepsilon_\nu(\vec{p})-\varepsilon_\nu(\vec{p}-\vec{q})]t} \int e^{i[\varepsilon_\nu(\vec{p})-\varepsilon_\nu(\vec{p}-\vec{q})]t'} e^{-is\Omega t} \langle b^+(\vec{q}) \rangle dt' + \\ & + \omega_0(\vec{q})\langle b^+(\vec{q}) \rangle + \sum 4c_{\nu\nu'}'^2(\vec{q})J_s^3(aq)J_{s'}(a_1q) \times \\ & \times [n_\nu(\vec{p}+\vec{q})-1]J_{s''}^2(-\alpha)J_{s'''}^2(-\alpha)J_{s''}^2(\alpha)J_{s'''}^2(\alpha) \times \\ & \times c_{\nu\nu'}^2(\vec{q})[n_\nu(\vec{p})-n_\nu(\vec{p}-\vec{q})]ie^{is\Omega t}e^{-i[\varepsilon_\nu(\vec{p}+\vec{q})-\varepsilon_\nu(\vec{p}-\vec{q})]t} \times \\ & \times e^{is''[\frac{\pi}{2}-(s'-s)\Omega t]}e^{i\omega_0 t}e^{is''(s'-s)\Omega t} \int dt' e^{is''[\frac{\pi}{2}-(s'-s)\Omega t']} \times \\ & \times e^{is'''(s'-s)\Omega t'}e^{i[\varepsilon_\nu(\vec{p}+\vec{q})-\varepsilon_\nu(\vec{p}-\vec{q})]t'}e^{i\omega_0 t'}e^{i\omega_0 t} \times e^{is''[\frac{\pi}{2}-(s'-s)\Omega t]}e^{is'''(s'-s)\Omega t} \int e^{-i\omega_0 t'}e^{is''[\frac{\pi}{2}-(s'-s)\Omega t]} \times \\ & \times e^{is'''(s'-s)\Omega t'}e^{-is\Omega t'}e^{-is\Omega t}e^{-[\varepsilon_\nu(\vec{p})-\varepsilon_\nu(\vec{p}-\vec{q})]t} \times \int e^{i[\varepsilon_\nu(\vec{p})-\varepsilon_\nu(\vec{p}-\vec{q})]t'}e^{is'\Omega t'}dt' \langle b^+(\vec{q}) \rangle^3. \end{aligned} \quad (2.15)$$

При получении (2.15) использовано разложение $e^{i\alpha \sin \varphi} = \sum_{s=-\infty}^{\infty} J_s(\alpha) e^{is\varphi}$, где

$$\alpha = \frac{J_s(aq)J_{s'}(aq)c_{\nu\nu'}^2(\vec{q})[n_\nu(\vec{p})-n_\nu(\vec{p}-\vec{q})]}{[\varepsilon_\nu(\vec{p})-\varepsilon_\nu(\vec{p}-\vec{q})-s'\Omega+i\delta](s'-s)\Omega}.$$

Делая подстановку $\langle b^+(\vec{q}) \rangle = y^{-1/2}$ и переходя в полученном линейном относительно y уравнении к Фурье образам, получим дисперсионное уравнение для фононов в виде:

$$\begin{aligned}
(\omega + 2\omega_0)B(\vec{q}, \omega) = & - \sum_{s, \nu, \vec{p}} 2c_{\nu\nu}^2(\vec{q})J_s(aq)J_{s'}(aq)B[\vec{q}, \omega + (s' - s)\Omega] \times \\
& \times \frac{[n_\nu(\vec{p}) - n_\nu(\vec{p} - \vec{q})]}{[\varepsilon_\nu(\vec{p} - \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p}) + \omega + s\Omega - i\delta]} + 4 \sum_{s, s'', s''', \vec{p}} c_{\nu\nu}'^2 c_{\nu\nu}^2 J_s^3(aq)J_{s'}(a_1q) \times \\
& \times [n_\nu(\vec{p} + \vec{q}) - 1]J_{s''}^2(-\alpha)J_{s'''}^2(-i\alpha)J_{s''}^2(\alpha)J_{s'''}^2(i\alpha)[\varepsilon_\nu(\vec{p} - \vec{q}) - \\
& - \varepsilon_\nu(\vec{p} + \vec{q}) + \omega_0 - s'\Omega - \omega + 3s''(s' - s)\Omega - 3s'''(s' - s)\Omega - i\delta]^{-1} \times \\
& \times \frac{[n_\nu(\vec{p}) - n_\nu(\vec{p} - \vec{q})]\delta[(s' + s)\Omega + \omega + 4s'''(s' - s)\Omega - 4s''(s' - s)\Omega]}{[\varepsilon_\nu(\vec{p} - \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p}) + s'\Omega - \omega - i\delta][\omega_0 - \omega + (s' - s)\Omega(s'' - s''') + s\Omega - i\delta]},
\end{aligned} \tag{2.16}$$

где $B(\vec{q}, \omega)$ –образ Фурье для y . Так как s'', s''' - целые числа, то $J_{s''}^2(-i\alpha) = i^{2s''} J_{s''}^2(-\alpha)$ и т.д.

Отделяя мнимую часть $Im(\omega/u)$ и полагая $s'' = s'''$, находим коэффициент поглощения в виде:

$$\begin{aligned}
\beta = & \sum_{\nu, s, s', \vec{p}} \frac{-2c_{\nu\nu}^2(\vec{q})J_s(aq)J_{s'}(aq)B[\vec{q}, \omega + (s' - s)\Omega]}{uB(\vec{q}, \omega)} \times \\
& \times [n_\nu(\vec{p}) - n_\nu(\vec{p} - \vec{q})]\delta[\varepsilon_\nu(\vec{p} - \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p}) + \omega + s\Omega] + \frac{4}{uB(\vec{q}, \omega)} \times \\
& \times \sum J_s^3(aq)J_{s'}(a_1q)J_{s''}^4(-\alpha)J_{s'''}^4(\alpha)[n_\nu(\vec{p} + \vec{q}) - 1][n_\nu(\vec{p}) - n_\nu(\vec{p} - \vec{q})] \times \\
& \times c_{\nu\nu}^2(\vec{q})c_{\nu\nu}'^2(\vec{q})\delta[(s' + s)\Omega + \omega] \left\{ \frac{\pi\delta[\omega_0 - \omega + s\Omega]}{[\varepsilon_\nu(\vec{p} - \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p}) + s'\Omega - \omega]} \times \right. \\
& \times \frac{1}{[\varepsilon_\nu(\vec{p} - \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p} + \vec{q}) + \omega_0 - s'\Omega - \omega]} + \frac{\pi\delta[\varepsilon_\nu(\vec{p} + \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p}) + s'\Omega - \omega]}{[\varepsilon_\nu(\vec{p} - \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p} + \vec{q})] + \omega_0 - s'\Omega - \omega} \times \\
& \times \frac{1}{[\omega_0 - \omega + s\Omega]} + \frac{\pi\delta[\varepsilon_\nu(\vec{p} - \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p} + \vec{q}) + \omega_0 - s'\Omega - \omega]}{[\varepsilon_\nu(\vec{p} - \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p}) + s'\Omega - \omega][\omega_0 - \omega + s\Omega]} - \\
& \left. - \pi^3\delta[\varepsilon_\nu(\vec{p} + \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p}) + s'\Omega - \omega]\delta[\omega_0 - \omega + s\Omega]\delta[\varepsilon_\nu(\vec{p} - \vec{q}) - \varepsilon_\nu(\vec{p} + \vec{q}) + \omega_0 - \omega - s\Omega] \right\}
\end{aligned} \tag{2.17}$$

Пренебрегая членами, дающими малый вклад по параметру $\sim \frac{1}{\omega_0^3}, \frac{1}{\omega_0^4}$ по сравнению с

$\sim \frac{1}{\omega_0^2}$, интегрируя по $\vec{p}$ в двумерном $\vec{p}$ –пространстве пленки $pdpd\theta$, и вводя $\hbar$,

получим:

$$\begin{aligned}
\beta = & \frac{-Sc_{vv}^2(\vec{q})J_s^2(aq)}{2\pi\hbar^3u} \left[\sum_{s=-\infty}^{\infty} J_s^2(aq) \left(\frac{\hbar q}{2} + mu + \frac{s\Omega m}{q} \right) \times \right. \\
& \times \frac{m}{\sqrt{8m \left(\mu - \frac{\hbar^2 \pi^2 v^2}{2md^2} \right) - (\hbar q + 2mu + 2sm\Omega/q)^2}} + J_0^2(aq) \left(\frac{\hbar q}{2} + mu \right) \times \frac{m}{\sqrt{8m \left(\mu - \frac{\hbar^2 \pi^2 v^2}{2md^2} \right) - (\hbar q + 2mu)^2}} \left. \right] \\
& - \frac{4S}{\pi\hbar^3uB(\vec{q},\omega)} \times \sum J_s^3(aq) J_{s'}(a_1q) J_{s''}^4(-\alpha_1) J_{s'''}^4(\alpha_1) c_{vv}^2(\vec{q}) c_{vv}'^2(\vec{q}) \times \frac{\delta[\hbar(s'+s)\Omega + \hbar\omega]}{\hbar(\omega_0 - \omega + s\Omega)} \\
& \left[n_v(\vec{p} + \vec{q}) - 1 \right]_{p=p_0, \theta=\theta_0} \times \frac{m^2}{\hbar \left(\omega_0 - 3\omega + s'\Omega + \frac{\hbar q^2}{m} \right)} \times \frac{\left(\omega - \frac{\hbar q^2}{2m} - s'\Omega \right)}{q \sqrt{8m \left(\mu - \frac{\hbar^2 \pi^2 v^2}{2md^2} \right) - 4 \frac{m^2}{q^2} \left(\omega - s'\Omega - \frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2}} \Bigg\}, \quad (2.18)
\end{aligned}$$

где μ - энергия электрона на поверхности Ферми, S - площадь поверхности пленки:

$$\alpha_1 = (\alpha)_{\theta_0 = \arccos \left[-\frac{s'\Omega m}{pq} + \frac{um}{p} - \frac{\hbar q}{2p} \right]}; \quad |p| \rightarrow \sqrt{2m \left(\mu - \frac{\hbar^2 \pi^2 v^2}{2md^2} \right)} = p_0$$

Здесь использовано $\frac{\partial n_v(p)}{\partial \varepsilon_v(p)} = -\delta(\varepsilon_v(p) - \mu)$, δ - дельта функция Дирака.

Таким образом, на частоте звука, кратной частоте электромагнитного поля наблюдается нелинейный эффект, проявляющийся в изменении коэффициента поглощения звука при учете нелинейного электрон-фононного взаимодействия, происходящем, вероятно, из-за искажения функции распределения электронов по импульсам в поле электромагнитной и звуковой волн. При $c'_{vv} \rightarrow 0$ формула переходит в формулу для линейного коэффициента поглощения [65].

Отделяя члены с положительным и отрицательным s' и подставляя значения $c_{vv}(\vec{q}), c'_{vv}(\vec{q})$ [78,79], например, для деформационного электрон-фононного взаимодействия, для нелинейного коэффициента поглощения получим:

$$\begin{aligned}
\beta_{n-l} = & \sum_{s'=0}^{\infty} \sum_{\nu, s, s''} \frac{c_1^2 c_2^2 q^6 \pi^7 \nu^8 (\vec{e}_{q\mu} \vec{e}_{q\nu})^2 (1 - \cos q_y d) (1 - \cos 2q_y d) J_s^3(aq)}{2 \rho_0^3 \nu^2 \omega_q^3 q_y^4 d^5 (4\pi^2 \nu^2 - q_y^2 d^2)^2 (\pi^2 \nu^2 - q_y^2 d^2)^2 uB(q, \omega)} \times \\
& \times \left\{ J_{s'}(a_1 q) J_{s''}^4(-\alpha_1)_{s'>0} J_{s''}^4(\alpha_1)_{s'>0} \frac{\delta\{\hbar[(s'+s)\Omega + \omega]\} [n_\nu(p+q) - 1]_{p=p_0, \theta=\theta_0}}{\hbar(\omega_0 - \omega + s\Omega)} \times \right. \\
& \times \frac{m^2 \left(\omega - \frac{\hbar q^2}{2m} - s'\Omega \right)}{q \sqrt{8m \left(\mu - \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{2md^2} \right) - \frac{4m^2}{q^2} \left(\omega - s'\Omega - \frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2} \hbar \left(\omega_0 - 3\omega + s'\Omega + \frac{\hbar q^2}{m} \right)} + \\
& + J_{-s'}(a_1 q) J_{s''}^4(-\alpha_1)_{s'<0} J_{s''}^4(\alpha_1)_{s'<0} \frac{\delta\{\hbar[(s-s')\Omega + \omega]\} [n_\nu(p+q) - 1]_{p=p_0, \theta=\theta_0}}{\hbar(\omega_0 - \omega + s\Omega)} \times \\
& \times \left. \frac{m^2 \left(\omega - \frac{\hbar q^2}{2m} + s'\Omega \right)}{q \sqrt{8m \left(\mu - \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{2md^2} \right) - \frac{4m^2}{q^2} \left(\omega + s'\Omega - \frac{\hbar q^2}{2m} \right)^2} \hbar \left(\omega_0 - 3\omega - s'\Omega + \frac{\hbar q^2}{m} \right)} \right\}, \quad (2.19)
\end{aligned}$$

где c_1, c_2 – константы деформационного взаимодействия, d – толщина пленки, ν – объем, ρ_0 – плотность вещества, $\vec{e}_{q\mu}$ – вектор поляризации.

Таким образом, коэффициент поглощения, осциллируя, уменьшается с увеличением толщины пленки. При этом зависимость от толщины сильнее, чем в линейной теории [65].

Как видно из (2.19), при увеличении частоты звука, вводимого в кристалл, коэффициент поглощения уменьшается, что характерно для рассматриваемого типа нелинейности [62], то есть с увеличением частоты нелинейные эффекты проявляются сильнее.

При значениях q , удовлетворяющих условиям

- 1) $q\nu_{0\nu} = \omega - s'\Omega - \frac{\hbar q^2}{2m}$
- 2) $q\nu_{0\nu} = \omega + s'\Omega - \frac{\hbar q^2}{2m}$

в поглощении звука наблюдается ряд резонансов с индексами ν и s . Амплитуда резонансных осцилляций существенно меньше, чем в линейном случае.

При выполнении первого условия наибольший вклад дает первое слагаемое в выражении (3.8)

$$\beta_{n-l_1} \sim \delta[(s' + s)\Omega + \omega] \frac{m^2 v_{0v}}{\sqrt{(qv_{0v})^2 - \left(\omega - s\Omega - \frac{\hbar q^2}{2m}\right)^2} \left[\omega_0 + 2(s' + s)\Omega - qv_0 + \frac{\hbar q^2}{2m}\right]} \times$$

$$\times \left[\frac{1}{\exp[(\omega - s\Omega)/T] + 1} - 1 \right]$$

При этом, в зависимости от того $\omega_0 + 2(s' + s)\Omega > qv_{0v} - \frac{\hbar q^2}{2m}$ или $\omega_0 + 2(s' + s)\Omega < qv_{0v} - \frac{\hbar q^2}{2m}$ может происходить поглощение или усиление звука.

Аналогично получим для второго слагаемого при выполнении условия 2).

При больших значениях аргумента функции Бесселя коэффициент поглощения является осциллирующей функцией $c_{\nu\nu}(q), \Omega$.

Полученный эффект можно объяснить следующим образом: при $\Omega\tau \gg 1$ образуется группа захваченных электромагнитной волной электронов, которые взаимодействуют со звуком. Как известно, при $qv_{0v} \gg 1/\tau$ звуковая волна эффективно взаимодействует с электронами, движущимися в фазе с волной, для которых $q\vec{v}_{0v} \sim s\Omega = \omega_0$ –затухание Ландау звуковых волн. Это приводит к существенному искажению функции распределения электронов в области скоростей, удовлетворяющих резонансным условиям. Следствием же этого является изменение поглощения звука.

Для проведения эксперимента удобен полуметалл *Bi*, имеющий малую эффективную массу носителей $m^* \sim 0,01m_0$ (m_0 -масса свободного электрона) и концентрацию электронов $n \sim 10^{17} \div 10^{18}$ 1/см³. В этом полуметалле, во-первых, экспериментально было обнаружено размерное квантование при $d \sim 10^{-5} \div 10^{-6}$ см [6], во-вторых, при гелиевых температурах и $q \approx 10^4$ см⁻¹ величина $ql \approx 10^2$, что удовлетворяет принятым нами допущениям, в-третьих, в связи с малой скоростью Ферми в висмуте условия приближаются к режиму $\omega\tau > 1$.

Резонансным значением q является $q \approx 10^4$ 1/см, и наступление нелинейности ожидается при интенсивности звука порядка $10^{-6} \div 10^{-5}$ Вт/см², следовательно, при $ql > 1$ нелинейные эффекты вполне доступны для экспериментального исследования.

2.4. Фононный спектр [80]

Основные допущения.

Исследование фононного спектра дает непосредственную информацию о механизмах электрон-фононного взаимодействия. Последний вместе со статическими характеристиками электрон-фононных подсистем, по существу, определяет всю физическую кинетику.

Будем считать, что полупроводниковая пленка, в которой электронный энергетический спектр квантуется, напылена на массивный, физический бесконечный диэлектрический слой, имеющий сходные с пленкой упругие свойства. Размер пленки с подложкой можно подобрать больше длины волны фонона, и тогда фононы в пленке можно считать такими же, как в массивном образце.

Но в отсутствие размерного квантования фононного спектра, как будет показано, из-за электрон-фононного взаимодействия фононный спектр имеет квантовый характер.

Будем рассматривать фононный спектр в полупроводниковой или полуметаллической пленке при достаточно низкой температуре, так что преобладают длинноволновые фононы (что обеспечивает зеркальность отражения фононов от поверхности).

Основные уравнения и решения.

Решим задачу в адиабатическом приближении. В качестве исходного гамильтониана, описывающего систему, состоящую из электронов с массой μ и атомных ядер с массой M выбираем следующий:

$$H = T_R + T_r + V(R, r) \quad (2.20)$$

где $T_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2}$ – оператор кинетической энергии электронов, $T_R = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial R_i^2}$ – оператор кинетической энергии ядер, $V(R, r)$ – оператор энергии взаимодействия между электронами и ядрами.

С точностью до первого приближения энергия электрона равна:

$$E_v = \frac{p_\rho^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 \pi^2 v^2}{2\mu d^2} + c_1 \left(\frac{\hbar q_\rho^2}{2\rho_0 V \omega_{\bar{q}, \lambda}} \right)^{1/2} \frac{4\pi^2 v^2 (e^{iq_y d} - 1)}{(2\pi^2 v^2 - q_y^2 d^2) q_y d} \quad (2.21)$$

где c_1 – константа электрон-фононного взаимодействия, ρ_0 – плотность вещества, V – объем, q_y – волновой вектор фонона в направлении, перпендикулярном плоскости

пленки, $\omega_{\vec{q}\lambda}$ - частота фонона с импульсом $\vec{q}$ и номером ветви λ , ν - пленочное квантовое число.

Нахождение стационарных состояний системы с полным оператором Гамильтониана, т.е. решение уравнения

$$(H - E)\psi(R, r) = 0 \quad (2.22)$$

будем искать в виде

$$\psi(R, r) = \sum \Phi_n(R) \varphi_n(R, r) \quad (2.23)$$

n - совокупность квантовых чисел, характеризующих стационарное состояние.

Подставим (2.23) в (2.22) и, преобразуя, находим систему уравнений

$$[T_R + E_m(R) - E] \Phi_m(R) = \sum_n \Lambda_{mn} \Phi_n(R), \quad (2.24)$$

где
$$\Lambda_{mn} = A_{mn} + B_{mn} = \frac{\hbar^2}{M} \sum_i \int \varphi_m^*(R, r) \frac{\partial}{\partial R_i} \varphi_n(R, r) dr \frac{\partial}{\partial R_i} - \int \varphi_m^*(R, r) T_{R_0} \varphi_n(R_0, r) dr .$$

В нулевом приближении волновая функция системы сводится к простому произведению

$$\psi_{mN} = \Phi_{mN}^0(R) \varphi_m(R, r),$$

т.е. каждому состоянию движения легких частиц, определяемому квантовыми числами m , будут соответствовать состояния движения тяжелых частиц, различающихся квантовыми числами N . Энергия системы в состоянии $m\{N_{\vec{q}\lambda}\}$ будет равна

$$E_{mN_{\vec{q}\lambda}} = E_m + \hbar \sum_{\vec{q}\lambda} \omega_{\vec{q}\lambda} \left(N_{\vec{q}\lambda} + \frac{1}{2} \right) .$$

Поправка к энергии, связанная с операторами A_{mn} и B_{mn} , определяется следующим образом [63]:

$$\Delta E = \sum_{\vec{q}, \lambda} \sum_k \left| M_{\vec{k}\vec{q}\lambda} \right|^2 \left(\frac{\omega_{\vec{q}\lambda}}{E_\nu(\vec{k}) - E_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q})} \right)^2 \left\{ \left(N_{\vec{q}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \times \right. \\ \left. \times \frac{2 \left[E_\nu(\vec{k}) - E_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) \right] n_\nu(\vec{k}) \left[1 - n_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) \right]}{\left[E_\nu(\vec{k}) - E_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) \right]^2 - \omega_{\vec{q}\lambda}^2} + \frac{\omega_{\vec{q}\lambda} n_\nu(\vec{k}) \left[1 - n_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) \right]}{\left[E_\nu(\vec{k}) - E_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) \right]^2 - \omega_{\vec{q}\lambda}^2} \right\}$$

$M_{\vec{k}, \vec{q}, \lambda}$ - матричный элемент электрон-фононного взаимодействия в пленке в приближении деформационного потенциала, $n_\nu(\vec{k})$ - числа заполнения электронов, $N_{\vec{q}\lambda}$ - числа заполнения фононов.

Подставляя значение $|M_{\vec{k},\vec{q},\lambda}|^2$ для пленки, для полной энергии фононов получаем:

$$\begin{aligned}
E_{mN_{\vec{q}}} = & \hbar \sum_{\vec{q},\lambda} \omega_{\vec{q}\lambda} \left(N_{\vec{q}\lambda} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{\vec{k}\vec{q}\lambda} \frac{c_1^2 16\pi^4 \nu^2 \nu'^2 q_y^2 d^2 \hbar q_\rho^2 \left[1 - (-1)^{\nu+\nu'} \cos q_y d \right]}{\rho_0 V \omega_{\vec{q}\lambda} \left[\pi^2 (\nu + \nu')^2 - q_y^2 d^2 \right]^2 \left[\pi^2 (\nu - \nu')^2 - q_y^2 d^2 \right]^2} \times \\
& \times \left[\left(N_{\vec{q}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \frac{2 \left[E_\nu(\vec{k}) - E_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) \right] n_\nu(\vec{k}) \left[1 - n_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) \right]}{\left\{ \left[E_\nu(\vec{k}) - E_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) \right]^2 - \hbar^2 \omega_{\vec{q}\lambda}^2 \right\}} + \right. \\
& \left. + \frac{\hbar \omega_{\vec{q}\lambda} n_\nu(\vec{k}) \left[1 - n_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) \right]}{E_\nu(\vec{k}) - E_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) - \hbar^2 \omega_{\vec{q}\lambda}^2} \right] \frac{\hbar^2 \omega_{\vec{q}\lambda}^2}{\left[E_\nu(\vec{k}) - E_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) \right]^2}
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Таким образом, учет электрон-фононного взаимодействия приводит к тому, что фононный спектр становится размерно квантованным.

Для определения частоты фонона с волновым вектором $\vec{q}$ и номером ветви λ необходимо проварьировать полученное выражение по $N_{\vec{q}\lambda}$, после чего, преобразуя, получим:

$$\begin{aligned}
\omega = & \sum_{\vec{q},\lambda} \omega_{\vec{q}\lambda} + \sum_{\vec{k}\vec{q}\lambda} \frac{16c_1^2 q_\rho^2 \pi^4 \nu^2 \nu'^2 q_y^2 d^2 \left[1 - (-1)^{\nu+\nu'} \cos q_y d \right]}{\rho_0 V \omega_{\vec{q}\lambda} \left[\pi^2 (\nu + \nu')^2 - q_y^2 d^2 \right]^2 \left[\pi^2 (\nu - \nu')^2 - q_y^2 d^2 \right]^2} \times \\
& \times \left[\frac{n_\nu(\vec{k}) - n_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q})}{E_\nu(\vec{k}) - E_{\nu'}(\vec{k} + \vec{q}) - \hbar \omega_{\vec{q}\lambda} + i\delta} - \frac{n_{\nu'}(\vec{k}) - n_\nu(\vec{k} + \vec{q})}{E_{\nu'}(\vec{k}) - E_\nu(\vec{k} + \vec{q})} \right].
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Второй член в выражении (2.26) описывает адиабатический вклад электронов в частоту фононного возбуждения, первый же член описывает неадиабатическую перенормировку.

Отделяя в выражении (2.26) мнимую часть, интегрируя по $\vec{k}$, находим коэффициент затухания:

$$\begin{aligned}
\alpha(\vec{q}) = & \frac{16\pi^2 \nu^2 \nu'^2 c_1^2 m q_\rho^2 \left[1 - (-1)^{\nu+\nu'} \cos q_y d \right] q_y^2 d^2}{u \hbar^2 \rho_0 d \omega_{\vec{q}\lambda} \left[\pi^2 (\nu + \nu')^2 - q_y^2 d^2 \right]^2 \left[\pi^2 (\nu - \nu')^2 - q_y^2 d^2 \right]^2} \times \\
& \times \frac{\left[\frac{\pi^2 \hbar (\nu - \nu')}{2 q_\rho d^2} - \frac{q_\rho \hbar}{2} - m u \right]}{\sqrt{8m \left(\mu - \frac{\hbar^2 \pi^2 (\nu - \nu')^2}{2 m d^2} \right) - \left[\frac{\hbar^2 \pi^2 (\nu - \nu')^2}{q_\rho d^2} - q_\rho \hbar - 2 m u \right]^2}}
\end{aligned} \tag{2.27}$$

Рассмотрим направление $\vec{q}_\rho$ (т.е. положим $q_y = 0$). В этом случае коэффициент поглощения отличен от 0 только для одного значения $\nu = \nu'$.

Затухание фононов при этом испытывает скачки (гигантские квантовые осцилляции) при выполнении условия $\hbar k_{F_\nu} = \hbar q_\rho + m\omega$, которое совпадает с условием Гуревича, Скобова, Фирсова [18]. Коэффициент поглощения при увеличении толщины пленки, осциллируя, уменьшается.

Зависимость от толщины пленки объясняется скачкообразным изменением плотности состояний на уровне Ферми при изменении толщины пленки.

Действительная часть в выражении (2.26) после интегрирования равна ($\nu = \nu'$):

$$\begin{aligned} \text{Re } \omega = D q_\rho \left\{ \frac{2q_\rho}{\sqrt{4k_{F_\nu}^2 - q_\rho^2}} \ln \frac{1 + \frac{q_\rho}{2k_{F_\nu}} - \sqrt{1 - \left(\frac{q_\rho}{2k_{F_\nu}}\right)^2}}{1 + \frac{q_\rho}{2k_{F_\nu}} + \sqrt{1 - \left(\frac{q_\rho}{2k_{F_\nu}}\right)^2}} - \right. \\ \left. - \frac{2 \left(\frac{q_\rho}{2k_{F_\nu}} + \frac{m\omega}{\hbar k_{F_\nu} q_\rho} \right)}{\sqrt{1 + \left(\frac{q_\rho}{2k_{F_\nu}} + \frac{m\omega}{\hbar k_{F_\nu} q_\rho} \right)^2}} \ln \frac{1 + \frac{q_\rho}{2k_{F_\nu}} + \frac{m\omega}{\hbar k_{F_\nu} q_\rho} - \sqrt{1 - \left(\frac{q_\rho}{2k_{F_\nu}} + \frac{m\omega}{\hbar k_{F_\nu} q_\rho} \right)^2}}{1 + \frac{q_\rho}{2k_{F_\nu}} + \frac{m\omega}{\hbar k_{F_\nu} q_\rho} + \sqrt{1 - \left(\frac{q_\rho}{2k_{F_\nu}} + \frac{m\omega}{\hbar k_{F_\nu} q_\rho} \right)^2}} \right\}, \end{aligned} \quad (2.28)$$

где $D = \frac{32m\pi^4 c_1^2 \nu^4 q_\rho^2 (1 - \cos q_y d)}{\hbar^2 k_{F_\nu} \rho_0 d \omega_{\vec{q}\lambda} [4\pi^2 \nu^2 - q_y^2 d^2]^2 q_y^2 d^2}.$

Формулы (2.27) и (2.28) описывают изменение спектра и затухание фононов вследствие их взаимодействия с электронами.

Рассмотрим первый член в (2.28): при $q_\rho = 2k_{F_\nu}$ сама функция остается непрерывной, но ее первая производная $\frac{d\omega}{dq_\rho}$ в этой точке расходится (корневая особенность), т.е. перенормировка скорости за счет электрон-фононного взаимодействия вблизи поверхности Ферми является существенной (коновская особенность).

В пленках из-за размерного квантования поверхность Ферми принимает цилиндрическую форму.

Как показано в [58], в случае цилиндрической поверхности Ферми $\frac{d\omega}{dq}$ имеет при $q = 2k_{F_v}$ корневую особенность в отличие от слабой логарифмической особенности для сферической поверхности.

Таким образом, при переходе от массивного образца к пленке особенность в групповой скорости звука усиливается.

Во втором члене групповая скорость испытывает скачки при выполнении законов сохранения

$$E_v(\vec{k}) - E_{v'}(\vec{k} + \vec{q}) + \hbar\omega = 0.$$

Из (2.28) видно, что в пленке при цилиндрической поверхности Ферми вместо одной особенности возникает целая система особых точек, обусловленная квантованием электронных состояний на поверхности Ферми.

Экспериментально исследовать фононный спектр в пленке можно, например, по неупругому рассеянию нейтронов [81,82], а затухание фононов – методами, применяемыми при изучении гигантских осцилляций поглощения звука [83].

Д.Карлсоном и А.Зегмюллером [84] наблюдались коновские особенности электрон-фононного взаимодействия на поверхности Ферми вырожденной полупроводниковой классической пленки ($GaAs$, n -типа, $d = 10\mu k\mu$). Физический смысл особенности такой же, как у коновской особенности для скорости.

Исследование этих особенностей дает нам информацию о поверхности Ферми в пленках.

Появление особенностей, отражающих топологию поверхности Ферми, является одним из наиболее ярких проявлений роли электронов в образовании фононного спектра.

2.5. Связанные состояния электрона и оптического фонона с учетом электрон-фононного взаимодействия [85]

Основные допущения.

Основной особенностью оптических фононов является относительно большая величина их частоты при небольшой величине дисперсии. При выполнении этого условия передача электрона с узла на узел происходит с сохранением числа фононов, так как матричные элементы всех процессов, связанных с изменением числа фононов

входят с большими энергетическими знаменателями. Поэтому задача принимает из полевой: “электрон+фононное поле”-чисто динамический характер [50].

Итак, подвергнем гамильтониан системы “электрон+фононное поле” каноническому преобразованию и с погрешностью ε_{Φ}^{-1} (ε_{Φ} -энергия оптического фонона) исключим члены, не сохраняющие число фононов.

Пусть имеется полупроводниковая пленка. При вычислении спектра исходим из следующих основных предположений:

электроны взаимодействуют только с оптическими фононами;

оптические фононы не имеют дисперсии;

безразмерная константа связи $\alpha \ll 1$;

температура кристалла низка $T \ll \varepsilon_{\Phi}$;

концентрация электронов мала, так что все электроны лежат на дне низшей зоны пленки ($\nu = 1$) и можно пренебречь взаимодействием электронов между собой;

взаимодействие электронов с примесями и акустическими фононами отсутствует.

Решение для модельного гамильтониана:

Рассмотрим простейшую модель, в которой электрон взаимодействует с одной ветвью продольных оптических фононов. Для поляризационного электрон-фононного взаимодействия в пленке, не имеющего конечного радиуса действия и зависящего от модуля передачи импульса, имеем :

$$c_{\nu\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}'} c_{\nu\nu}(\vec{q}') e^{i\vec{q}'\vec{r}}, \quad (2.29)$$

где

$$c_{\nu\nu}(\vec{q}') = -\frac{c_0}{q'_p} F_{\nu\nu}(q'_y), \quad F_{\nu\nu}(q'_y) = \frac{4\pi^2 \nu^2 (1 - \cos q'_y d)}{(4\pi^2 \nu^2 - q_y'^2 d^2) q'_y d} \quad (2.30)$$

c_0 – амплитуда $c_{\nu\nu}(\vec{r})$, $|\vec{q}_1 - \vec{q}_2| = |\vec{q}'|$ -модуль передачи импульса, V -объем, $c_{\nu\nu}(\vec{r})$ – матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, в r -представлении, $F_{\nu\nu}$ – матричный элемент электрон-фононного взаимодействия в направлении, перпендикулярном плоскости пленки (y), $\vec{r} = \vec{R}_0 - \vec{Q}$ - относительная координата электрона и фонона, ν - квантовое число.

Уравнение Шредингера для пары частиц электрон+фонон в пленке с учетом электрон-фононного взаимодействия имеет вид:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \hat{\nabla}^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{2m^* d^2} + \varepsilon_\Phi + c_{vv}(\vec{r}) \right] \psi'(\vec{R}_0, \vec{Q}) = \varepsilon \psi'(\vec{R}_0, \vec{Q}) \quad (2.31)$$

ε_Φ -энергия фонона.

Проводя калибровочное преобразование аналогично [50], получим новое уравнение, в котором гамильтониан не содержит Q . Поэтому решение можно выбрать в виде:

$$\psi'(\vec{R}_0, \vec{Q}) = \psi(\vec{r}) \chi(\vec{Q}), \quad (2.32)$$

где χ – произвольная функция.

Будем рассматривать $c_{vv}(\vec{r})$ как возмущение, достаточно малое, чтобы не смешивать различные уровни пленки. Тогда положим

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}_\rho) \varphi(r_y), \quad \varphi(r_y) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin \frac{\pi}{d} \nu r_y \quad (2.33)$$

$\varphi(r_y)$ - волновая функция электрона в направлении y . Подставляя (2.32), (2.33) в (2.31), умножая обе части полученного уравнения на $\varphi^*(r_y)$ и интегрируя по r_y , найдем уравнение для волновых функций связанного состояния:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \hat{\nabla}^2 + c_{vv}(\vec{r}_\rho) \right] \varphi(\vec{r}_\rho) = W \varphi(\vec{r}_\rho), \quad (2.34)$$

где m^* -эффективная масса электрона,

$$W = \varepsilon - \frac{\hbar^2 \pi^2 \nu^2}{2m^* d^2} - \varepsilon_\Phi,$$

$$c_{vv}(r_\rho) = \int_0^d c_{vv}(r) |\varphi(r_y)|^2 dr_y = - \sum_{r_\rho} \frac{4\pi^3 \nu^4 c_0 (\cos q'_y d - 1)^2}{r_\rho (4\pi^2 \nu^2 - q_y'^2 d^2)^2 q_y'^2 d^3}.$$

В полярной системе координат:

$$\hat{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r_\rho^2} + \frac{1}{r_\rho} \frac{\partial}{\partial r_\rho} + \frac{1}{r_\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Решая (2.34) в полярных координатах, получим [86] :

$$\begin{aligned}
W_{|m|,n} &= - \sum_{q_y} \frac{8m^* \pi^6 \nu^8 c_0^2 (\cos q'_y d - 1)^4}{q_y'^4 d^6 \hbar^2 (4\pi^2 \nu^2 - q_y'^2 d^2)^4 \left(n + m + \frac{1}{2}\right)^2}, \quad n, m = 0, 1, 2, \dots \\
\varphi_{n,m} &= \exp(im\varphi) (r_\rho)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\gamma \frac{r_\rho}{a}\right) \left(\frac{r_\rho}{a}\right)^{m+\frac{1}{2}} \sum_{k=0}^n a_k \left(\frac{r_\rho}{a}\right)^k, \\
-\gamma^2 &= \frac{2m^* W a^2}{\hbar^2}, \quad a = \sum_{q_y} \frac{\hbar^2 (4\pi^2 \nu^2 - q_y'^2 d^2)^2 q_y'^2 d^3}{m^* 4\pi^3 \nu^4 c_0 (\cos q'_y d - 1)^2}.
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Энергия связи отрицательна, т.е. взаимодействие электрона и фонона является притяжением. Пространственное разделение электрона и фонона определяется длиной $\gamma^{-1}a$ и растет с ослаблением связи. Варьируя толщину пленки (d), можно менять энергию связи электрона и фонона.

Решение для поляризационного электрон-фононного взаимодействия.

Рассмотрим случай поляризационного электрон-фононного взаимодействия в двухатомных кристаллах симметрии T_d , матричный элемент которого найден в [50] для массивного образца. Для пленки матричный элемент такого взаимодействия будет иметь вид:

$$\begin{aligned}
c_{\nu\nu}(\vec{q}_1 \vec{q}_2) &= \frac{8\pi^2 e \hbar \omega_l \varepsilon_\infty (A_1 + B_1)}{\varepsilon_0^2 (\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) |\vec{q}_1 - \vec{q}_2|_\rho} i \left[\vec{1}_z \left(e_{\vec{q}_{1,x}} e_{\vec{q}_{2,y}}^* + e_{\vec{q}_{1,y}} e_{\vec{q}_{2,x}}^* \right) + \right. \\
&\quad \left. + \vec{1}_x \left(e_{\vec{q}_{1,y}} e_{\vec{q}_{2,z}}^* + e_{\vec{q}_{1,z}} e_{\vec{q}_{2,y}}^* \right) \right] F_{\nu\nu} |\vec{q}_1 - \vec{q}_2|_y
\end{aligned} \tag{2.36}$$

где $e_{\vec{q}}$ - поляризационный орт, A_1, B_1 - коэффициенты, ω_e - частота продольных колебаний, $\varepsilon_0, \varepsilon_\infty$ - диэлектрические проницаемости, $\vec{1}_z, \vec{1}_x$ - проекции единичного вектора $(\vec{q}_1 - \vec{q}_2)$ на оси z, x , соответственно.

Переходя к $\vec{r}$ -представлению и интегрируя q'_ρ по φ и ρ в плоскости пленки, получим:

$$c_{\nu\nu}(r) = -i \frac{M^*}{r_\rho}; \quad M^* = \pi \sum_{q_y} c_{\nu\nu}(\vec{q}_1, \vec{q}_2) |\vec{q}_1 - \vec{q}_2|_\rho i \sin(q_y r_y). \tag{2.37}$$

Полагая в уравнении (2.34)

$$T_{r_\rho} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{r_\rho^2} \frac{\partial}{\partial r_\rho} \left(r_\rho^2 \frac{\partial}{\partial r_\rho} \right), \quad -\frac{\hbar^2}{2m^*} \hat{\nabla}^2 = \hat{T} = \hat{T}_{r_\rho} + \frac{\hat{M}^2}{2m^* r_\rho^2},$$

где $M_l^2 = \hbar^2 l(l+1)$, $l = 0, 1, 2, \dots$ (M_l^2 -собственные значения оператора квадрата момента импульса), получим уравнение для радиальной части (при $l = 0$):

$$\hat{T}_{r_\rho} R(r_\rho) + c_{vv}(r_\rho) R(r_\rho) = W R(r_\rho). \quad (2.38)$$

Представим решение (2.38) в виде: $R(r_\rho) = u(r_\rho)/r_\rho$ и подставим значение $c_{vv}(r_\rho)$. Тогда получим уравнение Шредингера с чисто мнимым потенциалом:

$$\frac{d^2 u}{dr_\rho^2} + k^2 u + i \frac{A}{r_\rho} u = 0, \quad k^2 = \frac{2m^* W}{\hbar^2}, \quad A = \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_0^d M^* |\varphi(r_y)|^2 dr_y, \quad (2.39)$$

где $\vec{k}$ – волновой вектор электрона.

Переходя в уравнении (2.39) к новой переменной $r_\rho = i\rho$, получим новое уравнение для парциальных волн:

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + h^2 u - W_1 u = 0, \quad h = ki, \quad W_1 = \frac{A}{\rho}. \quad (2.40)$$

Уравнение (2.40) описывает связанные состояния как стационарные состояния, если l является положительным числом или нулем. Как показано в [96], k в уравнении (2.40) для связанных состояний является чисто мнимым, т.е. энергия действительна и отрицательна.

Найдем волновую функцию связанного состояния. Она может быть определена как решение Иоста уравнения (2.40). Как показано в [87]

$$\varphi_1(\lambda, h, \rho) = \frac{1}{2ih} [f(\lambda, h) f(\lambda, -h, \rho) - f(\lambda, -h) f(\lambda, h, \rho)], \quad (2.41)$$

где $f(\lambda, h) = f_0(\lambda, h) + \int_0^\infty W_1(\rho) f_0(\lambda, h, \rho) \varphi(\lambda, h, \rho) d\rho$, $\lambda = l + \frac{1}{2}$

при $l = 0$, $f_0\left(\frac{1}{2}, h\right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$, Γ - гамма функция.

По определению, функция $f(\lambda, h, \rho)$ есть:

$$f(\lambda, h, \rho) = \alpha(\rho) f_0(\lambda, h, \rho) + \beta(\rho) f_0(\lambda, -h, \rho), \quad (2.42)$$

где $f_0(\lambda, h, \rho) = \left(\frac{\pi h \rho}{2}\right)^{1/2} (-i) H_\lambda^{(2)}(h, \rho)$, $H_\lambda^{(2)}(h, \rho)$ -функция Ганкеля второго рода, $\alpha(\rho), \beta(\rho)$ -известные функции ρ .

Асимптотическое поведение и анализ функции приведены в [87].

Далее, рассмотрим частный случай уравнения (2.39). Переходя в уравнении (2.39) к безразмерной переменной: $z = r_\rho / r_0$ (r_0 -некоторый постоянный модуль радиус-вектора) и полагая $k = i/2r_0$, получим:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{x}{z}\right) u = 0. \quad (2.43)$$

Уравнение (2.43) является уравнением Уиттикера при $x = iAr_0$ и его решение следующее [88]:

$$W_{x; \frac{1}{2}}(Z) = -\frac{1}{2\pi i} \Gamma(x) e^{-\frac{1}{2}Z} z^x \int_0^{0^+} (-t)^{-x} \left(1 + \frac{t}{z}\right)^x e^{-t} dt .$$

Таким образом, в случае двумерного свободного движения и одномерного квантования электронного и фононного энергетического спектра в электрон-фононной системе (оптические фононы) существуют новые квазичастицы, которые являются связанными состояниями электрона и фонона.

Оценим величину энергии связи, используя следующие значения физических величин: $m^* = m_0 \sim 10^{-27}$ г, $d \sim 5 \cdot 10^{-7}$ см, $\omega_l \sim 8 \cdot 10^{13}$, $A_1, B_1 \approx 3 \cdot 10^{-6}$ ед. CGSE (в соответствии с [50], $\left[\frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)}\right]^{1/2} \sim 1,08$, $\varepsilon(0), \varepsilon(\infty)$ получены экспериментально из диэлектрических измерений для *GaAs*). Тогда $W_{0,|0|} \sim 5 \cdot 10^{-18}$ эрг, что находится вне возможностей наблюдения. Однако такая оценка груба, т.к. невысокая точность эксперимента позволяет определить константы A_1, B_1 только с ошибкой в несколько раз. Поскольку в энергию связи они входят в квадрате, то для “удачного” кристалла энергия связи может быть на два порядка выше, что уже наблюдаемо.

Выводы к главе 2

В поле сильной электромагнитной волны в условиях размерного квантования возможно усиление звука, которое носит осцилляционный характер в зависимости от толщины пленки.

В тонкой полупроводниковой пленке в условиях электронного парамагнитного резонанса на электронах проводимости возможно усиление звука.

При определенных значениях $\vec{E}_0$ ($\vec{E}_0$ – напряженность электромагнитного поля) среда становится прозрачной для звука (коэффициент поглощения равен нулю).

В условиях, когда необходимо учитывать неупругость электрон-фоонных взаимодействий, в размерно-квантованных средах в присутствии сильной электромагнитной волны имеют место следующие эффекты:

- из-за взаимодействия электронов с электромагнитной волной и звуком в области скоростей, удовлетворяющих резонансным условиям, наблюдается нелинейный эффект уменьшения коэффициента поглощения с увеличением интенсивности вводимого звука. при определенных условиях может происходить резонансное усиление звука;
- появляется зависимость коэффициента поглощения от частоты звука, не наблюдаемая в линейном приближении; зависимость от толщины пленки сильнее, чем в линейной теории.
- фоонный спектр в пленках и в отсутствие размерного квантования фоонов из-за электрон-фоонного взаимодействия имеет квантовый характер.

При $\vec{q}_\rho = 2\vec{k}_{F_v}$ ($\vec{q}_\rho$ – волновой вектор фонона в плоскости пленки, $\vec{k}_{F_v}$ – волновой вектор электрона на поверхности Ферми), $Re \omega$ (ω – частота фонона) остается непрерывной, но первая производная $\frac{d\omega}{dq_\rho}$ в этой точке расходится – появляются коновские особенности скорости, причем вместо одной аномалии возникает целая система особых точек. Затухание фоонов испытывает скачки – гигантские квантовые осцилляции поглощения.

В случае двумерного свободного движения и одномерного квантования электронного и фоонного энергетических спектров в электрон-фоонной системе (оптические фооны) при выполнении определенных условий возникают новые квазичастицы, которые являются связанными состояниями электрона и фонона.

ЧАСТЬ II. ДИНАМИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ И РЕЖИМЫ ИХ РАЗВИТИЯ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

ГЛАВА 3. СОЛИТОННАЯ КОНЦЕПЦИЯ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

3.1. Солитонные решения в полупроводниковой дисперсной среде и моделирование их эволюции [89, 90]

Солитоны в двумерно квантованном полупроводнике

В последнее время большое количество исследований было посвящено изучению нелинейных процессов. Солитоны – нелинейные уединенные волны – в настоящее время как экспериментально, так и теоретически, обнаружены как волны на воде, в плазме, в твердом теле, в сверхпроводнике, в электромагнитных линиях передачи. Наука о солитонах развивается совместными усилиями математиков, физиков-теоретиков и экспериментаторов. Понятие солитона можно применить в современной волоконной оптике при передаче информации на сверхдальние расстояния, при создании солитонного волоконного лазера, в квантовых компьютерах и т.д. Так как солитон распространяется без искажений, его можно рассматривать как «бит» информации. Динамика солитонов представляет огромный интерес также для фундаментальной науки. Многие природные явления, такие как цунами, землетрясения, сели в настоящее время часто рассматриваются как рождение и распространение солитонов.

Математическая теория солитонов и связанные с ними физические проблемы без учета диссипации и с учетом диссипации исследованы, например, в [91].

В квантовых проволоках движение носителей заряда ограничено в двух направлениях, и носители свободно перемещаются только вдоль оси проволоки. Экспериментальные работы по изготовлению и исследованию структур с квантовыми проволоками были начаты в восьмидесятих годах. В настоящее время в данной области имеется целый ряд как теоретических, так и экспериментальных работ. Краткий обзор по этим работам имеется, например, в [92, 93].

Нами получено солитонное решение в полупроводниковой одномерной среде (квантовая проволока) со слабой дисперсией и слабой нелинейностью в присутствии звуковой и электромагнитной волн, а также проведено численное моделирование

эволюции уравнения Кортевега де Фриза для разных параметров нелинейности, дисперсии, диссипации и для разных начальных возмущений.

Рассмотрим тонкую проволоку, в которой распространяется электромагнитная волна с волновым вектором, перпендикулярным оси проволоки. Продольный звук распространяется в направлении оси, так что волновой вектор звука параллелен вектору напряженности электрического поля электромагнитной волны. Рассмотрение ведется при следующих предположениях:

1. $aq \ll 1$, где a – амплитуда колебаний электрона в поле волны, $\vec{q}$ – волновой вектор фонона.
2. $\frac{\hbar q u}{kT} \ll 1$, где u – модуль скорости звука, T – температура. Поэтому функция распределения фононов вводится как $\frac{kT}{\hbar q u}$.
3. $\varepsilon_F \gg kT$, т. е. функция распределения Ферми электронов n_v может быть заменена δ -функцией.
4. $\Omega \ll \sigma \nu_e$, где $\sigma = \frac{m^* u^2}{kT}$, σ – параметр неупругости электрон-фононного взаимодействия, m^* – эффективная масса электрона, ν_e – частота неупругих столкновений электронов с фононами.

Для висмута (в котором экспериментально обнаружено размерное квантование) при $T \sim 10\text{K}$, $|\vec{E}_0| \sim 0.6\text{ В/см}$, $\vec{E}_0$ – вектор напряженности электрического поля электромагнитной волны, $\Omega \sim 10^{12}\text{ сек}^{-1}$ приведенные предположения справедливы для фононов с $q \leq 10^7\text{ см}^{-1}$.

Для описанной системы ранее нами было получено уравнение дисперсии в следующем виде (см. параграф 2.1) :

$$\omega - \omega_0 = \sum_{s, \nu, p} C_{\nu\nu}^2(q) J_s^2(aq) \frac{[n_\nu(p) - n_\nu(p-q)]}{\varepsilon_\nu(p-q) - \varepsilon_\nu(p) + \omega + s\Omega}, \quad s=1,2,3\dots,$$

где ω – частота звука ω_0 – частота фонона, $C_{\nu\nu}(q)$ – матричный элемент электрон-фононного взаимодействия в проволоке, ε_ν – энергия электрона, Ω – частота электромагнитной волны.

Известно, что из-за ограниченности размеров проволоки движение в плоскости сечения проволоки квантовано, электроны движутся свободно лишь в направлении оси проволоки. С учетом этого, при $\nu=1$ после интегрирования уравнения дисперсии по p получим:

$$\omega - \omega_0 = \sum_s - \frac{l C_{\nu\nu}^2(q) J_s^2(aq) |\vec{v}| q m^*}{2\pi \left[-\frac{p_i q}{m^*} + \frac{q^2}{m^*} + \omega + s\Omega \right] p_i},$$

где $p_i = \sqrt{2m^* \mu - 2m^* \varepsilon_\nu}$, μ – уровень Ферми, ε_ν – энергия электрона на уровне ν , l – длина образца, $|\vec{v}|$ – модуль скорости электрона. Исследуем полученную сумму. В случае, когда $-\frac{p_i q}{m^*} + \frac{q^2}{m^*} + \omega + s\Omega \gg C_{\nu\nu}^2(q)$, $\omega \sim \omega_0$, и перенормировка спектра мала.

Рассмотрим случай резонансной перенормировки спектра, когда для некоторого S

$$1 \gg C_{\nu\nu}^2(q) \geq \varepsilon_\nu(p-q) - \varepsilon_\nu(p) + \omega + s\Omega.$$

Тогда можно из всей суммы рассматривать только этот резонансный член, соответствующий некоторому определенному s_0

$$\omega - \omega_0 = - \frac{l C_{\nu\nu}^2(q) J_{s_0}^2(aq) |\vec{v}| q m^*}{2\pi [\varepsilon_\nu(p-q) - \varepsilon_\nu(p) + \omega + s_0\Omega] p_i};$$

Рассмотрим резонансный случай:

$$\omega_0 = \varepsilon_\nu(p-q) - \varepsilon_\nu(p) + s_0\Omega.$$

Тогда, преобразуя, получим:

$$\omega_{1,2} = \pm \omega_0 - \frac{l C_{\nu\nu}^2 J_{s_0}^2(aq) |\vec{v}| q_\rho m^*}{4\pi p_i \hbar \omega_0}$$

Подставляя значение матричного элемента и используя разложение функции Бесселя при $aq \ll 1$, получим

$$\omega_{1,2} = q u \mp \beta q_\rho^3, \quad \beta = \frac{l |\vec{v}| m^* C_1^2 a^2 F_{\nu\nu}^2}{8\pi p_i \rho_0 V u^2 \hbar}.$$

где V – объем системы, $s_0=1$, C_1 – константа электрон-фононного взаимодействия.

Такому дисперсионному соотношению соответствует следующее дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} = 0, \quad (3.1)$$

где Ψ Ψ^* – плотность энергии фононов.

Столкновения в электрон-фононной системе приводят к тому, что не сохраняются ни число фононов, ни их суммарный импульс. Единственным законом является закон сохранения энергии

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \text{div } g = 0, \quad (3.2)$$

где g – плотность потока энергии фононов. Из (3.1) и (3.2) можно получить

$$g = u \psi + \beta \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (3.3)$$

Найдем нелинейную добавку к плотности потока энергии фононов с импульсом q' , обусловленную нелинейным электрон-фононным взаимодействием.

Используя [94] для доли энергии $\delta \mathcal{E}$, переданной горячим электроном решетке в единицу времени (энергия электрона усреднена по периоду колебаний электромагнитной волны), имеем

$$\delta \mathcal{E} = \frac{e^2 E_0^2}{m^* \sigma \nu_e}, \quad \text{где } \sigma = \frac{m^* u^2}{kT} \text{ – параметр неупругости.} \quad (3.4)$$

Мы рассматриваем случай $\Omega \ll \sigma \nu_e$, то есть энергия электрона адиабатически следует за полем. Для определения ν_e воспользуемся выражением для вероятности перехода при ангармоническом взаимодействии :

$$W_{qq'} = \sum_{p, p'} \text{Re} \{ C_q C_{q'} C_{-q, -q'} \delta_{p+q+q', p} \frac{(N_q + 1)(N_{q'} + 1)}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p-q} + \omega_q + i\delta} \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} - \omega_q - \omega_{q'}) \}. \quad (3.5)$$

После интегрирования (3.5) по p, p' , используя условие $\frac{\hbar q u}{kT} \ll 1$, получим для $\nu_e = \sum W_{qq'}$ выражение

$$v_e = \frac{RkT}{2\pi\hbar^2 u} \left\{ \frac{(-4m^*u)}{q' \sqrt{64m^{*2}u^2q'^2 + 16m^*uq'^3}} \times \right. \\ \times \ln \left| \frac{2(4m^*u + q')q + (8m^*uq' + 2q'^2) - \sqrt{64m^{*2}u^2q'^2 + 16m^*uq'^3}}{2(4m^*u + q')q + (8m^*uq' + 2q'^2) + \sqrt{64m^{*2}u^2q'^2 + 16m^*uq'^3}} \right| + \\ \left. + \frac{1}{2q'^2} \ln \left| \frac{q^2}{[q^2(4m^*u + q') + q(8m^*uq' + 2q'^2) + q'^3]} \right| \right\}, \\ R = \frac{(-1)m^{*2}C_1^2\Lambda_{ijkl}F_{\nu\nu}^2(q_{\perp})F_{\nu\nu}(q_{\perp}, q'_{\perp})}{4\pi\hbar^3\rho_0^2u^3S^2},$$

где S – площадь сечения проволоки. Первый член в фигурных скобках изменяется как $(q')^{-\frac{5}{2}}$, а второй – как $(q')^{-2}$ и при достаточно больших q' можно пренебречь $(q')^{-5/2}$ по сравнению с $(q')^{-2}$. Оценки дают, что уже при $q' > 10^5$ эти члены отличаются на порядок. Далее, учитывая, что $1/q'^2$ есть быстро изменяющаяся функция по сравнению с логарифмической зависимостью от q' , функцию под знаком логарифма можно считать не зависящей от q' в пределах изменения q' , взяв при этом ее значение при некотором среднем q'_1 . Тогда

$$v_e = \frac{RkT}{4\pi\hbar^2 q'^2} \left\{ \ln \frac{q_{\max}^2}{q_{\min}^2} + \ln \frac{q_{\min}^2 (4m^*u + q'_1) + q_{\min} (8m^*uq'_1 + 2q_1'^2) + q_1'^3}{q_{\max}^2 (4m^*u + q'_1) + q_{\min} (8m^*uq'_1 + 2q_1'^2) + q_1'^3} \right\}. \quad (3.6)$$

При неупругом рассеянии $q = \mp 2p \cos \theta \pm \frac{2m^*u}{\hbar}$. Тогда $q_{\min} = \frac{2m^*u}{\hbar}$, $q_{\max} = 2p$.

Подставляя (3.6) в (3.4), получим для $\delta\mathcal{E}$:

$$\delta\mathcal{E} = \frac{2\pi e^2 E_0^2 q'^2 \hbar^2 u}{m^* \delta R k T \left\{ \ln \frac{q_{\max}^2}{q_{\min}^2} + \ln \frac{q_{\min}^2 (4m^*u + q'_1) + q_{\min} (8m^*uq'_1 + 2q_1'^2) + q_1'^3}{q_{\max}^2 (4m^*u + q'_1) + q_{\min} (8m^*uq'_1 + 2q_1'^2) + q_1'^3} \right\}}.$$

Считая, что электроны взаимодействуют только с фононами, для нелинейной добавки к плотности потока энергии фононов получим:

$$\Delta g = \frac{2\pi\hbar^2 n_{\nu} e^2 E_0^2 u^2 l_1 q'^2}{m^* \delta R u k T \left\{ \ln \frac{q_{\max}^2}{q_{\min}^2} + \ln \frac{q_{\min}^2 (4m^*u + q'_1) + q_{\min} (8m^*uq'_1 + 2q_1'^2) + q_1'^3}{q_{\max}^2 (4m^*u + q'_1) + q_{\min} (8m^*uq'_1 + 2q_1'^2) + q_1'^3} \right\}}$$

Для полного потока, используя (3.3), получим:

$$g = u\Psi + \beta \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\alpha}{2} \Psi^2, \quad (3.7)$$

где

$$\frac{\alpha}{2} = \frac{2\pi m_v e^2 E_0^2 V^2 l_1}{um^* \delta R k T \left\{ \ln \frac{q_{\max}^2}{q_{\min}^2} + \ln \frac{q_{\min}^2 (4m^* u + q_1') + q_{\min} (8m^* u q_1' + 2q_1'^2) + q_1'^3}{q_{\max}^2 (4m^* u + q_1') + q_{\min} (8m^* u q_1' + 2q_1'^2) + q_1'^3} \right\}},$$

l_1 – длина свободного пробега электронов при неупругом рассеянии.

Дифференциальное уравнение (3.1) перейдет в уравнение

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + u \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} + \alpha \Psi \frac{\partial \Psi}{\partial x} = 0. \quad (3.8)$$

Проводя в (3.8) известную замену переменных $x = \xi + ut$; $\Psi = \frac{\eta}{\alpha}$ (система координат движется вместе с волной), получим уравнение Кортевега де Фриза [95]

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \beta \frac{\partial^3 \eta}{\partial \xi^3} + \eta \frac{\partial \eta}{\partial \xi} = 0, \quad (3.9)$$

одно из решений которого, описывающее волны со стационарным профилем, есть функция

$$\eta(\xi) = 3v_0 ch^{-2} \left(\frac{\xi}{2} \sqrt{v_0 / \beta} \right), \quad v_0 = const. \quad (3.10)$$

Такое решение соответствует солитону. Постоянная $3v_0$ – амплитуда солитона, ширина солитона убывает с ростом амплитуды как $v_0^{-1/2}$, скорость солитона $u_1 = u + v_0$, она растет с увеличением амплитуды. Как амплитуда, так и скорость солитона через коэффициенты α, β зависят от параметров задачи.

ЧИСЛЕННЫЙ КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ ПО ЭВОЛЮЦИИ ВОЗНИКНОВЕНИЯ СОЛИТОНОВ И ЗАКОНОМЕРНОСТЯМ ИХ ДВИЖЕНИЯ

Рассмотрим уравнение (3.9). Наиболее типичным начальным возмущением является возмущение вида

$$\eta(\xi, 0) = \eta_0 \exp(-\xi^2 / l^2), \quad (3.11)$$

где l – линейный размер начального возмущения. Степень нелинейности можно охарактеризовать безразмерным параметром $\sigma = l(\eta_0 / \beta)^{1/2}$.

Исследуем характер решений в зависимости от значений σ . Для $\sigma = 5.9$ нами изучена эволюция начального импульса (3.11) для времен $t = 0, 0.6, 1$. При этом

первоначальный импульс движется вправо, сначала рождается первый солитон, амплитуда которого растет со временем, при $t=0.4$ зарождается второй солитон, амплитуда которого также растет со временем, при $t=0.8$ имеем два солитона, причем амплитуда первого больше амплитуды второго. При $\sigma = 9$, $\eta_0 = 1.71$ и начальном условии (3.11) получена эволюция от $t = 0$ до $t = 0.84$. Рис.3.1.

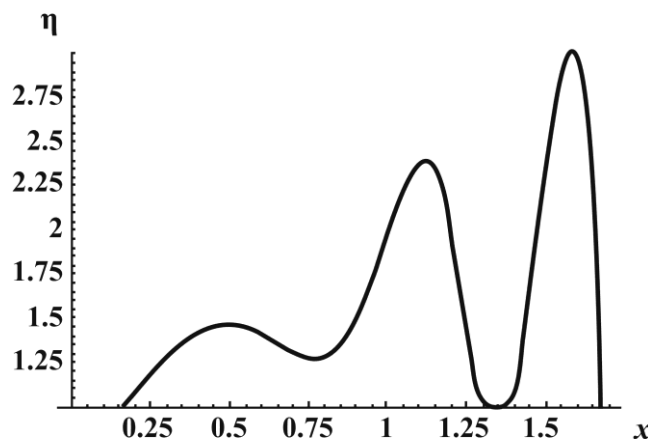
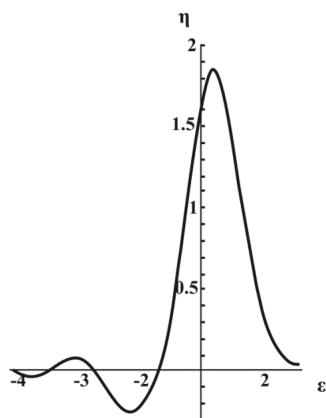
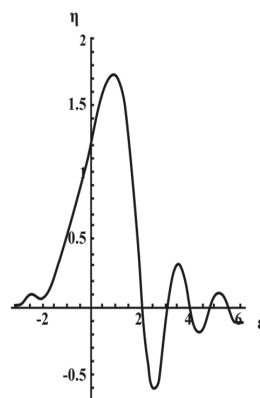


Рис. 3.1. Рождение третьего солитона.

Из рис. 3.1 видно, что в момент $t = 0.84$ видны два отделившихся солитона справа и третий, новый, слева. Таким образом, при увеличении σ в указанном интервале при одинаковом начальном импульсе число рождающихся солитонов растет. Численный эксперимент показал, что, при $\sigma \leq \sqrt{12}$, решения являются несолитонными (Рис.3.2).



а) $\beta > 0$



б) $\beta < 0$

Рис. 3.2. Возникновение осцилляций при $\sigma = 2$.

Из Рис. 3.2а видно, что солитоны отсутствуют, но слева от первоначального импульса возникают осцилляции. Этот случай реализуется для $\beta > 0$. При $\beta < 0$ осцилляции возникают справа (Рис.3.2б). Этот результат очевиден, так как из уравнения Кортевега

де Фриза видно, что при изменении знака β получаются те же решения, что и при замене $\eta \rightarrow -\eta, \xi \rightarrow -\xi$. Исследования были проведены при $\beta = -0.25, \beta = 0.25$. Рассмотрим среду, в которой необходимо учитывать диссипативные процессы. При учете диссипации уравнение Кортевега де Фриза (3.8) принимает вид:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \mu \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial^3 \Psi}{\partial x^3} = 0, \quad (3.9)$$

где μ – коэффициент диссипации.

Предположим, что при $t = 0$ имеем начальное возмущение в виде $\Psi(x, 0) = \Psi_0 \text{ch}^{-2}(x/l)$. При $\mu = 2, \beta = 0.3, \Psi_0 = 1$ проведен численный эксперимент для $t = 0, 0.02, 0.08, 0.2, 0.5$. Далее, тот же эксперимент был проведен для $\mu = 10$ (Рис.3.3).

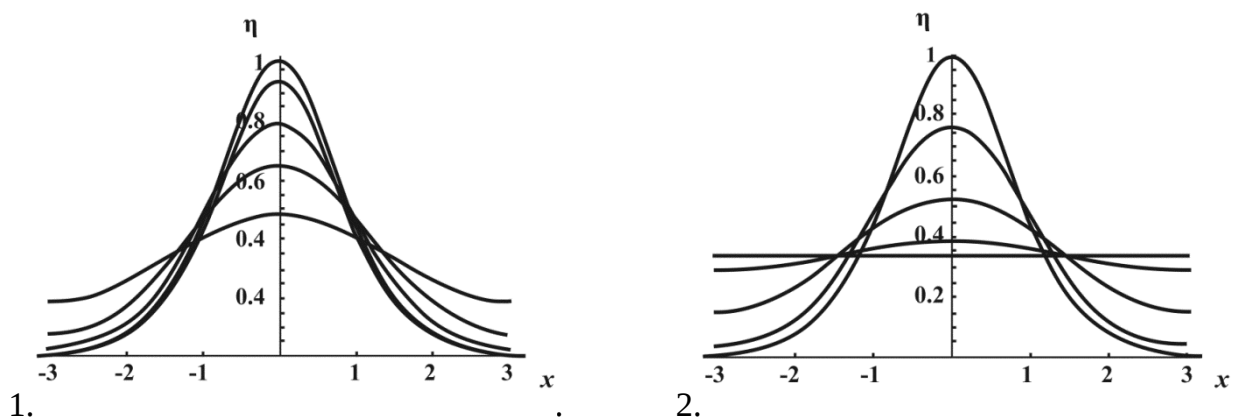


Рис. 3.3. Затухание солитона при наличии диссипации.

1. $\mu = 2$; 2. $\mu = 10$

Как и следовало ожидать, при увеличении коэффициента диссипации затухание происходит быстрее, то есть время жизни солитона сокращается. Полученные результаты можно использовать для оценки времени жизни солитона. (На приведенных графиках масштаб времени $\approx 10^{12}$).

Из решения уравнения Кортевега де Фриза следует, что скорость движения солитона зависит от его амплитуды. Нами поставлен численный эксперимент для различных скоростей для солитона (3.10). Как и следовало ожидать из вида солитонной функции, из-за зависимости скорости солитона от его амплитуды, с течением времени солитоны выстраиваются по убывающей амплитуде. При этом при столкновении не наблюдаются неупругие эффекты. Быстрый солитон как бы проходит сквозь медленный без нарушения их формы. После столкновения возникают такие же по форме солитоны, что и до столкновения (Рис.3.4).

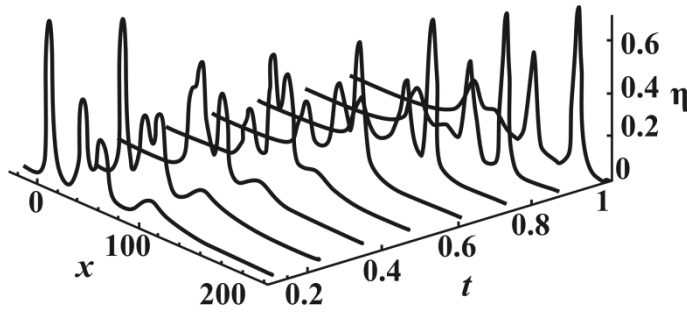


Рис.3.4. Характер движения и взаимодействия солитонов.

(На рисунке представлена зависимость $\eta(x)$ для последовательных моментов времени)

Свойство солитонов сохранять свою форму при взаимодействиях позволяет назвать солитон «частицеподобным» решением уравнения Кортевега де Фриза, что очень важно для приложений. Так как в нашем случае мы имеем нелинейную открытую систему, то, как мы убедились, такая многосолитонная система является самоорганизованной структурой.

3.2. Солитоны в размерно квантованном полупроводнике в присутствии сильной электромагнитной волны [96]

Рассматривается тонкая (квантующая) проволока, в которой распространяется электромагнитная волна с волновым вектором, перпендикулярным оси проволоки. Продольный звук распространяется в направлении оси, так что волновой вектор звука параллелен вектору напряженности электрического поля электромагнитной волны.

Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$H(t) = \sum_{\nu, \vec{P}} \varepsilon_{\nu} \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) a_{\nu}^{\dagger}(\vec{P}) a_{\nu}(\vec{P}) + \sum_{\nu, \nu', \vec{P}, \vec{q}} c_{\nu\nu'}(\vec{q}) \left\{ a_{\nu}^{\dagger}(\vec{P}) a_{\nu'}(\vec{P} - \vec{q}) b(\vec{q}) + \right. \\ \left. + a_{\nu'}(\vec{P} - \vec{q}) a_{\nu}^{\dagger}(\vec{P}) b_{\nu}^{\dagger}(-\vec{q}) \right\} + \sum_{\vec{q}} \omega_0(\vec{q}) b^{\dagger}(\vec{q}) b(\vec{q}) \quad (3.12)$$

$$\varepsilon_{\nu}(\vec{P}) = \frac{P^2}{2m} + \varepsilon_{\nu}, \quad \nu = 1, 2, \dots$$

где $c_{vv'}(\vec{q})$ - матричный элемент электрон-фоонного взаимодействия в проволоке, a, a^+, b, b^+ - электронные и фоонные операторы рождения и уничтожения, $\omega_0 = |\vec{u}| |\vec{q}|$, где $\vec{u}$ - скорость звука, $\vec{P}, \vec{q}$ - квазиимпульсы электрона и фоона, $\varepsilon_v(\vec{P})$ - энергия электрона, $\vec{A}$ - вектор-потенциал электромагнитного поля.

Из уравнений движения операторов рождения и уничтожения электронов и фоонов с использованием (3.12) при $aq \ll 1$ (a - амплитуда колебаний электрона в поле волны) получим уравнение дисперсии для фоонов в виде:

$$\omega = uq + \beta q^3,$$

где β - коэффициент, зависящий от параметров проволоки.

Такому дисперсионному соотношению соответствует дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + u \frac{\partial \psi}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} = 0. \quad (3.13)$$

ψ - плотность энергии фоонов.

Далее находим, какую долю энергии, полученной от электромагнитного поля, электроны передают фоонам при нелинейном электрон-фоонном взаимодействии для $\Omega \ll \sigma \nu$, ν - частота неупругих столкновений электронов с фоонами, σ - параметр неупругости электрон-фоонного взаимодействия [97]:

$$\delta \varepsilon = \frac{1}{2} \frac{e^2 E_0^2}{m \sigma \nu}.$$

Для определения ν воспользуемся выражением для $W_{qq'}$ - вероятности перехода при ангармоническом взаимодействии. Окончательно для плотности потока энергии фоонов получим:

$$g = u\psi + \beta \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\alpha}{2} \psi^2, \quad (3.14)$$

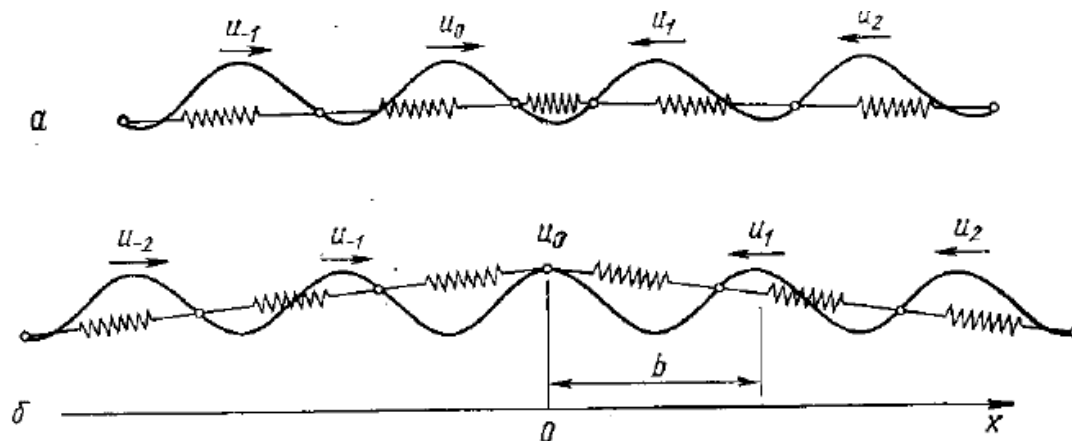
где u, α определены через параметры задачи.

Дифференциальное уравнение (3.13) с учетом (3.14) после замены переменных переходит в уравнение Кортевега де Фриза:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial^3 \eta}{\partial \xi^3} + \eta \frac{\partial \eta}{\partial \xi} = 0.$$

Из анализа полученного решения, проведенного в параграфе 3.1, следует, что ширина солитона убывает с ростом амплитуды как $a_1^{-\frac{1}{2}}$, где a_1 – амплитуда солитона, скорость же солитона растет с увеличением амплитуды. Кроме того, характеристики солитона зависят от параметра проволоки.

3.3. Модель Френкеля-Конторовой



Конфигурации в модели Френкеля-Конторовой

а – устойчивая, б – неустойчивая.

Простая модель дислокации, описывающая динамику цепи частиц, взаимодействующих с ближайшими соседями в присутствии внешнего периодического потенциала, была предложена Френкелем и Конторовой в 1938 году [98]. В модели дислокации Френкеля – Конторовой атомы над плоскостью скольжения – материальные точки, связанные пружинами жесткостью « k », а атомы под плоскостью скольжения (подложка) описываются синусоидальным потенциалом. Такая модель оправдана при выполнении следующих условий:

1. Атомы в цепи могут двигаться только в одном измерении;
2. Потенциал подложки – периодическая функция, которая разлагается в ряд Фурье и учитывается только первый член разложения;
3. Учитывается только парное взаимодействие между ближайшими соседями;
4. Смещения атомов от положения равновесия малы.

Тогда уравнение движения n -го атома принимает вид:

$$m \ddot{y}_n = -f_0 \sin(2\pi y_n / a) + k(y_{n+1} + y_{n-1} - 2y_n) \quad (3.15)$$

y_n - отклонение n -го атома от положения равновесия, a – постоянная решетки, $f_0 \sin(2\pi y_n / a)$ - периодическая синусоидальная сила со стороны подложки, m - масса атома, k – коэффициент жесткости.

Если в модели Френкеля-Конторовой перейти от цепочки атомов к сплошной среде, то получим известное синус уравнение Гордона

$$\ddot{\varphi} = v_0^2 \varphi'' - \omega_0^2 \sin \varphi, \quad (3.16)$$

где $v_0 = a\sqrt{k/m}$, ω_0 - характерная частота, $\ddot{\varphi}$ - вторая производная по времени, φ'' - вторая производная по координате.

После преобразования (3.16) к каноническому виду получим

$$\ddot{\varphi} - \varphi'' + \sin \varphi = 0 \quad (3.17)$$

Самым замечательным свойством нелинейного уравнения в частных производных (3.17) является его полная интегрируемость. Уравнение (3.17) во многих работах используется для построения упрощенных моделей дислокации. Одним из решений уравнения (3.17) является уединенная волна или солитон.

$$\varphi(x, t; u, x_0) = 4 \operatorname{arctg} \left[\exp \left(\frac{x - ut - x_0}{\sqrt{1 - u^2}} \right) \right], \quad u - \text{скорость}, \quad x_0 - \text{начальная фаза}. \quad (3.18)$$

Другими решениями являются бризеры (Их можно рассматривать как пару солитон – антисолитон) и возбуждения непрерывного спектра. В рамках модели синус Гордона столкновение солитонов является упругим, т.е. их форма, скорость и энергия не меняются, эффект взаимодействия проявляется в сдвиге фаз взаимодействующих солитонов. При учете указанных выше физических ограничений решения уравнения синус Гордона представляют собой достаточно хорошее приближение к реальной ситуации. Недостатком модели Френкеля-Конторовой является неравноправное положение подложки, описываемой синусоидальным потенциалом, которая считается недеформируемой, и верхней части кристалла, в которых возникают искажения. Расчеты теории упругости показывают, что искажаются обе части кристалла. Преимуществом является то, что она использует дискретный подход, хорошо предсказывает значение ширины дислокации, смещения атомов аналогичны смещениям в модели Пайерлса, восстанавливает соответствие между симметричными позициями и минимумами энергии, с ее помощью можно описывать релаксационные процессы [98].

Изучение различных физических возмущений (влияние примесей, внешних полей, трения и т.д.) для уравнений, имеющих солитонные решения, является актуальной и интересной задачей. Приложением уравнения синус Гордона являются такие различные области, как дислокации в кристаллах, джозефсоновские сверхпроводящие контакты, волны зарядовой плотности в одномерных органических проводниках и модели теории поля и т.д.

3.4. Односолитонное решение синус уравнения Гордона методом обратной задачи рассеяния. Преобразование Беклунда для односолитонного решения

Метод обратной задачи возник как нелинейное обозначение классического метода Фурье и предназначен для интегрирования линейных уравнений с частными производными. Дифференциальные уравнения допускают солитоноподобные решения, когда подчиняются преобразованиям Беклунда [99].

В нашем случае метод обратной задачи рассеяния позволяет проинтегрировать уравнение синус Гордона. Преобразование Беклунда выглядит особенно симметрично для синус уравнения Гордона.

$$\frac{u_x - v_x}{2} = -\lambda \sin \frac{u+v}{2}; \quad \frac{u_T + v_T}{2} = -1/\lambda \sin \frac{u-v}{2} \quad (3.19)$$

с параметром λ , v — новая неизвестная промежуточная функция, связанная с функцией u и позволяющая проинтегрировать уравнение синус Гордона. Таким образом, дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных с помощью преобразования Беклунда заменяется двумя дифференциальными уравнениями первого порядка в частных производных, связывающими решение данного уравнения с другим решением того же уравнения, которое интегрируется. Построим солитонные решения синус уравнения Гордона. При $u = 0$ имеем

$$\frac{v_x}{2} = \lambda \sin \frac{v}{2}; \quad \frac{v_T}{2} = 1/\lambda \sin \frac{v}{2}. \quad (3.20)$$

Обозначим $\omega = \frac{v}{2}$, тогда уравнение (3.19) запишется в виде

$$\frac{d\omega}{\sin \omega} = \lambda dx$$

Интегрируя левую часть, получим

$\int \frac{d\omega}{\sin \omega} = \int \frac{\sin \omega d\omega}{\sin^2 \omega} = - \int \frac{d(\cos \omega)}{1 - \cos^2 \omega} = - \ln \frac{1 - \cos \omega}{1 + \cos \omega}$, так что общее решение (3.20) будет

$$\frac{1 - \cos \omega}{1 + \cos \omega} = e^{-\lambda(x-c)},$$

c – постоянная интегрирования.

Из $tg^2 \frac{\omega}{2} = \frac{1 - \cos \omega}{1 + \cos \omega}$ выразим v через c

$$tg \frac{\omega}{2} = e^{-\frac{\lambda(x-c)}{2}} \rightarrow \frac{v}{4} = \operatorname{arctg} \left(e^{-\frac{\lambda(x-c)}{2}} \right).$$

Для второго уравнения аналогично получим

$$\frac{v}{4} = \operatorname{arctg} \left(e^{-\frac{\lambda(\tau-\tau_0)}{2\lambda}} \right).$$

Выбирая $e^{\frac{\lambda c(\tau)}{2}} = e^{\frac{\lambda x_0}{2}} e^{-\frac{(\tau-\tau_0)}{2\lambda}}$ получим окончательно решение системы (3.20) в виде

$$v(t) = 4 \operatorname{arctg} \left[e^{-\frac{\lambda(x-x_0)}{2} - \frac{(\tau-\tau_0)}{2\lambda}} \right], \quad (3.21)$$

где $x_0, \tau_0 = \text{const.}$

(3.21) – односолитонное решение уравнения синус Гордона.

3.5. Уравнение Кортевега де Фриза

Еще более, чем за десятилетие до получения уравнения синус Гордона стало известно солитоноподобное решение более известного уравнения Кортевега де Фриза [91]. Впервые уравнение Кортевега де Фриза было получено де Фризом при описании распространения длинных волн на воде в прямоугольном канале со свободной поверхностью.

В настоящее время уравнение Кортевега де Фриза стало универсальным уравнением при моделировании волновых процессов различной физической природы с учетом дисперсии и слабой нелинейности. Уравнение Кортевега де Фриза имеет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

u можно понимать, например, как смещение поверхности жидкости от равновесного уровня, β - параметр дисперсии.

Решение уравнения Кортевега де Фриза имеет вид нелинейной волны неизменяемой формы

$$u(x, t) = A c h^{-2} \left(\frac{x - vt}{\Delta} \right),$$

A – амплитуда волны, $v = \frac{A}{3}$ – скорость волны, $\Delta = \sqrt{\frac{12\beta}{A}}$ – параметр, характеризующий эффективный размер области возмущения. Такое возмущение колоколообразной формы, не изменяющееся со временем, распространяется в виде солитона с конечной скоростью, значение которой зависит от амплитуды солитона. Чем больше амплитуда, тем с большей скоростью он движется. Эффективная ширина солитона уменьшается с ростом его амплитуды. На Рис 3.4. представлено распространение солитонов. Как видно из рисунка, солитоны проходят друг сквозь друга, не изменяя формы. Солитоны, имеющие большую амплитуду, опережают солитоны меньшей амплитуды, в результате чего группа солитонов выстраивается в ряд по амплитуде.

Таким образом, уравнение Кортевега де Фриза описывает любую слабо нелинейную, слабо диспергирующую систему волн. Для уединенной волны нелинейность $u \frac{\partial u}{\partial x}$ точно уравнивает дисперсию $\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$.

В настоящее время уравнение Кортевега де Фриза используется в теории твердого тела, физике плазмы, магнитогидродинамике.

3.6. Сравнительная характеристика солитонов Френкеля - Конторовой и Кортевега де Фриза. Динамика солитонов Френкеля - Конторовой в полупроводниках [90, 100, 102, 111].

Движение дислокаций в кристаллической структуре твердого тела может быть описано нелинейным дифференциальным уравнением – уравнением синус-Гордона [например, 91]. Это уравнение имеет как простые решения в виде бегущих волн, так и более сложные – в виде стоячих волн : плазменных или бризерных колебаний. Однако наиболее интересными являются решения в виде устойчивых уединенных волн, называемых топологическими солитонами.

Представляет интерес проанализировать сходство и различие солитонов Кортевега де Фриза и топологических, в частности, их поведение при учете диссипации.

В рамках одномерной модели дислокации Френкеля-Конторовой движение дислокаций описывается уравнением синус Гордона

$$\varphi_{tt} - c_0^2 \varphi_{xx} + \omega_0^2 \sin \varphi = 0 \quad (3.22)$$

c_0 - скорость звука (предельная скорость в упругой среде), ω_0 - характерная частота, φ - отклонение атома от положения равновесия.

Численное решение уравнения (3.22), проведенное нами при определенных граничных и начальных условиях в графическом виде представлено на Рис. 3.5.

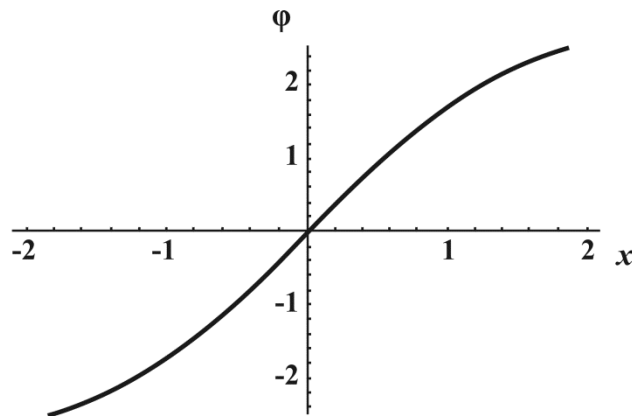


Рис.3.5.Численное решение уравнения Гордона.

Это известное решение, описывающее дислокацию в сплошной среде.

Уравнение (3.22) исследовано нами для достаточно большого интервала времени. Численный эксперимент показал, что его решения устойчивы в течение всего этого интервала времени: дислокации, размер которых значительно превышает шаг решетки, перемещаются по кристаллу как частицы, не изменяя своей формы.

Исследуем, как изменится поведение дислокации при ее движении в среде с диссипацией. Для этого введем в уравнение (3.22) силы диссипации. Рассмотрим торможение дислокаций, обусловленное следующими факторами : силами радиационного трения и другими механизмами (фононная вязкость, торможение атмосферой Котрелла, термоупругая диссипация энергии и т. д.).

При радиационном трении упругие волны, т. е. фононы, сталкиваясь с дислокацией и рассеиваясь ею, передают дислокации импульс. Рассмотрим, например, плоскую тепловую сдвиговую волну

$$u = u_0 \cos(kr - \omega t), \quad \omega = c_t k,$$

k - модуль волнового вектора сдвиговой волны, c_t –модуль скорости поперечных волн. При прохождении такой волны через дислокацию последняя приходит в колебательное движение, в результате чего испускаются вторичные волны. Этот процесс обуславливает дислокационное торможение при конечных температурах. Лейбфрид [98] приближенно оценил величину силы торможения с учетом радиационной силы и силы, возникающей при рассеянии фононов полем напряжений дислокаций. Он нашел, что сила на единицу

длины дислокации, необходимая для компенсации торможения и поддержания равномерного движения, равна:

$$\frac{F_x}{L} = \omega_T b v / 10 c_t ,$$

где ω_T - плотность энергии тепловых колебаний, v - скорость движения дислокации, L - длина дислокации. Иначе говоря, можно считать, что диссипативные эффекты такой природы можно описать членом $\mu \frac{\partial \varphi}{\partial t}$, где μ зависит от параметров взаимодействия тепловой волны с дислокацией. Сила радиационного торможения становится существенной при скоростях дислокаций выше $(10^{-3} - 10^{-2}) c_t$.

Наличие примесей можно описать, заменяя в уравнении синус-Гордона $\omega_0^2 \rightarrow \omega_0^2 + \Delta\omega_0^2(x)$ [91].

С учетом вышесказанного, уравнение (3.22) запишем в виде

$$\varphi_{tt} - c_0^2 \varphi_{xx} + (\omega_0^2 + \Delta\omega_0^2) \sin \varphi + \mu \varphi_t = 0 . \quad (3.23)$$

Решения этого уравнения и их эволюция со временем, полученные нами для типичных значений констант, представлены на рис. 3.6. Необходимо отметить, что эффект замедления в среде с примесями имеет место, начиная с достаточно большого значения

$$\Delta\omega_0^2 = \frac{2\pi k T N(x)}{D m a} , \quad N(x) - \text{число избыточных атомов, связанных с потенциальной ямой,}$$

создаваемой дислокацией, D - коэффициент диффузии, m - эффективная масса атома, k - постоянная Больцмана, a - постоянная решетки.

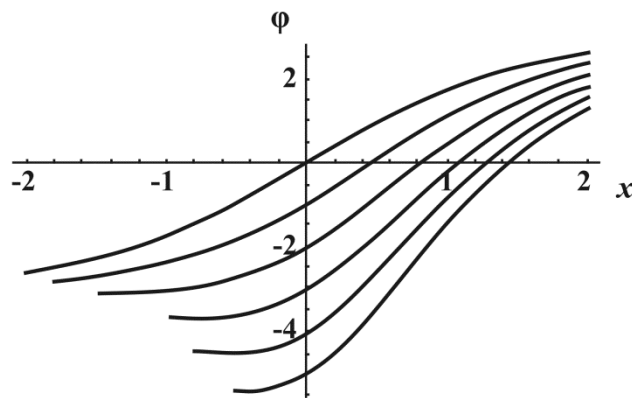


Рис. 3.6. Моделирование решений диссипативного уравнения синус Гордона для последовательных моментов времени

Как видно из Рис.3.6, под действием небольшого трения топологический солитон замедляется и, в конце концов, останавливается. Остановившись, он может жить практически очень долго. Полученный результат согласуется с опытом: при снятии механического напряжения дислокации прекращают движение и будут существовать, пока существует кристалл.

Как показано в предыдущей главе, под действием сил трения солитон Кортевега де Фриза постепенно замедляет движение, одновременно уменьшая высоту и расплываясь, причем затухание происходит быстрее при увеличении коэффициента диссипации. Время жизни такого солитона обратно пропорционально силе трения (Рис. 3.7).

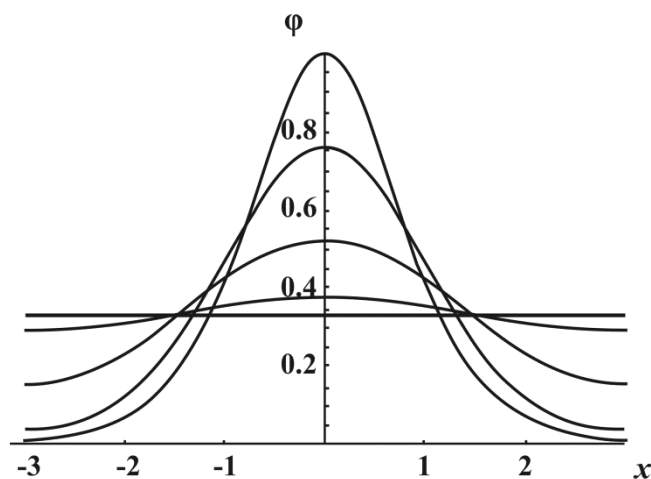


Рис. 3.7. Затухание солитона Кортевега де Фриза со временем при учете диссипации.

Как показал численный эксперимент (Рис.3.6), топологический солитон очень устойчив даже при наличии диссипации. Это свойство устойчивости топологического солитона сильно отличает его от солитона Кортевега де Фриза (Рис.3.7).

Вероятно, исключительная устойчивость топологического солитона объясняется тем, что нелинейность типа $\sin \varphi$ более нелинейна, чем нелинейность в уравнении К.д.Ф. Эта устойчивость имеет топологическую природу, по этой причине солитон Френкеля-Конторовой называют топологическим солитоном. Если в уравнении (3.22) вместо $\sin \varphi$ подставить $-2(\varphi - \varphi^3)$ то получаем волны, похожие на солитоны Френкеля-Конторовой. Однако они со временем разрушаются, превращаясь в периодические нелинейные колебания [101].

При столкновении солитона и антисолитона синус Гордона они проходят друг сквозь друга в соответствии с дуплетным решением

$$\varphi = 4 \operatorname{arctg} \left\{ \frac{\operatorname{sh}[u(t-t_0)/\sqrt{1-u^2}]}{u * \operatorname{ch}[(x-x_0)/\sqrt{1-u^2}]} \right\} \quad (3.24)$$

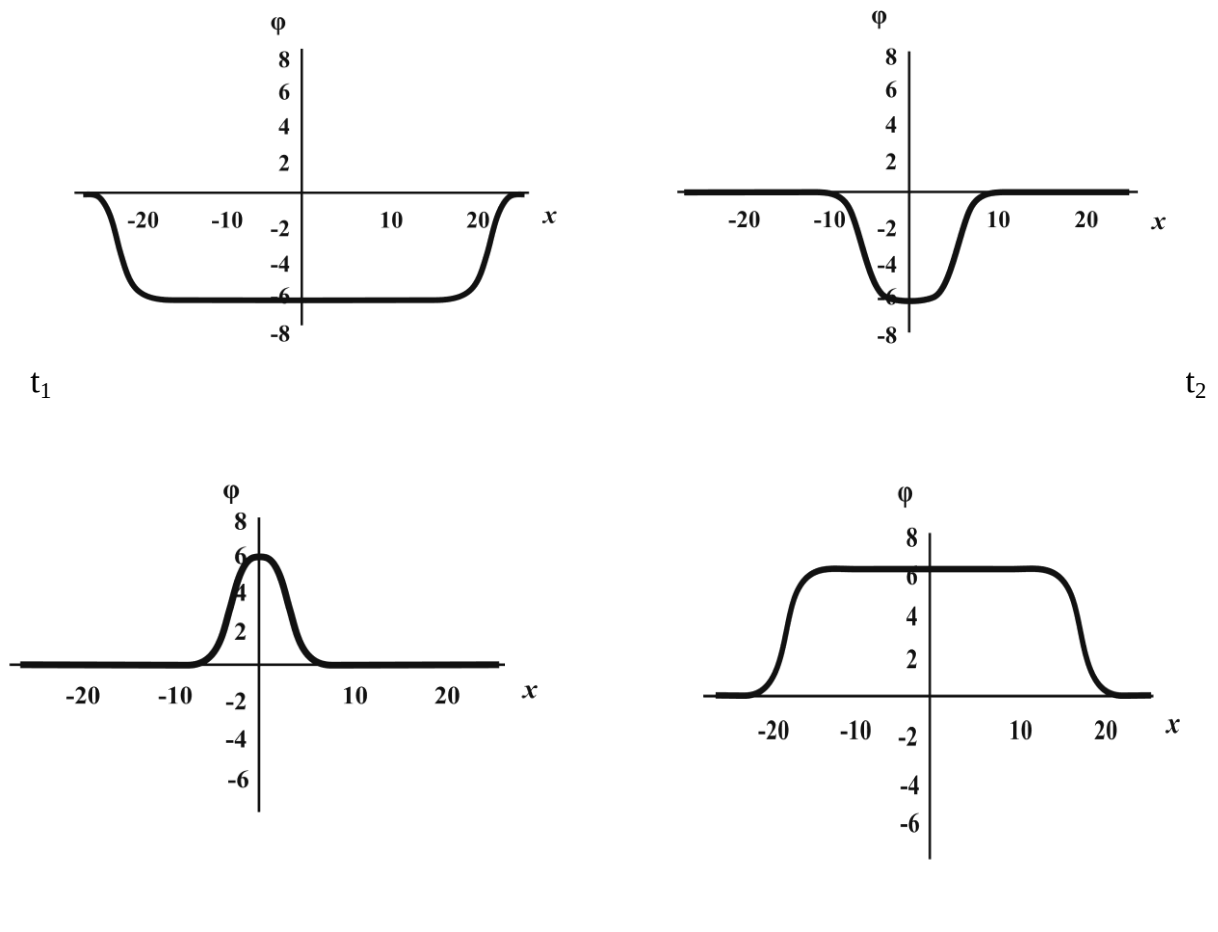


Рис.3.8. Столкновение солитона и антисолитона синус Гордона (t_1 , t_2 , t_3 , t_4 - последовательные моменты времени)

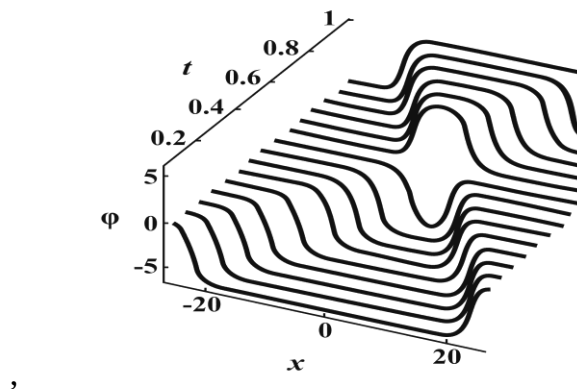


Рис.3.9. Столкновение солитона и антисолитона в трехмерном представлении. Столкновение солитона и антисолитона изображено на Рис.3.8, 3.9.

Если затухание достаточно велико, то в процессе столкновения солитон и антисолитон не проходят друг сквозь друга, а образуют бризер, который затем постепенно затухает. Бризер можно рассматривать как пару солитон – антисолитон. Он представляет отдельный интерес, так как имеет внутреннюю колебательную структуру.

Если $\varphi(t, x)$ отклоняется от равновесного значения не больше, чем на малую величину $|\varphi - \pi| \ll \pi$, то численный эксперимент дает стоячую волну с малой амплитудой $\varphi(t, x) \approx \pi - \varphi_0 \frac{\sin(\omega_0 t)}{\text{ch}(\varphi_0 x / 4l_0)}$, $|\varphi_0| \ll \pi$, $l_0 = a \sqrt{\frac{mv_0^2}{2\pi f_0 a}}$ (Рис. 3.10).

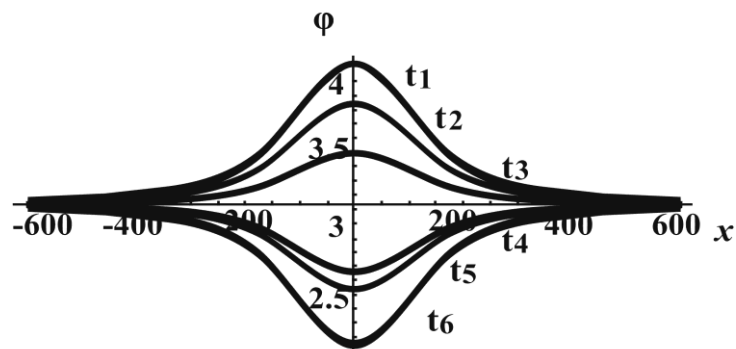
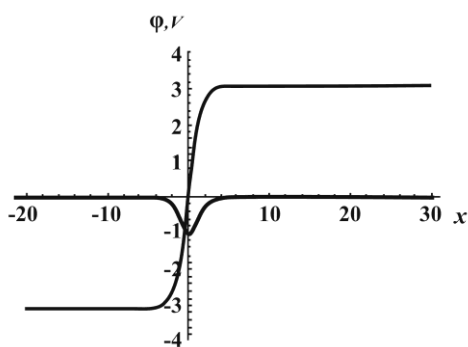
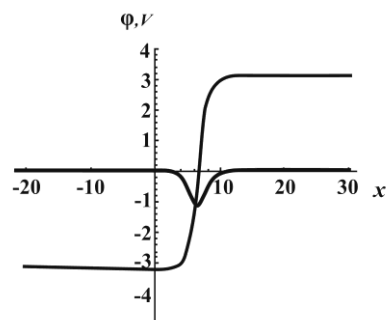


Рис.3.10. Стоячая волна с малой амплитудой

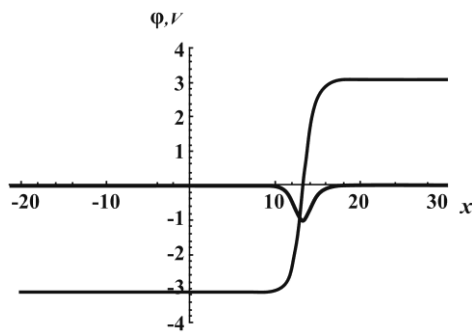
Для контроля за формой дислокации параллельно построим графики скорости. В качестве примера рассмотрим невозмущенное уравнение синус Гордона.



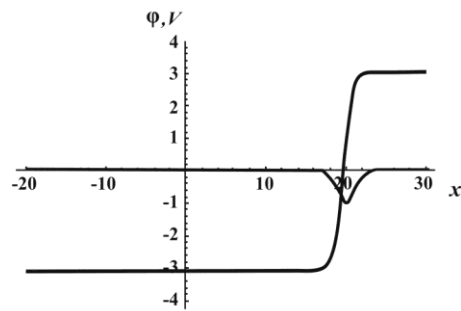
t_1



t_2



t_3



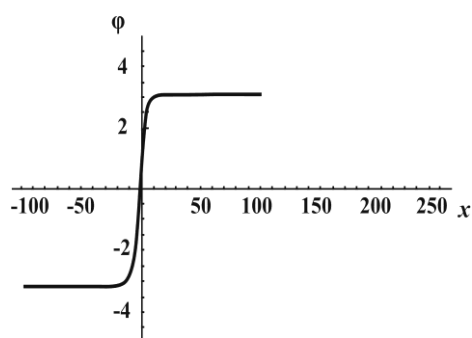
t_4

Рис.3.11. Графики смещений и скорости дислокации для невозмущенного синус уравнения Гордона.

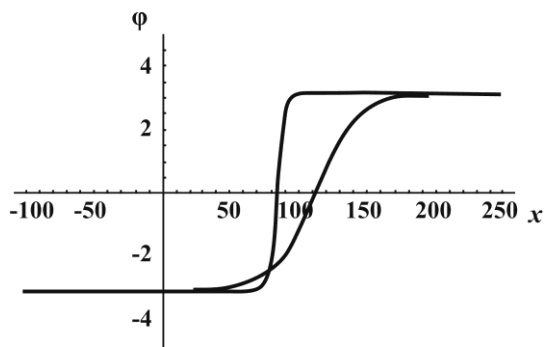
Как видно из Рис. 3.11, максимум тангенса угла наклона движется параллельно с дислокацией. Таким образом для достаточного промежутка времени форма дислокации при отсутствии возмущения не меняется.

Рассмотрим две дислокации, одна движется с постоянной скоростью, далекой от скорости звука, другая со временем увеличивает скорость. Как известно, если скорость дислокации равна нулю, то ее размер зависит лишь от характеристик решетки. Размер движущейся дислокации с увеличением скорости дислокации v уменьшается, причем

это уменьшение определяется формулой [98]: $l_v = l_0 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c_0^2}}$.



t_1



t_2

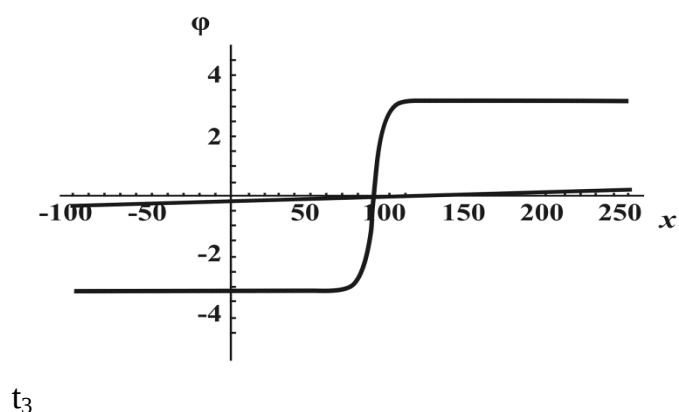


Рис.3.12. Разрушение дислокации в последовательные моменты времени при приближении ее скорости к скорости звука (дислокация, не изменившая форму, движется с постоянной скоростью)

На Рис.3.12 представлены две дислокации: одна движется со скоростью порядка 10^2 см/с, а скорость второй дислокации растет до близкой к скорости звука. Как видно из Рис 3.12, при увеличении скорости дислокации ее размеры уменьшаются, а при скорости, близкой к скорости звука, дислокация разрушается. (При этом энергия излучается в виде фононов). Сравнительные размеры дислокаций различных скоростей ($v \sim 10^4$ см/с с коэффициентами), представлены на рис.3.13.

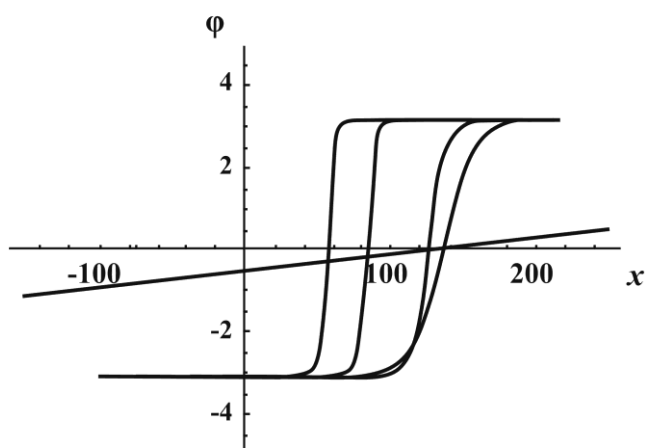


Рис.3.13. Сравнительные размеры дислокаций, движущихся с разными скоростями. Таким образом, движение дислокации невозможно со скоростью, большей скорости звука. Ширина дислокации уменьшается с ростом ее скорости («релятивистское сжатие»).

Выводы к главе 3

В полупроводниковой одномерной среде (квантовая проволока) со слабой дисперсией и слабой нелинейностью в присутствии продольной звуковой и электромагнитной волн при определенных условиях возможно образование звукового солитона Кортевега де Фриза. Амплитуда и скорость солитона зависят от параметров задачи. Моделирование эволюции возникновения такого солитона при разных начальных условиях показало, что при увеличении коэффициента нелинейности при одинаковом начальном импульсе число рождающихся солитонов растет. Начиная с коэффициента нелинейности $\sigma \leq \sqrt{12}$ решения являются несолитонными.

Численный эксперимент показал, что при учете диссипации происходит затухание солитона, причем при увеличении коэффициента диссипации время жизни солитона сокращается. Из-за зависимости скорости солитона от его амплитуды с течением времени группа солитонов выстраивается по убывающей амплитуде.

Анализ сходства и различия солитонов Кортевега де Фриза и синус Гордона (дислокация) показал, что хотя при учете диссипации солитон синус Гордона замедляется, однако, остановившись, он может жить очень долго, что согласуется с экспериментом. Солитон Кортевега де Фриза при учете диссипации замедляется, одновременно уменьшая высоту и расплываясь. Затухание происходит быстрее при увеличении коэффициента диссипации. Время жизни солитона Кортевега де Фриза обратно пропорционально коэффициенту диссипации.

Таким образом, свойство устойчивости солитона синус Гордона сильно отличает его от солитона Кортевега де Фриза. При столкновении солитонов Кортевега де Фриза не наблюдаются неупругие эффекты, т.е. после столкновения солитоны выходят без искажения. При столкновении солитона и антисолитона синус Гордона при малом затухании они упруго проходят друг сквозь друга, при увеличении коэффициента затухания они образуют бризер, который со временем затухает. Изучение динамики бризера важно при разработке вычислительных систем, так как остаточная энергия бризеров может давать существенный вклад в шумы ЭВМ.

Если скорость солитона синус Гордона равна нулю, то его размер зависит от характеристик решетки. При приближении скорости к скорости звука он разрушается, и его энергия излучается в виде фононов. Уравнение Кортевега де Фриза и уравнение синус Гордона представляют собой достаточно хорошее приближение к реальной

ситуации. Они обладают значительной общностью. Число нелинейных явлений, которые могут быть описаны данными уравнениями, велико и разнообразно. Например, при учете взаимодействия дислокации с примесями, при наличии внешней силы или диссипации и т.д. в полностью интегрируемые уравнения Кортевега де Фриза и синус Гордона вводятся возмущения. Такие уравнения могут быть решены методами теории возмущений, численно или другими способами.

ГЛАВА 4. НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ТЕОРИИ ДЕФОРМАЦИИ И УПРОЧНЕНИЯ

Введение. Совокупность явлений, связанных с изменением механических и физико-химических свойств поликристаллических и монокристаллических твердых тел в процессе пластической деформации, называется упрочнением. В процессе пластической деформации с увеличением накопленной деформации увеличиваются все показатели сопротивления деформированию: пределы упругости, текучести и прочности. Одновременно с этим увеличивается электрическое сопротивление, теплопроводность, изменяются магнитные свойства ферромагнитных поликристаллов и так далее.

В связи со сложностью совокупного изменения указанных свойств до настоящего времени физическая природа упрочнения полностью не выяснена. В настоящее время изучение явления упрочнения происходит в различных направлениях.

При феноменологическом подходе на основе экспериментов устанавливаются макро- и микрозависимости деформаций материалов от величины и характера напряжений, времени их действия, структуры и состава материалов, внешней среды и других факторов. Исходя из реологии исследуемых материалов принимаются различные модели деформации материалов, на основе чего аналитическим образом находят зависимости напряжения от деформации, описывающие явления упрочнения.

Физический подход при изучении пластичности и упрочнения основан на теоретическом и экспериментальном исследовании дислокационных явлений в кристаллической решетке и изменении этих явлений при нагружении.

В [104,105] при объяснении упрочнения используется синэнергетический подход, то есть самоорганизация дислокационных ансамблей. Рассмотрены особенности образования ансамбля дислокационных структур в поликристаллических материалах. Разработана теория дислокационных ансамблей в пластически деформируемых кристаллах и их эволюция с учетом реальной структуры. Самоорганизация возможна в неравновесных нелинейных системах. Законы самоорганизации являются универсальными и являются прямым следствием второго закона термодинамики и основных свойств энтропии. При возникновении в системе самоорганизованной структуры движение ее элементов становится самосогласованным на расстояниях, многократно превышающих размеры самих элементов. С явлением самоорганизации мы уже в встречались в главе 3.

В настоящее время основное внимание исследователей сосредоточено на изучении изменения механических характеристик материалов в процессе упрочнения.

Для реализации упрочнения материалов исследования проводятся в основном в трех направлениях: создание новых сплавов с заранее заданными физико-механическими свойствами; термофизические методы упрочнения; деформационное упрочнение. Первые два направления требуют длительного времени для исследования и внедрения в практику. Поэтому актуальными являются конкурентноспособные методы повышения прочности посредством деформационного упрочнения. Увеличение прочности связано с увеличением накопления деформаций. Существуют три способа накопления деформаций: 1. Тепловой градиент. Он заключается в том, что создается определенное тепловое поле с заданным градиентом, при котором тепловые флуктуации способствуют преодолению дислокацией потенциальных барьеров в кристалле, что позволяет увеличивать накопленную деформацию; 2. Изменение тензора напряжений таким образом, чтобы в опасной зоне, где может произойти разрушение кристалла, преобладали сжимающие напряжения; кроме того, тензор напряжений можно изменять, переходя от одноосного напряженного состояния к двухосному; 3. Упрочнение действием переменного внешнего упругого поля.

Возможность управлять процессом накопления деформаций говорит о том, что пластичность – не свойство конкретного материала, а его состояние. На микроуровне явление упрочнения связано с движением дислокаций в рельефе Пайерлса. По разным причинам (большая высота барьера Пайерлса, насыщение и т.д.) со временем движение дислокаций прекращается и при дальнейшем увеличении внешней нагрузки в некотором сечении может произойти лавинообразное увеличение напряжения и разрыв.

Наиболее полный обзор актуальных проблем пластичности и упрочнения кристаллов приведен в [104,105]. В этих работах на основе дислокационных представлений рассмотрено состояние современной физики прочности и пластичности кристаллов. Как представлено в обзоре [104], исследования в основном направлены на изучение и понимание механизмов и причин таких явлений как стадийность кривых деформационного упрочнения кристаллов, локализации пластической деформации в виде системы линий и полос скольжения и так далее. Далее возникла необходимость разработки теории дислокационных ансамблей в пластически деформированных кристаллах и получения кинетических уравнений для описания их пространственно-

временных эволюций в реальных условиях деформирования. В упомянутом обзоре приведены основные уравнения и соотношения континуальной теории дислокаций. Получены кинетические уравнения для плотности распределения дислокаций. На основе этих результатов проанализировано их соответствие типичной трехстадийной кривой деформационного упрочнения кристаллов. Таким образом, дальнейшее развитие изучения явления упрочнения может быть реализовано на основе сочетания дислокационных представлений и феноменологической теории. В [105] рассмотрены также размерные эффекты в микро- и наноразмерных кристаллах в рамках дислокационного подхода. В [106] измерением дисперсии низкочастотного ($\approx 1\text{кГц}$) звука исследуется аномальное уменьшения напряжения течения чистых металлов (разупрочнение) при $T \leq (20 - 30)K$.

В процессах деформационного упрочнения поликристаллических материалов уменьшение размеров зерен приводит к изменению некоторых физических величин и заметному (в 1.5 – 3 раза) увеличению характеристик прочности. Упрочненные поликристаллические материалы характеризуются тем, что размер элементов их структуры сопоставим с характеристической длиной различных физических явлений (размер петли Франка-Рида при движении дислокаций, длина свободного пробега электронов для электрокинетических явлений, размер домена для магнитных явлений и т.п.). Из-за малости отдельных структурных элементов процессы переноса вещества и энергии протекают в этих структурах иным образом, чем в системах того же химического состава, но с гораздо большими размерами элементов. Такое отличие обуславливает совершенно необычные свойства поликристаллов в наноструктурном состоянии [107].

Таким образом, исследование процессов упрочнения монокристаллических и поликристаллических материалов, исходя из новых, физически обоснованных моделей, позволяющих более детально раскрыть механизмы упрочнения, является актуальной задачей.

Кроме того, в настоящей главе рассматривается механизм явления упрочнения на микроуровне, основанный на движении отдельных дислокаций в рельефе Пайерлса при наличии переменного внешнего упругого поля и без него. Получена стадийность эффекта упрочнения, зависимость коэффициента упрочнения от частоты переменного

упругого поля. Дана трактовка влияния рельефа Пайерлса на характер движения дислокации, то есть рассмотрен механизм процесса упрочнения в микромасштабе.

В настоящей главе нами также рассчитаны значения предельных амплитуд сильных звуковых волн в тонких полупроводниковых пленках. Показано, что их значения обратно пропорциональны толщине пленки, модулю продольной упругости и прямо пропорционально предельному напряжению при данной деформации.

4.1. Предельное состояние тонких полупроводниковых пленок в поле сильных звуковых волн [108].

Общеизвестно, что различные внешние воздействия на кристаллы с линейными дефектами сопровождаются возникновением в их объеме звуковых импульсов, связанных с движением дислокаций, образованием трещин и разрушением материала. Несмотря на повышенный интерес к исследованиям звуковых волн в полупроводниковых пленках, имеющаяся в настоящее время информация отражает не все аспекты данной проблемы. В частности, имеются трудности по созданию аналитических моделей, позволяющих проведение расчетов полупроводниковых пленок на прочность. Прочность – свойство материала, характеризующее его способность сопротивляться необратимому деформированию под действием внешней нагрузки. Предел прочности – напряжение или деформация, соответствующие максимальному (в момент разрушения материала) значению нагрузки. Предел прочности – основная характеристика механических свойств материалов, которые разрушаются при малых пластических деформациях.

Наиболее широко применяемыми полупроводниками являются германий и кремний. Германий используется для изготовления выпрямителей, транзисторов, фотодиодов, линз для инфракрасных лучей и т.д. Нелегированный кремний применяют при создании мощных силовых выпрямителей, стабилизаторов напряжений, солнечных батарей, структур, состоящих из чередующихся полупроводниковых слоев и других приборов.

В полупроводниковых приборах, работающих при повышенных токовых и тепловых нагрузках, в материале возбуждается звук, взаимодействующий с упругой средой. Возбуждающиеся сильные звуковые волны оказывают влияние на прочность полупроводниковых пластин. Под действием сильных звуковых волн в тонких

полупроводниковых пленках могут возникать напряжения и деформации, превышающие допустимые пределы для данного материала и толщины пленки.

В последнее время в связи с миниатюризацией классических микроэлектронных приборов особенно возрос интерес к пленочным системам. Поэтому при создании новых полупроводниковых приборов актуальным является расчет тонких пленок на прочность при взаимодействии с сильными звуковыми волнами.

Рассмотрим тонкую полупроводниковую пленку толщиной $2l$ в поле сильной звуковой волны, ось Z направлена перпендикулярно плоскости пленки. Смещения $\vec{u}$ продольных и поперечных волн лежат в вертикальной плоскости. Истинный вектор деформации в упругой волне в этом случае является суммой поперечной и продольной составляющей волн, компоненты каждой из составляющих удовлетворяют волновым уравнениям с соответствующими значениями скоростей.

Проводимый расчет ограничен областью температур $T < \theta/n$, где θ – температура Дебая, n – число атомных слоев в пленке [59].

Для рассматриваемых типов волн удобно ввести потенциалы Φ и A_y , при помощи которых вектор $\vec{u}$ может быть представлен в виде (из векторного анализа известно, что такое представление всегда возможно):

$$\vec{u} = \nabla\Phi + \text{rot}A_y. \quad (4.1)$$

Потенциалы Φ и A_y удовлетворяют волновым уравнениям. Решения этих уравнений при незакрепленных границах в случае продольных волн (симметричные колебания) могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned} \Phi &= A \cosh(\alpha z) \exp i(qx - \omega t) \\ A_y &= B \sin(\beta z) \exp i(qx - \omega t) \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\text{где } \alpha^2 = q^2 - \frac{\omega^2}{c_r^2}, \quad \beta^2 = \frac{\omega^2}{c_r^2} - q^2.$$

В случае деформации сдвига (антисимметричные колебания) решение имеет вид:

$$\begin{aligned} \Phi &= A \sinh(\alpha z) \exp i(qx - \omega t) \\ A_y &= B \cosh(\beta z) \exp i(qx - \omega t) \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\text{где } \beta^2 = q^2 - \frac{\omega^2}{c_r^2}; \quad \alpha^2 = q^2 - \frac{\omega^2}{c_r^2}.$$

С учетом зависимостей (4.2) и (4.3) полный вектор смещения может быть представлен в виде:

$$\vec{u} = \vec{u}_{np} + \vec{u}_{uz} = \exp i(qx - \omega t) \left\{ \vec{i} \left[Aiqe^{\alpha z} - B\beta(\cos \beta z + ch(\beta z)) \right] + \vec{k} \left[A\alpha e^{\alpha z} + Biq(\sin \beta z + ch(\beta z)) \right] \right\}, \quad (4.4)$$

где $\vec{i}$, $\vec{k}$ - единичные вектора в направлениях x , z , соответственно.

Компоненты смещения имеют вид:

$$\begin{aligned} u_x &= \exp i(qx - \omega t) \left[Aiqe^{\alpha z} - B\beta(\cos \beta z + ch(\beta z)) \right]; \\ u_z &= \exp i(qx - \omega t) \left[A\alpha e^{\alpha z} + Biq(\sin \beta z + ch(\beta z)) \right]. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Перейдем к определению компонент деформаций и напряжений, при этом берем их реальную часть. Пользуясь известными соотношениями теории упругости [110], напряженно-деформированное состояние пленки можно описать следующим образом:

линейные деформации

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}; \quad \varepsilon_{xz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}; \quad \varepsilon_y = 0, \quad (4.6)$$

сдвиговые деформации

$$\gamma_{xz} = \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x}; \quad \gamma_{xy} = 0; \quad \gamma_{yz} = 0.$$

Так как компоненты смещений u_x и u_z не зависят от координаты y (см. 4.4), напряжения и деформации в рассматриваемом случае связаны следующим образом:

нормальные напряжения

$$\sigma_x = \lambda\theta + 2\mu\varepsilon_x; \quad \sigma_y = \lambda\theta; \quad \sigma_z = \lambda\theta + 2\mu\varepsilon_z \quad (4.7)$$

касательные напряжения

$$\tau_{xz} = \mu\gamma_{xz}; \quad \tau_{yz} = 0; \quad \tau_{xy} = 0,$$

где $\theta = \varepsilon_x + \varepsilon_z$ —объемная деформация (согласно (4.6), $\varepsilon_y = 0$).

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}; \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

ν -коэффициент Пуассона, E -модуль продольной упругости материала, λ и μ — коэффициенты Ламэ.

Подставляя в формулы (4.6) и (4.7) реальные части смещений u_x и u_z найдем значение деформаций и напряжений, которые зависят от амплитуд продольных и изгибных волн.

Поскольку пленка имеет определенную прочность, то налагается ограничение на величины компонент напряжений, тем самым ограничиваются амплитуды внешнего воздействия. Для отыскания предельных значений амплитуд воспользуемся условием прочности в виде [110]:

$$(\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + 4\tau_{xz}^2 = \sigma_T^2 \quad (4.8)$$

где σ_T –напряжение предельного состояния материала при хрупком разрушении.

Из условия прочности (4.8) с учетом зависимостей (4.5), (4.6), (4.7) при граничных условиях $z = l; \sigma_z = 0; \tau_{xz} = 0$ получаем следующее выражение для отыскания предельных амплитуд:

$$2qB\beta(\cos \beta l + ch(\beta z))\sin(qx - \omega t) - A(q^2 + \alpha^2)e^{\alpha l} \cos(qx - \omega t) = \frac{\sigma_T}{2\mu}.$$

Задавая фазу волны для двух случаев $qx - \omega t = \frac{\pi}{2}$ и $qx - \omega t = \pi$, получаем допустимые значения коэффициентов A и B при данных толщине пленки и прочностных характеристиках материала:

$$A = \frac{\sigma_T}{2\mu(q^2 + \alpha^2)e^{\alpha l}}; \quad B = \frac{\sigma_T}{4\mu\beta q(\cos \beta l + \frac{e^{\beta l}}{2} - \frac{e^{-\beta l}}{2})};$$

Из проведенного анализа следует:

- 1) предельное значение амплитуды прямо пропорционально напряжению предельного состояния при хрупком разрушении;
- 2) предельные амплитуды обратно пропорциональны толщине пленки;
- 3) предельная амплитуда B осциллирует в зависимости от толщины пленки;
- 4) предельные амплитуды A и B обратно пропорциональны модулю упругости, который, в конечном счете, определяет величину напряжения при заданной деформации. Поэтому, если для данного материала при данной деформации возникают меньшие напряжения, то предел подаваемой амплитуды растет.

4.2. Деформационное упрочнение при пластической деформации монокристаллов [109,113,114]

Общеизвестно, что холодная пластическая деформация приводит к значительному взаимозависимому изменению формы, размеров и физико-химических и механических свойств деформируемых металлов и сплавов. Несмотря на наличие многочисленных экспериментальных и теоретических исследований по этому вопросу [110, 221] до настоящего времени физическая природа упрочнения полностью не выяснена. Экспериментальные исследования при разных напряженных состояниях показали, что параметр, характеризующий упрочнение, т.е. сопротивление деформированию при холодной деформации, является некоторой нелинейной функцией от текущей величины накопленной деформации. В феноменологических теориях при описании явления упрочнения указанную зависимость аппроксимируют некоторой степенной функцией вида $\sigma_s = K\varepsilon^n$, где K, n , являясь параметрами упрочнения, определяются на основе экспериментальных исследований данного материала на линейное растяжение, σ_s — напряжение сопротивления деформированию [110].

При исследовании больших (конечных) деформаций вводится понятие истинных деформаций, при подсчете которых учитывается не постоянная начальная длина образца, а переменная, увеличивающаяся в процессе деформации растяжения:

$$\varepsilon = \int_{l_0}^l \frac{dl}{l} = \ln \frac{l}{l_0}. \quad (4.9)$$

При линейном напряженном состоянии относительное удлинение $\delta = (l - l_0)/l_0$ или $l/l_0 = 1 + \delta$. Согласно условию постоянства объема, при пластической деформации $S_0 l_0 = S l$, где l, l_0, S, S_0 — соответственно, текущие и начальные величины длины и площади поперечного сечения образца. Из полученных выражений, имеем

$$\varepsilon = \ln \frac{l}{l_0} = \ln \frac{S}{S_0} = \ln(1 + \delta). \quad (4.10)$$

Растягивающую силу в любой момент деформирования можно выразить через напряжение и действительную площадь поперечного сечения образца $F = \sigma_s \cdot S$. Дифференцируя, получим

$$dF = \sigma_s dS + S d\sigma_s = 0$$

Из условия постоянства объема $S = S_0 / (1 + \delta)$, $dS = -S_0 d\delta / (1 + \delta)^2$. Подставляя значения S и S_0 , после некоторых преобразований получим

$$d\sigma_s / \sigma_s = d\delta / (1 + \delta).$$

Согласно (4.10), $\varepsilon = \ln(1 + \delta)$ или $d\varepsilon = d\delta / (1 + \delta)$, поэтому

$$d\sigma_s = \sigma_s d\varepsilon \quad (4.11)$$

Многочисленными исследованиями установлено, что если совмещать кривые упрочнения, полученные при испытании образцов, со степенной зависимостью напряжения текучести от накопленной деформации, то получится полное совпадение этих кривых [110]. Таким образом, можем принять, что

$$\sigma_s = K\varepsilon^n \quad (4.12)$$

Дифференцируя (4.12) с учетом (4.11), получим

$$d\sigma_s / d\varepsilon = nK\varepsilon^{n-1} = \sigma_s / \varepsilon, \quad \varepsilon = n.$$

Подставляя соответствующие значения истинного напряжения $\sigma_s = \sigma_b(1 + \delta) = \sigma_b e^n$ и $\varepsilon = n = \ln(1 + \delta)$, можно определить коэффициент K . Окончательно получим

$$\sigma_s = \sigma_b e^n n^{-n} \varepsilon^n; \quad n = \ln(1 + \delta).$$

Таким образом, нами получено выражение для истинного напряжения, которое представляет собой частное от деления растягивающей силы на текущую площадь поперечного сечения. Установленные взаимосвязи между механическими свойствами материалов и параметрами в степенном законе деформационного упрочнения были нами использованы при анализе различных физических задач, например, при разработке аналитической модели деформации в условиях плоского напряженного состояния нам удалось получить замкнутые решения для полей напряжений и деформаций с учетом взаимосвязанного изменения толщины материала и деформационного упрочнения [112].

Истинные характеристики пластичности по сравнению с условными, обладают рядом преимуществ, прежде всего аддитивностью. По условным удлинениям осложняются соответствующие расчеты, в то время как при применении истинных характеристик пластичности подсчеты суммарной деформации весьма упрощаются.

С микроскопической точки зрения, пластическая деформация является результатом движения линейных дефектов – дислокаций. Трансляционная симметрия кристалла приводит к тому, что потенциальная энергия дислокаций является

периодической функцией координат. Поэтому при скольжении на дислокацию со стороны искаженной решетки действует периодическая сила, описываемая синусоидальным потенциалом, соответствующим рельефу кристалла (рельеф Пайерлса). Очевидно, чем выше потенциальный барьер, тем большие внешние силы требуются для скольжения дислокаций. При $\sigma > \sigma_{\text{П}}$ (σ - внешнее напряжение, $\sigma_{\text{П}}$ - напряжение Пайерлса) движение дислокаций соответствует классическому случаю, при $\sigma < \sigma_{\text{П}}$ движение дислокаций связано с термоактивационным преодолением потенциальных барьеров, которое осуществляется путем флуктуационного зарождения перегибов (изломов) на линии дислокации в плоскости скольжения. При очень низких температурах и напряжениях движение дислокаций может осуществляться путем квантового туннелирования перегибов дислокаций через барьеры Пайерлса [103].

Известно, что для чистых монокристаллов при скорости деформации 10^{-6} 1/с напряжения, необходимые для начала пластической деформации (стартовые напряжения) могут составлять десятые доли Н/мм². Это, очевидно, объясняется тем, что даже минимальные нагрузки при наличии тепловых флуктуаций способны вызвать направленное смещение дислокаций, и, следовательно, пластическую деформацию.

Под действием внешних нагрузок в монокристаллах происходит движение дислокаций – микропластическая деформация.

Экспериментальными исследованиями установлено, что данному пороговому напряжению соответствует определенная скорость движения дислокаций, а не ее ускорение, как это следовало бы из второго закона Ньютона. Объясняется это явление тем, что должна существовать сила, мешающая движению дислокации в плоскости скольжения и увеличивающаяся с увеличением ее скорости. Эту силу обычно называют силой внутреннего трения. Она ответственна за диссипацию (рассеяние) упругой энергии.

Одной из причин возникновения силы трения является взаимодействие движущейся дислокации с решеточным рельефом Пайерлса.

В [103] изучены микроструктура и механические свойства ультрамелкозернистого Al технической чистоты, полученного методом равноканального углового прессования, в интервале температур 4,2–295 К. Основными критериями при выборе материалов, используемых в технике при криогенных температурах, являются малый удельный вес, высокая прочность и

пластичность. Сочетание этих свойств в алюминии и его сплавах делают эти материалы практически незаменимыми в криогенной технике, авиакосмической и других отраслях промышленности. Однако конструктивное использование этих материалов требует изучения особенностей их поведения в условиях низких и сверхнизких температур.

В настоящее время техника и точность эксперимента дали возможность наблюдать движение отдельных дислокаций в кристалле, а не их скоплений, что позволило более точно объяснить механизм движения дислокаций. В алюминии при малых плотностях дислокаций ($10^2 - 10^3$) см⁻², когда взаимодействием между ними можно пренебречь, дислокации наблюдаются в виде прямых линий вдоль кристаллографических направлений с малыми индексами, указывая на влияние барьера Пайерлса [98].

Экспериментальные исследования показали, что предел текучести материала и градиент роста кривой деформационного упрочнения с приложением ультразвука значительно уменьшаются. Это явление объясняется тем, что звуковые колебания способствуют преодолению межзеренных, а также обусловленных кристаллическим строением барьеров. На подвижность дислокаций может влиять колебание дислокационных сегментов, макроскопическая вязкость металлов при пластической деформации и т.д. При пропускании высокочастотного ультразвука наблюдается внутреннее трение, не зависящее от амплитуды [28]. Движение в рельефе Пайерлса (дискретность решетки) также стимулирует возникновение динамических потерь. Таким образом, анализ движения дислокаций с учетом сопротивления среды в виде внутреннего трения и при наличии ультразвука является актуальной проблемой.

Теория

В настоящей главе нами рассмотрено движение дислокаций в алюминии с учетом рельефа Пайерлса. Из-за наличия рельефа Пайерлса при перемещении дислокации в кристалле ее конфигурация и упругая энергия испытывают периодические изменения, при этом возникают динамические потери, т.к. периодические изменения конфигурации дислокации и неравномерность ее движения приводят к излучению дислокацией упругих волн, т.е. к внутреннему трению.

В общем случае анализ явления упрочнения с точки зрения дислокационных представлений является сложной задачей. Поэтому для описания дислокации нами использована одномерная модель дислокации Френкеля-Конторовой. Модель Френкеля-

Конторовой имеет некоторые преимущества по сравнению с другими моделями. В этой модели используется дискретный подход, энергия Пайерлса уменьшается с увеличением ширины дислокации, что соответствует эксперименту, напряжение Пайерлса по порядку величины также соответствует получаемым из эксперимента данным: $\sigma_{\text{П}} \sim 10^{-4} \mu - 10^{-2} \mu$, μ - модуль сдвига кристалла [98].

В [115] был разработан метод периодического импульсного нагружения. Этот метод позволяет исследовать динамические свойства дислокаций и получать более полную информацию о движении дислокаций. При этом в зависимости от частоты внешнего поля меняется время перехода дислокации в соседнюю долину потенциального рельефа. Соответственно, должна меняться длина свободного пробега дислокации. С уменьшением частоты меняется время нагруженного состояния. Если время действия нагрузки меньше времени образования двойного перегиба критического размера, то дислокация не успевает перейти в соседнюю долину потенциального рельефа, и оставшиеся двойные перегибы будут аннигилировать. В противном случае дислокация переходит в соседнюю долину и увеличивается ее средний пробег. В [116] экспериментально исследована динамика индивидуальных дислокаций в монокристаллах кремния при нагружении периодическими импульсными нагрузками, соизмеримыми со временем перехода дислокации в соседнюю долину. В алюминии потенциальный барьер Пайерлса $\sim 4 \cdot 10^{-15}$ эрг [106]. При частоте $\Omega \sim 10^{12}$ длительность импульса напряжения сопоставима со временем перехода дислокации в соседнюю долину.

Нами принимается термоактивационный механизм движения дислокаций [98]. Математическое моделирование движения дислокации в периодическом поле в рамках принятой модели позволяет получать сведения о характеристиках и подвижности дислокации.

Для описания механизмов внутреннего трения и упрочнения получено неоднородное синус-уравнение Гордона с трением и периодическим внешним упругим напряжением $\sigma(t) = \sigma_0 e^{i\Omega t}$, где σ_0 - амплитуда внешнего воздействия, Ω - частота.

Пусть ось x направлена вдоль равновесного положения прямолинейной дислокации. Тогда уравнение для смещения атомов от положения равновесия в модели Френкеля-Конторовой будет иметь вид:

$$m\ddot{y}_n = f_0 \sin \frac{2\pi y_n}{a} + k(y_{n+1} - y_n) - k(y_n - y_{n-1}) + F_{\text{тр.}} + F_0 \sin[\Omega t], \quad (4.13)$$

где y_n – смещение n -го атома от положения равновесия, m – масса атома, $f_0 = \frac{m(v_0)^2 a}{2\pi(l_0)^2}$, отсюда $l_0 = a \sqrt{\frac{mv_0^2}{2\pi f_0 a}}$, $v_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$, l_0 – параметр, который увеличивается при увеличении жесткости пружины и уменьшении силы со стороны подложки в модели Френкеля-Конторовой, v_0 – скорость звука, a – постоянная решетки. Мы предполагаем, что упругая энергия много больше работы, которую надо затратить на преодоление барьера $ka^2 \gg f_0 a$, т.е. используем длинноволновое приближение.

В безразмерных единицах $\tilde{x} = \frac{x\omega}{v_0}$, $\tilde{t} = t\omega$ уравнение (4.13) принимает вид

неоднородного синус уравнения Гордона (проведена замена переменных, согласно

$2\pi \frac{y_n}{a} = \pi + \varphi_n$, φ_n – отклонение атома от положения равновесия в угловых единицах):

$$\ddot{\varphi}_n + \sin \varphi_n - \varphi_n'' + \beta \dot{\varphi}_n = \gamma \sin \frac{\Omega t}{\omega}, \quad (4.14)$$

где $\omega^2 = \frac{2\pi f_0}{ma}$, $v_0 = a \sqrt{\frac{k}{m}}$, $\beta = \frac{\mu_0}{m\omega}$, $\gamma = \frac{2\pi F_0}{ma\omega^2}$, μ_0 – коэффициент, характеризующий трение, φ_n – смещение n -го атома от положения равновесия.

В частных случаях полученное уравнение допускает нахождение решения в аналитическом виде. В более сложных случаях находят приближенные решения неоднородного синус уравнения Гордона с использованием теории возмущений (напр.[116]). Мы исследуем решения неоднородного синус-уравнения Гордона в численном виде.

Граничные условия, имеющие физический смысл, заключаются в том, что образец, по которому распространяется дислокация, считается открытым на обоих концах, т.е. $\left[\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right]_{x=0} = \left[\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right]_{x=l} = 0$, где l – безразмерная длина образца.

Моделирование осуществлялось с помощью программного пакета Mathematica. При внешней частоте $\Omega \sim 10^{12}$ Гц масштаб времени составлял $2,5 \cdot 10^6$.

Результаты, представленные на Рис.4.1, получены моделированием уравнения (4.14), написанном без учета силы трения и внешнего переменного поля. Таким образом, можем заключить, что при переходе от (4.13) к (4.14) сохраняется дискретный характер уравнения. Поле деформаций осциллирующе уменьшается при удалении от линии

дислокации. Поле напряжений не имеет решений вблизи ядра дислокации, что находится в согласии с [98].

Поля смещений и деформаций дислокации в модели Френкеля-Конторовой представлены на Рис.4.1а (численный эксперимент), из графика видно, что деформация (колоколообразная кривая) имеет характер солитона, локализованного на линии дислокации.

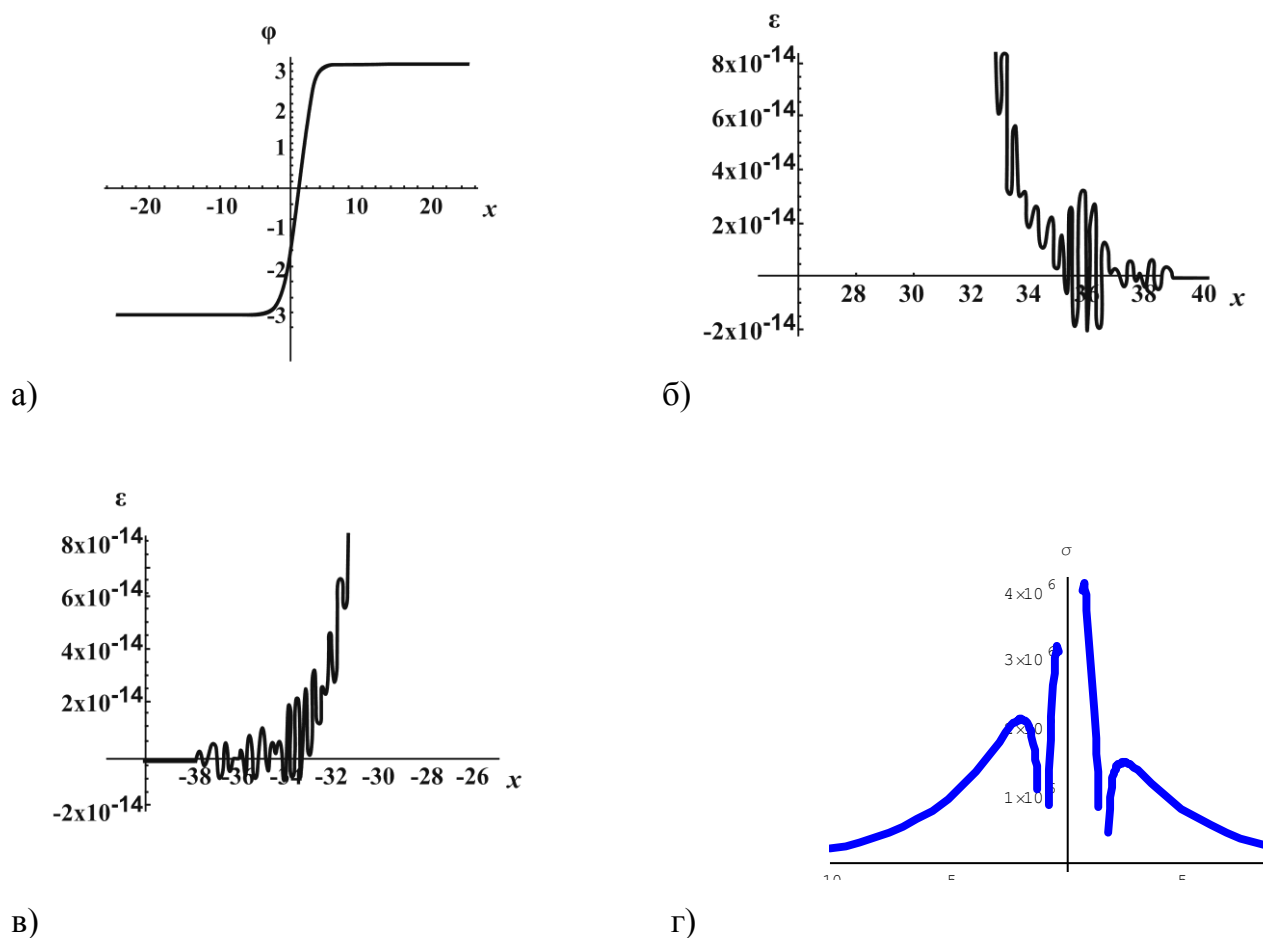


Рис.4.1 . Зависимости деформаций (б, в) и напряжения (г) от координаты в окрестности дислокации (а).

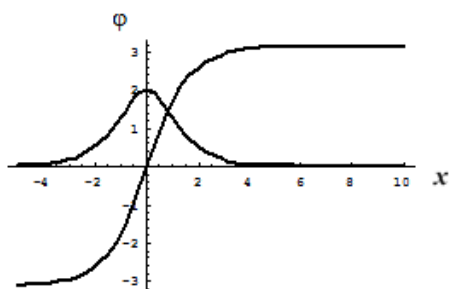


Рис.4.1а. Поля смещений и деформаций для дислокаций в модели Френкеля-Конторовой.

Проведен численный эксперимент для трех дислокаций, находящихся в начальный момент времени в начале координат. Одна из них движется с учетом силы трения, другая – силы трения и переменного упругого поля, третья совершает свободное скольжение. Если в уравнении (4.14) только трение, дислокация со временем останавливается, если частота и трение – она проходит некоторое расстояние, потом останавливается и колеблется в полученном положении, изменяя свою форму. Обе дислокации без дополнительного внешнего воздействия остаются в таком состоянии даже после устранения вызвавшей их появления причины [104,105]. Такое бесконечно большое время релаксации дислокаций связано с действующей на дислокацию силой трения со стороны рельефа Пайерлса или точечных препятствий. Третья дислокация для сравнения совершает свободное скольжение (Рис.4.2).

Исследуем зависимость длины свободного пробега дислокации от частоты внешнего упругого поля с учетом силы трения. Из численного эксперимента следует, что дислокации, исходя из одной точки, со временем останавливаются, причем длина свободного пробега дислокаций разная в зависимости от частоты внешнего переменного поля (Рис.4.3).

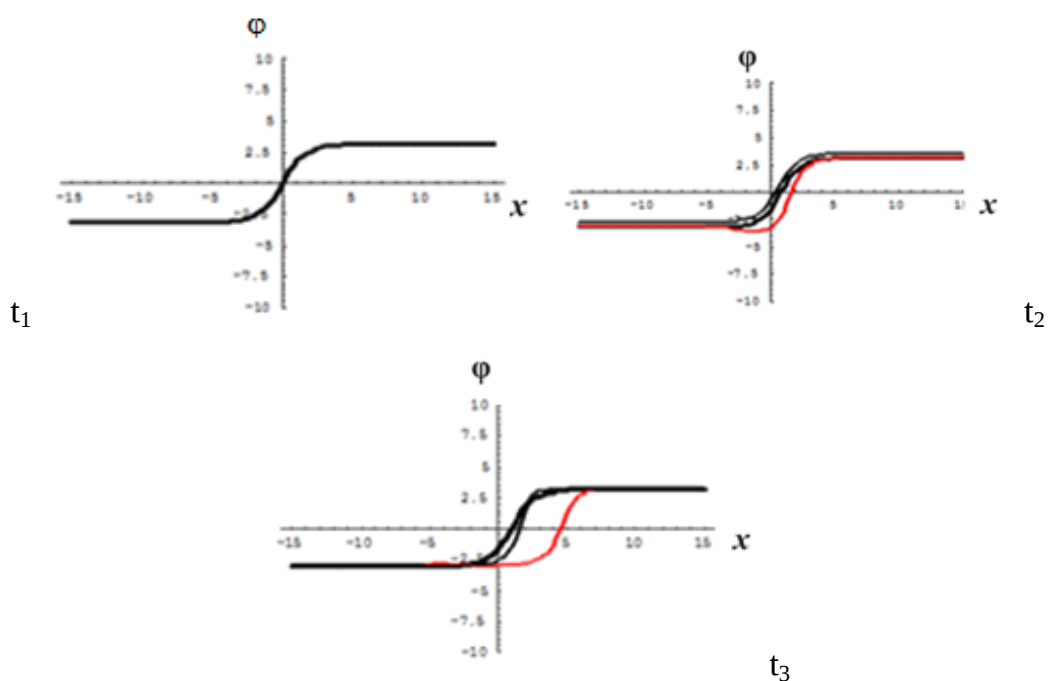


Рис.4.2. Движение дислокаций в последовательные моменты времени: передняя кривая -свободное скольжение, жирная кривая- движение с учетом силы трения , тонкая кривая движение с учетом силы трения и переменного упругого поля.

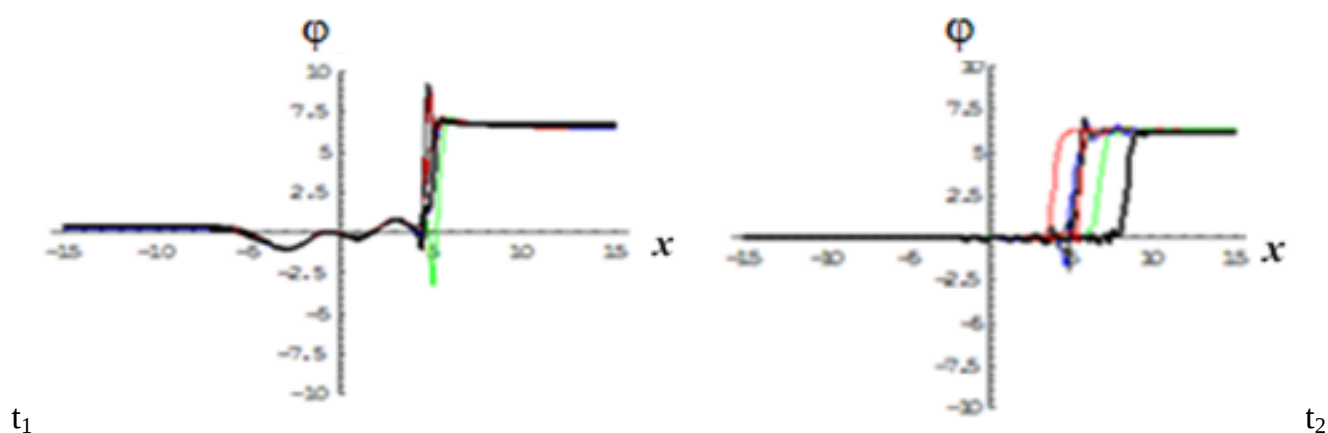


Рис.4.3. Поля смещения дислокаций, для разных частот внешнего поля в последовательные моменты времени.

Из Рис.4.3 видно, что при определенной частоте внешнего поля длина свободного пробега наибольшая. Зависимость длины свободного пробега дислокации от частоты упругого поля при пропускании через кристалл высокочастотного звука $\sim 10^{12}$ Гц с коэффициентами 0.06, 0.1, 0.25, 1, 2, 2.5, 2.7, соответственно, представлена на Рис.4.4.

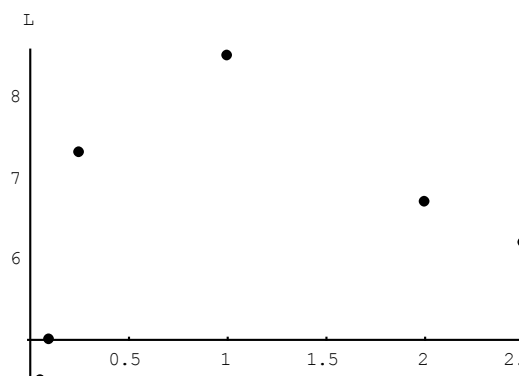


Рис.4.4. Зависимость длины свободного пробега дислокаций от частоты переменного упругого поля.

Из Рис.4.4 видно, что при определенной частоте длина свободного пробега дислокации максимальна. Очевидно, этой частоте соответствует образование несхлопывающегося двойного перегиба, в результате чего в течение времени действия положительной части внешнего упругого поля дислокация переходит в следующую долину потенциального рельефа [115]. Эта частота определяет также стартовое напряжение. Полученный результат доказывает термоактивационный механизм движения дислокаций в алюминии в данных условиях.

Получены также поле деформаций и поле скоростей деформаций движущейся дислокации для последовательных моментов времени в периодическом внешнем упругом поле (Рис.4.5).

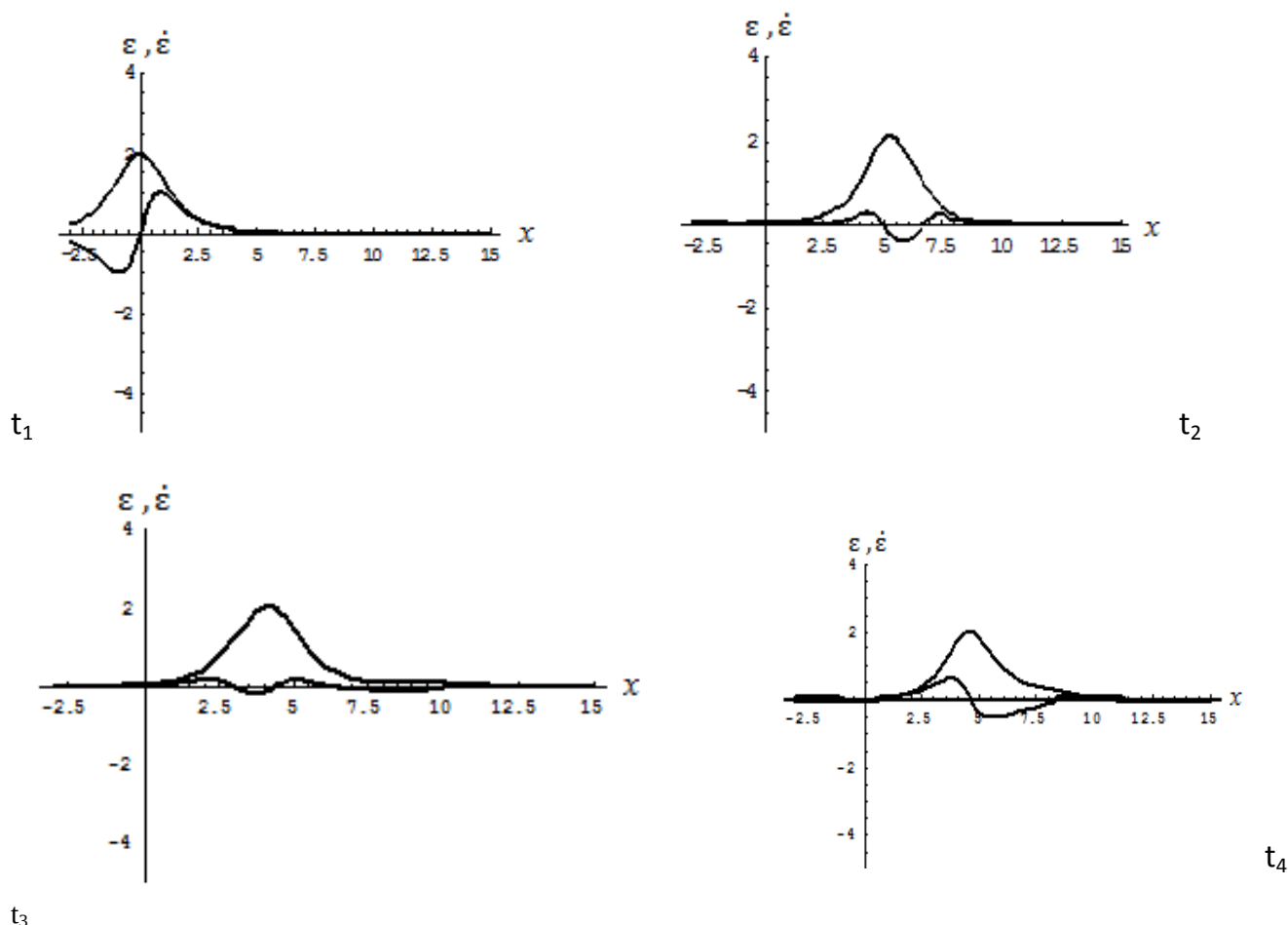


Рис.4.5. Поле деформаций, скоростей деформаций в переменном упругом поле для последовательных моментов времени.

Из численного эксперимента, представленного на Рис. 4.5, следует, что пройдя расстояние, соответствующее максимальной длине свободного пробега для данной частоты, дислокация останавливается, поле деформаций колеблется в направлении скольжения (вперед – назад), а поле скоростей деформаций совершает два вида колебаний: вперед – назад и в соответствии с внешней частотой. Деформация максимальна в центре перегиба дислокации и затухает вдали от дислокации. Зависимость имеет нелинейный характер, что позволяет предположить, что вокруг дислокации в кристалле реализуется область микропластичности.

Из аналогичного эксперимента, но без внешнего переменного упругого поля следует, что в этом случае скорость деформаций стабильна и не меняется ни по величине, ни по знаку (Рис. 4.6).

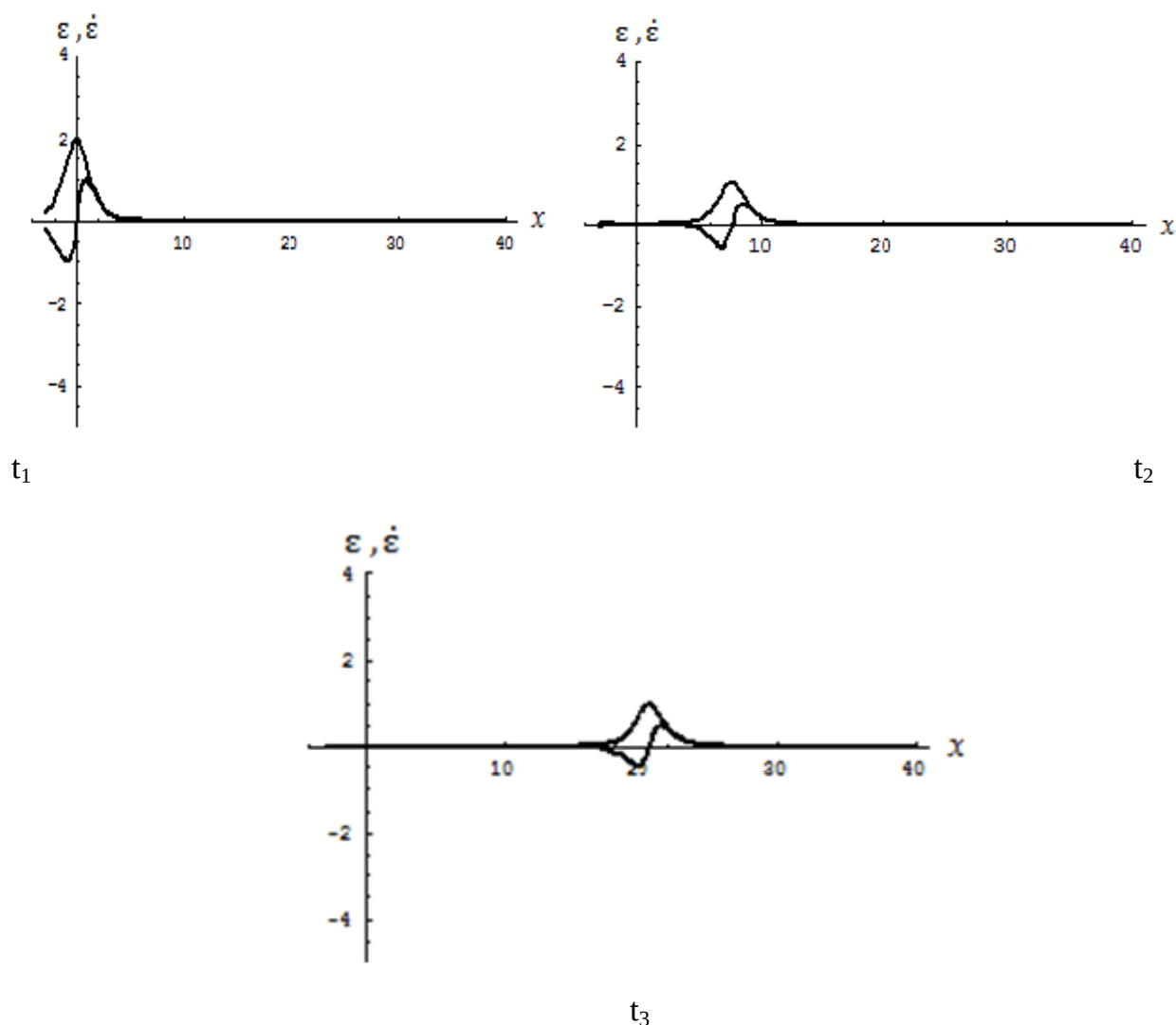


Рис. 4.6. Поля деформаций и скоростей деформаций в последовательные моменты времени без переменного упругого поля.

Таким образом, в первом случае эффект был действительно обусловлен наличием внешнего переменного упругого поля.

В пластической области, в отличие от упругой области, реализуются качественно другие физические явления. При упругой деформации в законе Гука берется относительная деформация, определяемая смещениями атомов от положения равновесия, в результате чего происходит изменение объема образца. Применение закона Гука справедливо в пределах, когда относительное изменение объема $\frac{\Delta V}{V} < 0,2\%$. В области пластичности происходит скольжение наиболее упакованных атомных плоскостей (движение дислокаций), вследствие чего объем материала не меняется (деформация сдвига). Поэтому для оценки величины деформации используют условие постоянства объема. В условиях простого нагружения (каждое последующее значение

напряжения больше предыдущего) зависимость напряжения от деформации выражается в степенном виде.

Таким образом, нами зависимость напряжения от деформации в области пластичности в макромасштабе принимается в следующем виде [110,111,112, 225]:

$$\sigma = k\varepsilon^n, n = \ln(1 + \delta), k = \sigma_b * e^n n^{-n}, \quad (4.15)$$

где σ - напряжение, ε - накопленная деформация, σ_b — предел прочности, δ - относительная деформация при растяжении.

Нами исследованы зависимости $\sigma(\varepsilon)$ при наличии внешнего упругого поля и без него.

Предварительно построены зависимости $\sigma(x)$. При наличии внешней механической частоты зависимость $\sigma(x)$ имеет вид (Рис.4.7).

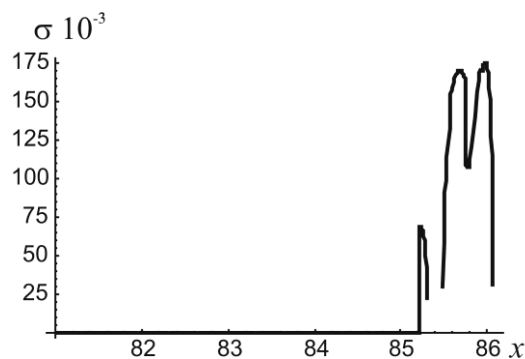


Рис.4.7. Зависимость напряжения от координаты в окрестности дислокации (с внешним переменным упругим полем)

Соответственно, моделирование зависимости $\sigma(\varepsilon)$ в областях монотонного роста $\sigma(x)$ представлено на Рис. 4.8:

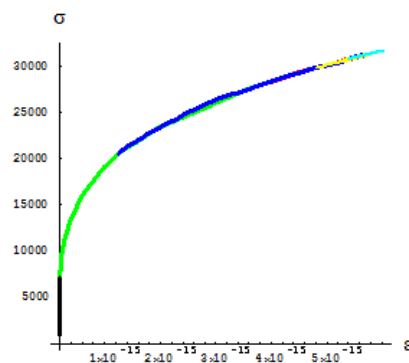


Рис.4.8. Зависимость напряжения от деформации (с внешним упругим полем)

Без внешней частоты зависимости напряжения и смещений от координаты имеют вид:

Рис. 4.9. Как видно из рисунка, максимальное напряжение реализуется вблизи линии дислокации и падает при удалении от нее . Вероятно, осцилляции в этом случае

обусловлены периодическим потенциалом Пайерлса. Сравнивая Рис.4.7 и Рис.4.9а, можно заключить, что резонансное внешнее поле уменьшает барьеры и этим способствует увеличению длины свободного пробега дислокации. Движение дислокации при учете потенциального рельефа кристалла осуществляется следующим образом.

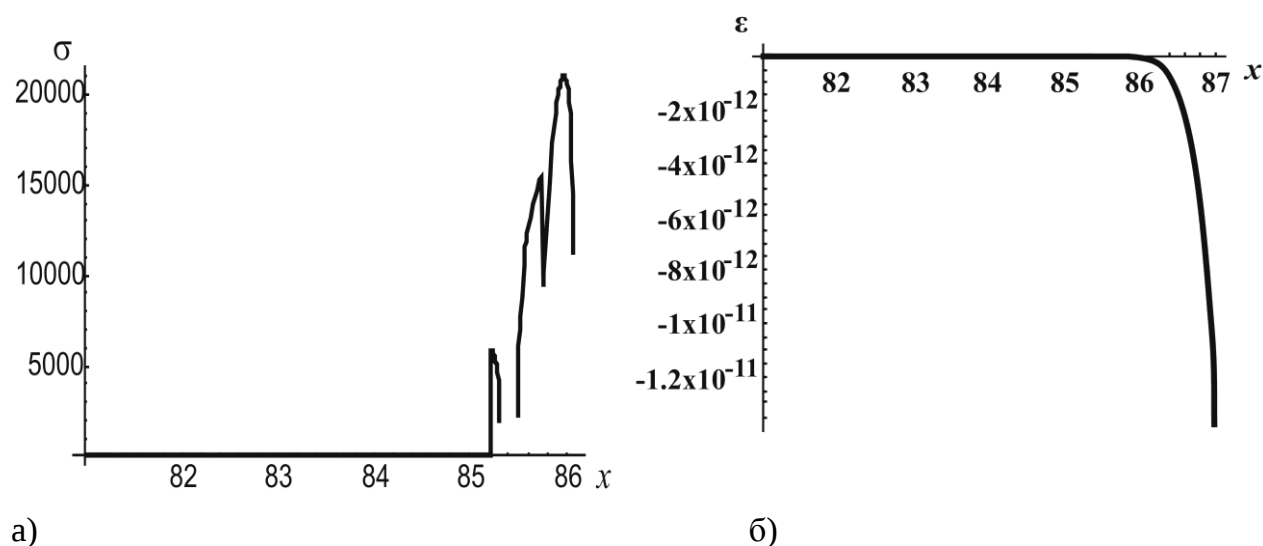


Рис.4.9. Зависимости а) напряжения от координаты в окрестности дислокации; б) деформации от координаты (без переменного упругого поля)

Под действием термической активации происходит образование двойного перегиба на дислокации, дальнейшее движение перегибов в разные стороны происходит под действием очень малых напряжений. Таким образом, акт скольжения осуществляется поэтапно. Моделированы сравнительные зависимости напряжения от координаты для резонансной частоты и близлежащих частот (для наглядности графики даны для чуть смещенных моментов времени (Рис. 4.10).

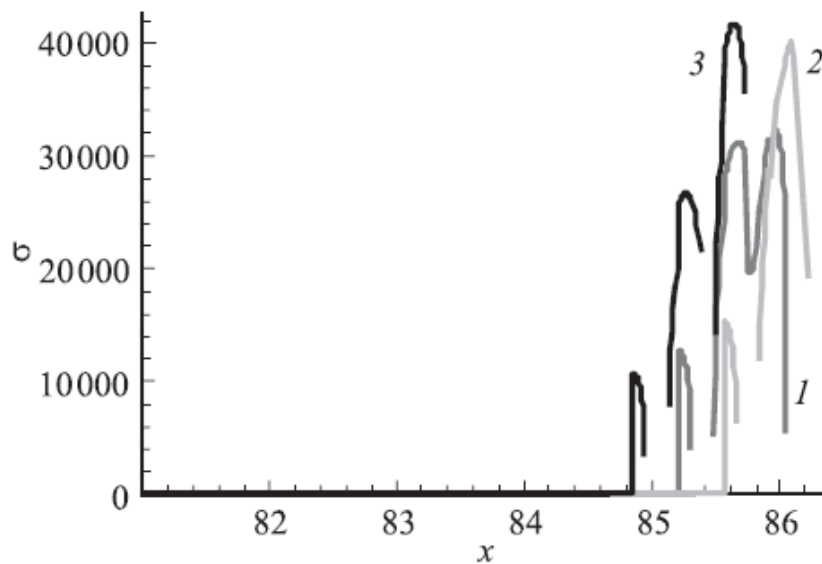


Рис.4.10.Зависимости напряжения от координаты в окрестности дислокации для резонансной частоты :1, близлежащих частот : 2,3.

Из Рис.4.10 следует, что барьер Пайерлса существенно меньше для резонансной частоты. Соответственно, длина свободного пробега дислокации максимальна для резонансной частоты и уменьшается для нерезонансных частот (Рис.4.4).

Для комнатных температур и наличия внешнего упругого поля резонансной частоты ($\sim 10^{12}$ Hz) и близлежащих частот ($\sim 10^{13}$ Hz, $\sim 10^{11}$ Hz) численный эксперимент дает следующую зависимость напряжения от деформации: Рис.4.11.

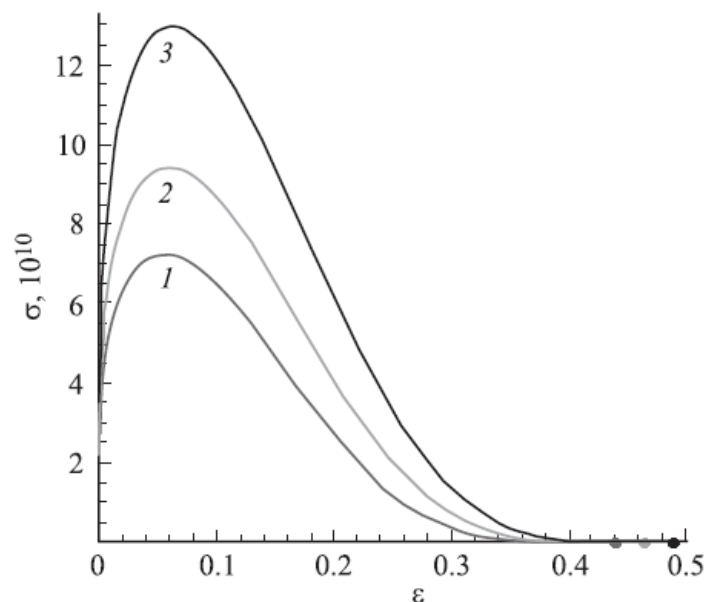


Рис. 4.11. Зависимость напряжения от деформации в присутствии высокочастотного звукового поля. 1: резонансная частота ($\sim 10^{12}$ Hz), 2: ($\sim 10^{13}$ Hz), 3: ($\sim 10^{11}$ Hz).

Как видно из Рис.4.11, при резонансной частоте уменьшается сопротивление деформированию, укорачивается стадия упрочнения и удлиняется стадия разупрочнения

Математическое моделирование зависимости скорости дислокации от координаты дало следующий результат. В области, третьего подъема на графике зависимости напряжения от координаты (Рис.4.9а) (движение из долины на потенциальный рельеф) скорость дислокации уменьшается, на спуске – растет (потенциальный рельеф – следующая долина). Соответствующий график представлен на Рис.4.12.

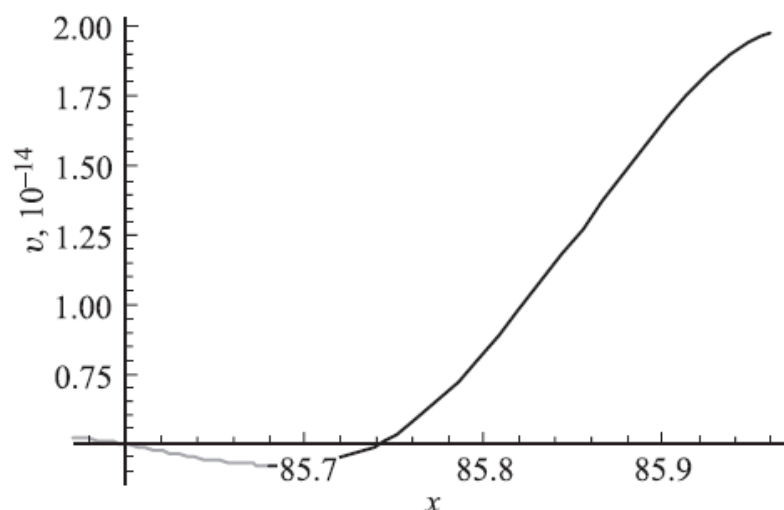


Рис.4.12. Зависимость скорости дислокации от координаты в окрестности барьера Пайерлса

Из Рис. 4.12 видно, что, преодолевая барьер Пайерлса, дислокация действительно движется с переменной скоростью. Неравномерность движения по рельефу Пайерлса приводит к излучению дислокацией упругих волн, т.е. радиационному трению. Этот механизм диссипации, обусловленный исключительно дискретностью решетки, сохраняется при самых низких температурах. Такой характер движения дислокаций возможен только при изменении сопротивления среды движению дислокации. При замедлении движения дислокации, т.е. увеличении сопротивления среды, в макромасштабе получаем деформационное упрочнение. На основании этого предположим, что вокруг дислокации имеется область микропластичности. Таким образом, в пластичном состоянии, которое реализуется в окрестности дислокации, зависимость напряжения от деформации действительно определяется формулой (4.15). (Для алюминия использовано значение $\sigma_b = 73.5 \cdot 10^7 \frac{\text{ДН}}{\text{см}^2}$, $n = 0.255$) . В области монотонной зависимости напряжения от координаты численный эксперимент дает без

внешнего упругого поля следующую зависимость напряжения от деформации (Рис.4.13).

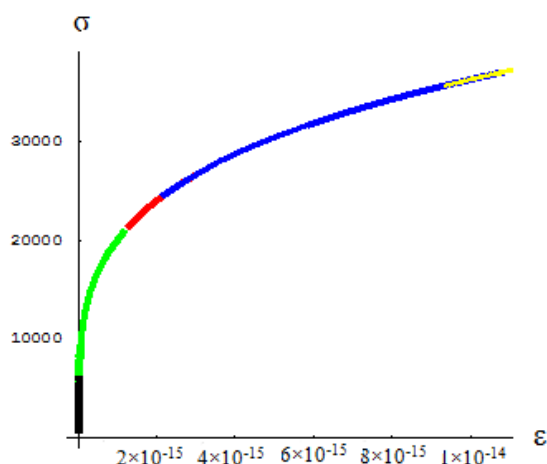


Рис.4.13.Зависимость напряжения от деформации без внешнего поля

Наклон монотонно возрастающей кривой $\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \theta$ - коэффициент упрочнения [117].

В гранецентрированных кубических кристаллах (ГЦК) (к ним относится также алюминий) различают 3 участка, на которых действуют различные механизмы деформации и упрочнения [117]. Нами получена зависимость коэффициента упрочнения от координаты без внешнего поля и с внешним полем (Рис.4.14). Как видно из Рис. 4.14, четко просматриваются 3 области, причем каждому участку соответствует различная зависимость коэффициента упрочнения от координаты. Наличие резонансной частоты уменьшает коэффициент упрочнения.

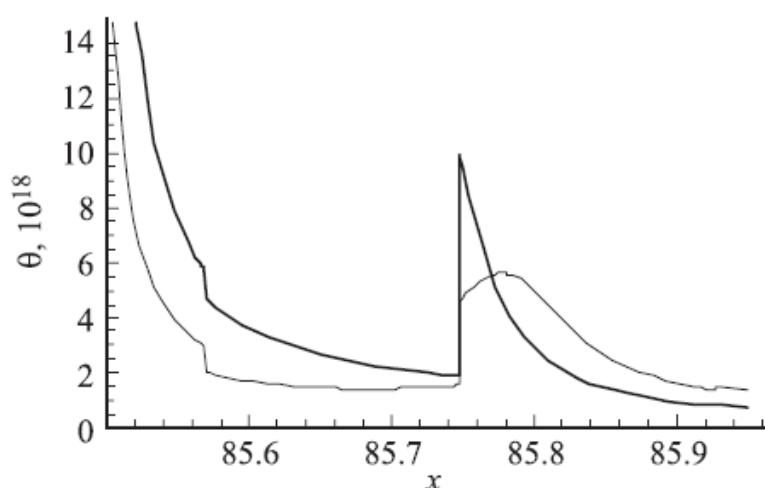


Рис. 4.14.Зависимость коэффициента упрочнения от координаты в окрестности дислокации(тонкая кривая соответствует случаю, когда прикладывается резонансная частота, жирная кривая – без частоты).

Вероятно, упрочнение в этом случае обусловлено рассеянием энергии при движении дислокации в рельефе Пайерлса. Сравнивая Рис.4.12 и Рис.4.14, находим, что в области, где скорость дислокации уменьшается до нуля, коэффициент упрочнения скачкообразно растет, в областях, где скорость дислокации растет, коэффициент упрочнения падает. Полученные результаты находятся в согласии с результатами феноменологической теории и экспериментом (например, [110]). На Рис.4.15 приведены кривые зависимости напряжения от деформации со звуком и без звука.

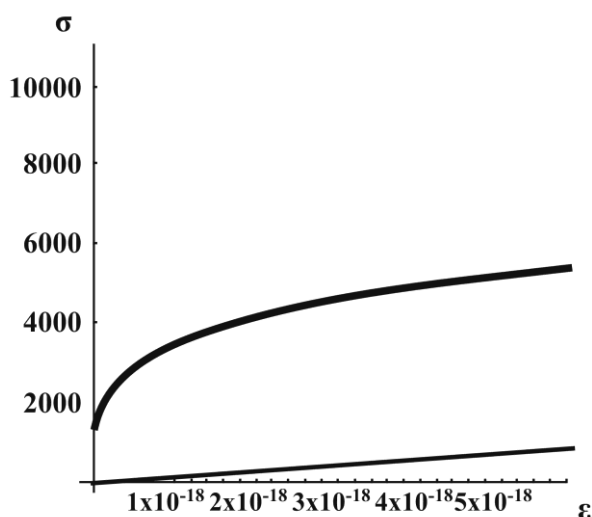


Рис.4.15. Зависимости напряжения от деформации при отсутствии переменного упругого поля (верхняя кривая) и с упругим переменным полем

Из Рис. 4.15 видно, что при наличии звука градиент роста кривой упрочнения уменьшается, вследствие чего уменьшается напряжение текучести.

Таким образом, исследование микрохарактеристик при движении дислокации дает результаты, которые объясняют поведение движущихся дислокаций на макроуровне. Предположение, что в окрестности дислокации имеет место микропластичность, оправдано, так как полученные закономерности в макромасштабе дают результаты, соответствующие известным экспериментальным данным [110, 225 и др.].

Для иллюстрации полученных закономерностей исследуем график зависимости напряжения от координаты (Рис.4.9а) для разных интервалов изменения координаты. Если в уравнении (4.14), написанном без внешней частоты и силы трения, брать x от 85.9 до 85,905 (область в окрестности вершины барьера), то зависимость деформации от напряжения имеет вид:

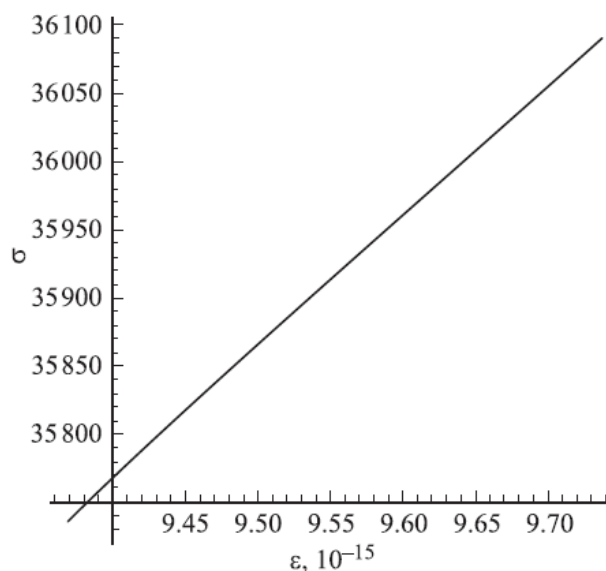


Рис.4.16. Зависимость напряжения от деформации при надбарьерном движении.

Естественно, при надбарьерном движении дислокации зависимость напряжения от деформации имеет упругий характер .

При изменении x от 86 до 86.1 (область спуска на кривой $\sigma(x)$) зависимость напряжения от деформации представлена на Рис.4.17, то есть имеем область пластичности.

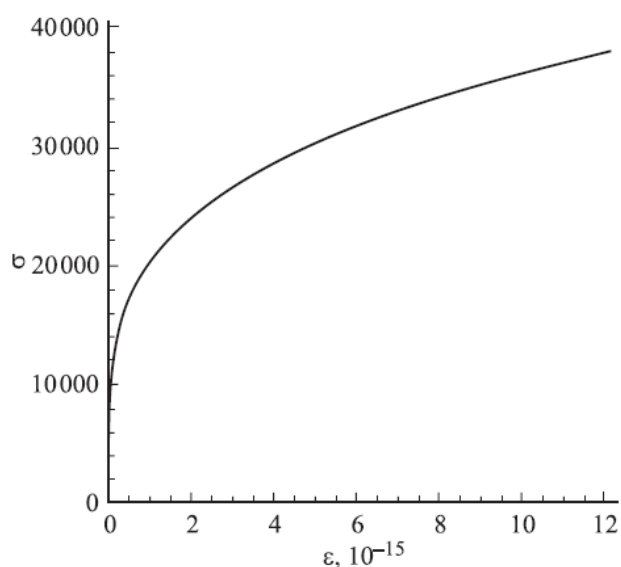


Рис.4.17. Зависимость напряжения от деформации в области монотонной зависимости на графике $\sigma(x)$.

Таким образом, можем заключить, что при преодолении барьера Пайерлса дислокация на микроуровне периодически переходит из области микропластичности в упругую область.

Выводы к главе 4.

Под действием сильных звуковых волн в тонких полупроводниковых пленках могут возникать напряжения и деформации, превышающие допустимые пределы для данного материала и толщины пленки.

Значения предельных амплитуд обратно пропорциональны толщине пленки, модулю продольной упругости, который, в конечном счете, определяет величину напряжения при заданной деформации. Кроме того, предельное значение амплитуды прямо пропорционально напряжению предельного состояния.

В алюминии при комнатной температуре дислокация в рельефе Пайерлса движется неравномерно, замедляясь перед барьером Пайерлса и ускоряясь после преодоления барьера. В окрестности дислокации реализуется область микропластичности. Внешнее переменное упругое поле изменяет длину свободного пробега дислокации, причем в зависимости от частоты можно регулировать длину свободного пробега. Закрепление дислокации после прохождения некоторого расстояния говорит об упрочнении. При наличии внешнего упругого поля градиент роста кривой упрочнения уменьшается, а значит уменьшается предел текучести. Различаются 3 области, на которых действуют различные механизмы деформации и упрочнения, каждому участку соответствует различная зависимость коэффициента упрочнения от координаты. В каждой стадии дислокационная структура меняется. Наличие резонансной частоты уменьшает коэффициент упрочнения. Упрочнение в данном случае обусловлено рассеянием энергии при движении дислокации в рельефе Пайерлса. Барьер Пайерлса существенно меньше и, соответственно, длина свободного пробега дислокации максимальна для резонансной частоты и уменьшается для нерезонансных частот.

При резонансной частоте уменьшается сопротивление деформированию, укорачивается стадия упрочнения и удлиняется стадия разупрочнения.

ГЛАВА 5. ХАРАКТЕР ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ ФРЕНКЕЛЯ- КОНТОРОВОЙ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ И ВОЗМОЖНОСТЬ УПРАВЛЕНИЯ ЭТИМ ДВИЖЕНИЕМ

5.1. Особенности движения и взаимодействия дислокаций Френкеля- Конторовой в условиях холодной пластической деформации [111,118,119]

Известно, что в процессе холодной пластической деформации происходит деформационное упрочнение, вследствие чего изменяются реологические свойства деформируемых сред. Одной из основных проблем динамики деформируемых сред является установление характера накопления и увеличения плотности дислокаций в результате холодной пластической деформации. Экспериментально установлено, что при деформировании сдвиги на поверхности деформируемых образцов на несколько порядков больше величины межатомного расстояния. Наличие в деформируемой среде перед началом холодной деформации дислокаций не объясняет этого явления. Поэтому принимается, что в процессе холодной деформации образуется большое число новых дислокаций. Существующие модели возникновения и размножения дислокаций в процессе холодной пластической деформации не учитывают взаимодействия дислокаций.

Рассмотрим взаимодействие двух аналогичных дислокаций Френкеля-Конторовой при их совместном движении в одной плоскости скольжения с одинаковыми скоростями. Векторы Бюргерса дислокаций параллельны. Для конкретности берем дислокации одного знака, между которыми, как известно, действуют силы отталкивания. В предлагаемой модели одна из дислокаций заменяется ее упругим полем и рассматривается воздействие этого поля на соседнюю дислокацию. Дислокация, которая заменяется созданным ею полем, находится в начальный момент в начале координат. Изучается воздействие этой дислокации на единицу длины второй дислокации, имеющей координаты x, y . Как показали Френкель и Конторова, уравнение, описывающее движение дислокации есть уравнение синус-Гордона [91]. С учетом поля соседней дислокации оно принимает вид:

$$m \ddot{y}_n = -f_0 \sin\left(\frac{2\pi y_n}{a}\right) + k(y_{n+1} - y_n) - k(y_n - y_{n-1}) + F,$$

где y_n - смещение n -го атома от положения равновесия, m - масса атома, $f = f_0 \sin(\frac{2\pi y_n}{a})$ - периодическая сила, действующая со стороны подложки, F - сила, действующая со стороны соседней дислокации. После элементарных преобразований, измеряя отклонение атома от положения равновесия в угловых единицах, согласно $2\pi \frac{y_n}{a} = \pi + \varphi_n$, получим нелинейное дифференциальное уравнение синус-Гордона в виде:

$$\varphi_{tt} - c_0^2 \varphi_{xx} + \omega^2 \sin \varphi - \frac{2\pi F}{ma} = 0, \quad (5.1)$$

где c_0 - скорость звука, $\omega^2 = \frac{2\pi f_0}{ma}$ - характерная частота.

Как показано в [98], в областях, далеких от ядра, напряжения движущейся дислокации Френкеля-Конторовой аналогичны напряжениям движущейся дислокации Пайерлса. В плоскости скольжения $y = 0$ получим: $(\sigma_{xx} = 0; \sigma_{yy} = 0; \sigma_{zz} = 0);$ (5.2)

$$(\sigma_{xy})_{y=0} = \frac{\mu b c_t^2}{2\pi(x-vt)v^2 \sqrt{1-\frac{v^2}{c_t^2}}} [(2-\frac{v^2}{c_t^2})^2 - 4\sqrt{1-\frac{v^2}{c_t^2}} \sqrt{1-\frac{v^2}{c_l^2}}], \quad (5.3)$$

где μ - модуль сдвига, c_t, c_l - модули скоростей распространения поперечных и продольных звуковых волн, соответственно, σ_{xy} - компонента касательного сдвигового напряжения, b - модуль вектора Бюргерса, v - модуль скорости дислокации. Переходя к силе на единицу длины дислокации, согласно $F_x / L = b\sigma_{xy}$, после элементарных преобразований получим:

$$F_x / L = \frac{\mu b^2 c_t^2 [(2-\frac{v^2}{c_t^2})^2 - 4\sqrt{1-\frac{v^2}{c_t^2}} \sqrt{1-\frac{v^2}{c_l^2}}]}{2\pi(x-vt)v^2 \sqrt{1-\frac{v^2}{c_t^2}}} \quad (5.4)$$

В безразмерных переменных: $x = \frac{v_0}{\omega} \tilde{x}$, $t = \frac{\tilde{t}}{\omega}$, обозначая для удобства $\tilde{x} \rightarrow x$, $\tilde{t} \rightarrow t$,

$\alpha = \frac{\mu b^2 c_t^2}{\omega m a}$ получим уравнение синус Гордона (5.1) в виде (x и t теперь безразмерные переменные):

$$\ddot{\varphi} = -\sin \varphi + \varphi'' + \alpha \frac{[(2 - \frac{v^2}{c_t^2})^2 - 4 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2}} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c_l^2}}]}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c_t^2}} (c_t x - v t) v^2}. \quad (5.5)$$

При расчетах все константы взяты для меди. Нами выбрана медь, так как движение дислокаций в меди (ГЦК структура) начинается при очень низких нагрузках (при 298К скорость составляет $8 \cdot 10^2$ см/с при напряжении $\sigma \approx 10^6$ дн/см²) и может меняться в зависимости от напряжения в широком интервале скоростей.

Рассмотрим, как меняется взаимодействие между дислокациями в зависимости от скорости их движения. Как известно, при возрастании скорости область сдвиговых напряжений сжимается в направлении скольжения. Нами моделированы контуры постоянных напряжений для движущейся с различными скоростями дислокации.

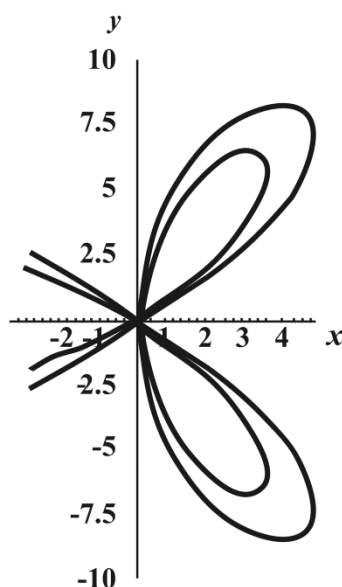


Рис.5.1.Контуры постоянных напряжений движущейся с разными скоростями дислокации.

Как видно из рисунка 5.1, уже при относительно малом увеличении скорости (от 10^{-2} см/с до 10^{-1} см/с) область постоянных сдвиговых напряжений сжимается в

направлении x . Этот эффект должен привести к тому, что при увеличении скорости взаимодействие между дислокациями уменьшится.

Проведем численный эксперимент для некоторого интервала возможных скоростей. Используя (5.5) и выбирая начальные условия в новых переменных для относительно малых скоростей ($\sim 10^{-3}$ см/с) получаем:

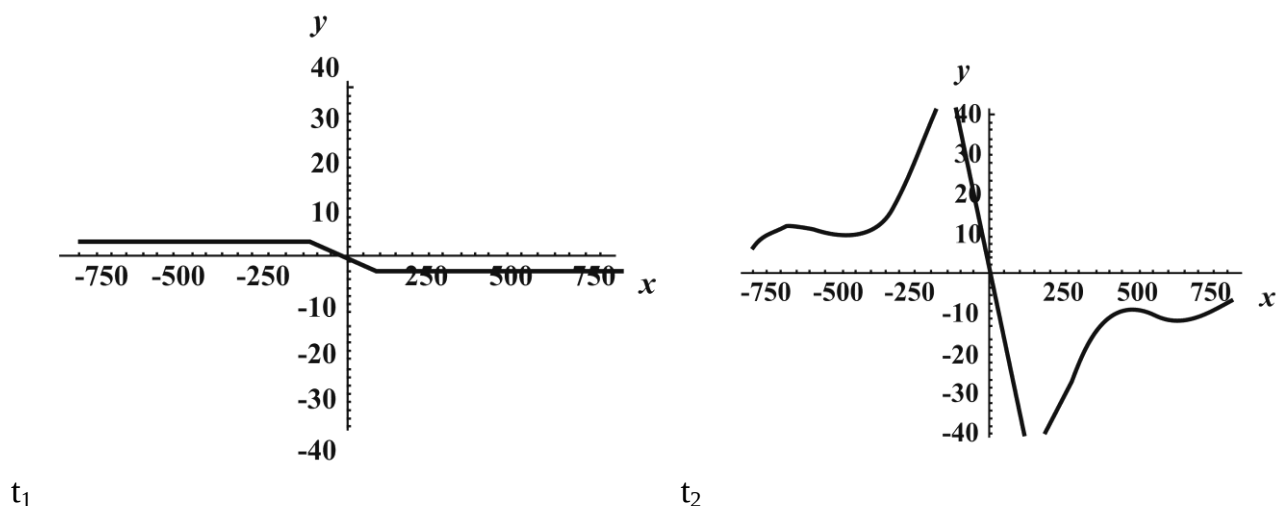


Рис.5.2 .Поле смещений дислокации, находящейся под воздействием соседней дислокации, для последовательных моментов времени (малые скорости)

На рисунке 5.2 показано, как изменяется поле смещений дислокации, находящейся под воздействием соседней дислокации, с течением времени. Как видно из рисунка, под действием поля соседней дислокации поле данной дислокации искажается уже в течение небольшого интервала времени, то есть взаимодействие между дислокациями существенно.

Дальнейший численный эксперимент показал что при увеличении скорости взаимодействие ослабляется.

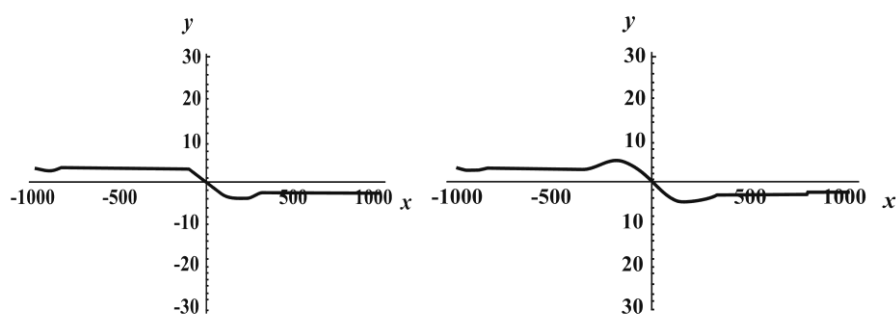


Рис.5.3 . Поле смещений дислокации, находящейся под воздействием соседней дислокации, для тех же моментов времени (большие скорости)

На рисунке 5.3 представлено поле смещений дислокации, находящейся в поле соседней дислокации при скорости их движения $\sim 10^5$ см/с. Как видно из рисунка, через тот же интервал времени, что и представленный на рисунке 5.2, поле смещений данной дислокации почти не искажается.

Как показал численный эксперимент, в пределе, когда скорость дислокаций стремится к скорости звука, взаимодействие между ними стремится к нулю.

Нами исследована также область скоростей $2 \cdot 10^5$ см/с - $2.45 \cdot 10^5$ см/с. Как показал численный эксперимент в этом интервале скоростей область сдвиговых напряжений сжимается по направлению к оси x при возрастании скорости и, начиная с некоторого значения, меняет знак: Рис.5.4.

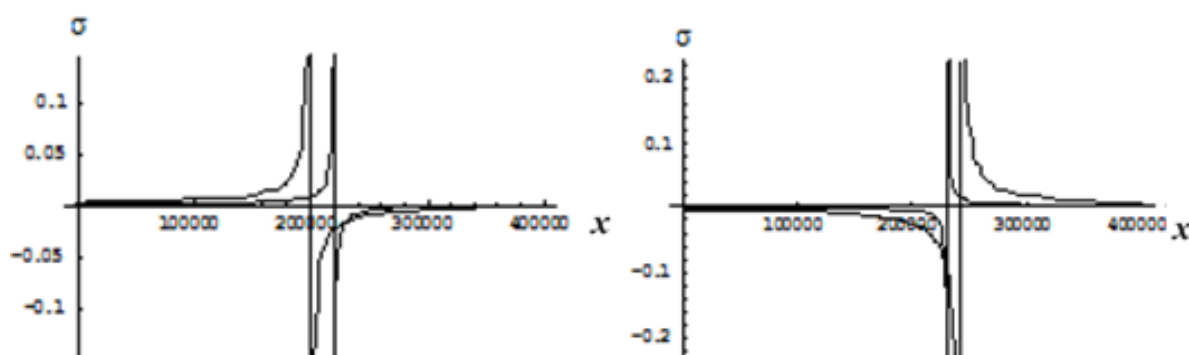


Рис.5.4. Зависимости сдвиговых напряжений от координаты ($2 \cdot 10^5$ см/с - $2.45 \cdot 10^5$ см/с).

Этому соответствует график решения уравнения (5.5) в этом интервале скоростей. Как видно из рисунка 5.5, поле смещений дислокации, при возрастании скорости также сначала сжимается по направлению к оси x , а затем меняет знак.

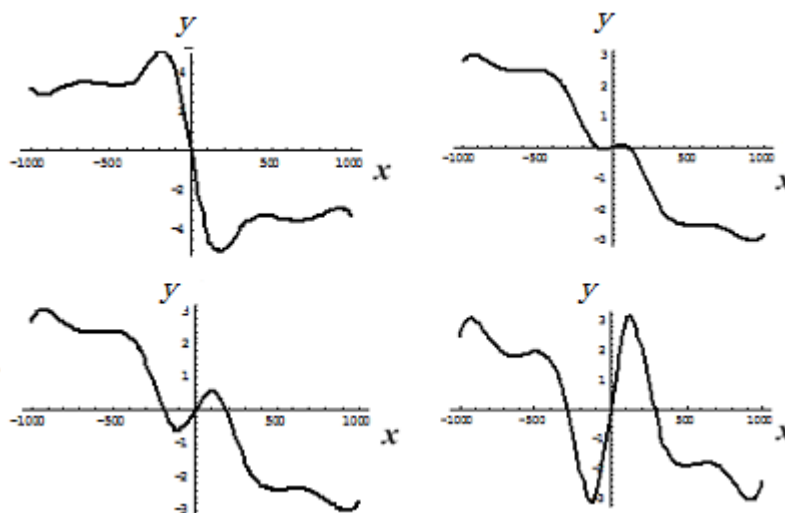


Рис.5.5. Поле смещений дислокации в исследованной области скоростей.

Представляет интерес рассмотреть влияние периодичности решетки реальных кристаллов на характер и скорость движения дислокации. Впервые задача о движении дислокаций в поле периодического потенциала была рассмотрена Пайерлсом. Напряжением Пайерлса называют напряжение, которое требуется для преодоления дислокацией потенциального барьера решетки кристалла. Нами был проведен численный эксперимент с использованием невозмущенного уравнения синус Гордона с различными значениями потенциала Пайерлса.

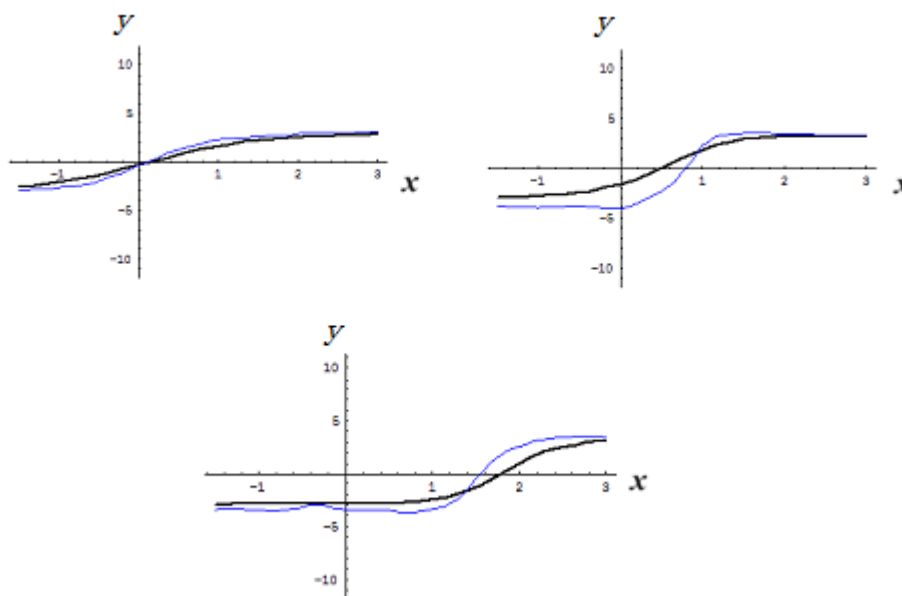


Рис.5.6. Эволюция распространения дислокации в кристаллах с низким барьером Пайерлса (жирная линия) и высоким барьерами Пайерлса .

На рисунке 5.6 показана эволюция распространения дислокации в кристаллах с низким и высоким барьерами Пайерлса ($10^{-4}\mu - 10^2\mu$), μ – модуль сдвига [98] для последовательных моментов времени.

При низких барьерах движение поступательное. При увеличении высоты барьера характер движения изменяется. В кристаллах с высоким барьером дислокация совершает колебательное движение в направлении скольжения. Происходит искажение хвостовых областей дислокаций. Ширина дислокации периодически меняется, оставаясь все время меньше, чем в кристаллах с низким барьером. При учете силы трения для этого случая движение дислокаций замедляется, амплитуда колебаний в направлении скольжения значительно уменьшается.

5.2. Анализ и моделирование процесса движения дислокаций в монокристаллах алюминия [120,121,122]

Многие элементы современной техники работают в условиях умеренного (до 200K) и глубокого (до 4K) охлаждения. Это элементы установок сжижения и разделения газов, системы космических аппаратов и т.д. Установлено, что с понижением температуры большинство материалов становятся более прочными. При 77 K (температура кипения жидкого азота) предел прочности меди в два раза, а алюминия – в шесть раз больше, чем при комнатной температуре. При низких температурах, особенно под нагрузкой, происходят внутренние структурные превращения, в результате чего возрастает опасность внезапного разрушения изделий. Переход металлов в хрупкое состояние при низких температурах связан с изменением характеристик пластичности. Исследования физической природы явления показывает, что переход в хрупкое состояние чистых монокристаллических образцов зависит от температуры, скорости деформирования, плотности дефектов с позиций теории дислокаций и др.

Разработанные физические модели не позволяют количественно оценить влияние многочисленных факторов. Поэтому исследование характера изменения параметров прочности и пластичности этих металлов в зависимости от температуры и скорости деформирования при температурах от 293K до температуры кипения жидкого гелия (4,2K) представляет собой большой научный интерес. Особенно актуальным становится выяснение физической природы аномального уменьшения начальной величины напряжения пластического течения в алюминии при низких температурах.

Скорость дислокаций в кристаллическом рельефе Пайерлса определяется временем флуктуационного зарождения перегибов на дислокации (солитонов) и их дальнейшего расширения [126]. При высоких температурах зарождение перегибов осуществляется путем термической активации. При низких температурах движение дислокаций приобретает квантовый характер и осуществляется туннелированием через барьеры Пайерлса. В переходной области участвуют оба механизма: туннелирование с предварительной активацией. В [27] определен температурный интервал проявления квантовых эффектов. В [123] показано, что диссипативные процессы уменьшают вероятность квантового туннелирования. Доказано также, что при достаточно высоких температурах квантовое туннелирование несущественно, и барьер преодолевается активационно. При низких температурах более вероятно туннелирование через барьер.

В [122] рассчитана температурная зависимость вероятности образования солитонов в области перехода от термически активированного к туннельному механизму их зарождения.

В настоящей главе нами исследовано движение дислокации Френкеля—Конторовой в монокристаллах алюминия при низких температурах. С использованием уравнения синус Гордона осуществлено математическое моделирование сравнительного движения дислокаций в кристаллах с учетом барьера Пайерлса и без его учета. Показано, что при учете барьера Пайерлса в алюминии дислокация движется в направлении скольжения посредством туннелирования перегибов. Произведена количественная оценка возможности такого эффекта.

Одним из первых приложений модели Френкеля—Конторовой (ФК) была теория дислокаций в металлах [124]. Как известно, дислокации ответственны за большинство механических свойств твердых тел. Модель ФК была первой моделью, которая позволила получить простые аналитические зависимости, позволяющие моделировать процесс движения дислокаций. При движении дислокации потенциальная энергия кристалла периодически меняется. В идеальном бездефектном кристалле действуют только силы, обусловленные стационарным периодическим потенциалом Пайерлса. Эти силы можно рассматривать как минимальную внешнюю нагрузку [98]. Пайерлс и Набарро [98] предсказали вид периодического потенциала смещений, действующего на дислокацию. Из экспериментальных данных следует, что энергетический барьер Пайерлса действительно существует, и его величина колеблется от $10^{-4} \mu$ (ковалентные кристаллы) до $10^{-2} \mu$ (плотноупакованные металлы), μ – модуль сдвига [98]. Процесс термического перехода дислокации из одной долины Пайерлса в другую начинается с переброски в соседнюю долину короткого участка дислокации [124]. В [106] было экспериментально показано, что в алюминии при $t \leq 50\text{K}$ приложенное напряжение вызывает движение только одиночных перегибов, а термически активированное образование пар перегибов происходит при более высоких температурах. Известно также [126], что перегибы являются переносчиками массы, т.к. они начинают скользить при силе, намного меньшей, чем требуется для движения дислокации как целой. Низкотемпературное движение дислокаций в кристаллах может быть связано с туннелированием конечной части дислокации [126]. В такого рода задачах линейную дислокацию можно представить как упругую струну, лежащую первоначально в одном

из локальных минимумов потенциала. Рельеф этого потенциала представляет собой последовательность локальных минимумов, каждый из которых находится ниже другого на величину, зависящую от приложенного к кристаллу напряжения. Движение дислокации сводится к туннелированию в соседний минимум определенного отрезка дислокации с последующим подтягиванием туда оставшейся ее части.

Постановка задачи

Дислокации ФК в монокристаллах алюминия с учетом потенциала Пайерлса можно считать топологическими солитонами [125]. Известно, что при низких температурах в алюминии имеет место скольжение дислокаций при аномально малых напряжениях. Попытки объяснить это явление классически приводят к несогласованным результатам. Возникает необходимость трактовать указанный эффект на основе квантового подхода. Моделирование процесса движения с использованием реальных констант дает возможность исследовать характер движения дислокаций в потенциале Пайерлса, выявить его коренное отличие от надбарьерного движения дислокаций.

Результаты

Для расчетов эффекта туннелирования квантовых систем удобно использовать квазиклассическое представление волновой функции в виде

$$\Psi \sim \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right), \quad (5.6)$$

где S – классическое действие системы. Для туннельного эффекта существует мнимая часть S , определяющая затухание волновой функции в классически недоступной области.

Как известно, движение дислокаций в кристаллах с высокими барьерами Пайерлса происходит путем образования перегибов. Это явление при высоких температурах происходит за счет термических флуктуаций. При достаточно низких температурах термические флуктуации сменяются квантовыми, вероятность которых не зависит от температуры [126]. Такое явление носит характер квантового подбарьерного проникновения (туннелирования). Вероятность туннельного перехода дается известной формулой Фейнмана

$$\left| \sum \exp\left\{\frac{iS}{\hbar}\right\} \right|^2. \quad (5.7)$$

В чистых металлах при низких температурах основными препятствиями для движения дислокаций являются барьеры Пайерлса, а их преодоление происходит путем

зарождения на дислокациях перегибов. Начальная стадия деформирования обеспечивается перемещениями на сравнительно малые расстояния большого числа мелкомасштабных фрагментов дислокационных линий – перегибов.

Вычислим напряжение Пайерлса для дислокаций в алюминии $W_{\Pi} = \frac{\mu b^3}{300d}$ [98], где μ – модуль сдвига, d – межплоскостное расстояние, $\vec{b}$ – вектор Бюргерса. Расчеты дают $W_{\Pi} \sim 10^{-15}$ эрг, что согласуется с данными, полученными в работе [106]. На основании большого числа исследований кинетики дефектов кристаллической структуры было получено, что в образцах алюминия заметной подвижностью могут обладать только перегибы дислокации. Перегибы адекватны солитонам, взаимодействующим с периодическим потенциалом решетки. Согласно этой же работе [106], эффективная масса солитонов (перегибов) $m_s = (0.2-0.5)m_p$, где m_p – масса протона. Будем считать $m_s = 0.3m_p$. Тогда $m_s \approx 4.8 \times 10^{-25}$ г.

Подсчитаем кинетическую энергию перегибов (солитонов) в алюминии. Используя параметры из [98], получим $E_{ks} \approx 0.24 \times 10^{-22}$ эрг.

Как известно из квантовой механики [127], туннельный эффект будет иметь заметное значение, когда

$$\frac{2}{h} \sqrt{2m_s(W_n - E_{ks})}l \approx 1, \quad (5.8)$$

где W_n – высота барьера Пайерлса, E_{ks} – кинетическая энергия солитона, l – ширина барьера Пайерлса. Расчеты дают, что для солитонов в алюминии $\frac{2}{h} \sqrt{2m_s(W_n - E_{ks})}l \approx 0.73$, что позволяет предположить возможность туннелирования перегибов.

Таким образом, туннельный эффект возможен не только в квантовых системах, состоящих из одной частицы. Низкотемпературное движение дислокаций в кристаллах может быть связано с туннелированием конечной части дислокации, состоящей из многих частиц. Квантовые эффекты в кристаллах наблюдаются тогда, когда волновые функции атомов, находящихся в соседних узлах, перекрываются. Вероятность квантового туннелирования атома в соседний узел решетки характеризуется безразмерным параметром де Бура Δ [129]:

$$\Delta \sim \frac{h}{a}(mu)^{1/2}, \quad (5.9)$$

где a – межатомное расстояние, m – масса атомов, u – энергия взаимодействия соседних атомов. Для большинства кристаллов параметр Δ очень мал. В квантовых кристаллах $\Delta \sim 1$, и эффект делокализации частиц существенен. При этом даже нулевые колебания сильно ангармоничны. Существуют кристаллы, в которых условие малости амплитуды нулевых колебаний может нарушаться для некоторых видов колебаний. Например, это относится к примесным атомам водорода в решетке тяжелых металлов [129], при этом величина амплитуды нулевых колебаний связана с малостью массы примесных атомов. Аналогично, из-за малости массы солитонов (перегибов) и их слабого взаимодействия с атомами матрицы солитон может делокализоваться в кристалле, в то время как сами атомы матрицы ведут себя классическим образом.

Оценим Δ для перегибов в алюминии, используя формулу (5.9). Согласно [98], для перегибов краевой дислокации

$$u = \frac{\mu b^2 a^2 (1-2\nu)}{8\pi L (1-\nu)}, \quad (5.10)$$

где ν – коэффициент Пуассона, L – расстояние между перегибами. Согласно нашим расчетам, в алюминии $u \sim 10^{-14}$ эрг и $\Delta \approx 0.4$ (для сравнения, в квантовых кристаллах для He^3 $\Delta \approx 0.49$, для неона $\Delta \approx 0.07$. Во всех чистых металлах параметр Δ ничтожно мал) [129]. Таким образом, в алюминии существует возможность квантового туннелирования перегибов. Известно, что энергетический барьер Пайерлса уменьшается при росте температуры (хотя точный вид температурной зависимости не установлен) и с увеличением ширины дислокации. Рассчитаем ширину дислокации в алюминии при принятых условиях. Как известно, алюминий имеет ГЦК структуру. Согласно [98], ширина дислокаций определяется формулой

$$\omega = \pi d \left(\frac{E}{\mu(1-\nu^2)} \right)^{1/2}, \quad (5.11)$$

где E – модуль Юнга. Расчеты дают для направления $[111]$ значение ширины перегиба $\omega = 12.8 \times 10^{-8}$ см, для направления $[220]$ – $\omega = 7.8 \times 10^{-8}$ см.

Таким образом, в рассматриваемом случае имеем узкий перегиб, который при перемещении вдоль линии дислокации преодолевает барьер Пайерлса.

Твердые тела обычно описываются сложными моделями с большим числом степеней свободы. Однако относительно простая модель дислокаций ФК стала универсальным инструментом нелинейной физики [130]. Для континуальной модели ФК была развита математическая теория, которая связала модель ФК с математической

теорией солитонов. В рамках этой теории дислокация ФК является топологическим солитоном. В континуальном приближении модель ФК сводится к точно интегрируемому синус уравнению Гордона. Синус–уравнение Гордона нашло свое применение при изучении дислокаций, а также перегибов и бризеров. Оно также применяется в теории слабой сверхпроводимости при описании туннельного сверхпроводящего тока в джозефсоновских контактах [91]. Кроме того, при определенных значениях параметров оно переходит в уравнение Клейна-Гордона, которое является квантовым уравнением. Поэтому мы предположили, что явление туннелирования перегибов можно описать синус уравнением Гордона.

Синус уравнение Гордона имеет следующий вид [91]:

$$\ddot{\phi}_n = -\frac{2\pi f_0}{ma} \sin \phi_n + \frac{ka^2}{m} \phi_n'' \quad (5.12)$$

где ϕ_n – смещение n -го атома от положения равновесия в угловых единицах, m – масса атома, $f_0 = \frac{m(v_0)^2 a}{2\pi(l_0)^2}$, где l_0 – параметр, который увеличивается при увеличении жесткости пружины и уменьшении силы со стороны подложки, то есть уменьшается с увеличением барьера Пайерлса, v_0 – модуль скорости звука.

Поскольку $W_{\Pi} = f_0 \frac{2\pi b}{300}$ [98], то из (5.12) следует, что синус уравнение Гордона принимает вид

$$\ddot{\phi}_n \frac{1}{\omega^2} = -\sin \phi_n + \frac{v_0^2}{\omega^2} \phi_n'', \quad (5.13)$$

где $\omega^2 = \frac{300W_{\Pi}}{ma b}$ – характерная частота, $v_0^2 = \frac{ka^2}{m}$, W_{Π} – энергия Пайерлса.

Переходя к безразмерным переменным: $x = (v_0 / \omega) \tilde{x}$, $t = \tilde{t} / \omega$, получим

$$\ddot{\phi}_n = -\sin \phi_n + \phi_n''. \quad (5.14)$$

Как указано в [98], энергетический барьер периодических смещений Пайерлса для перегибов должен быть меньше, чем барьер Пайерлса для дислокаций.

При расчетах использовались следующие константы (алюминий): $v = 10^{-1}$ см/с – модуль скорости дислокации $v_0 = 6 \times 10^5$ см/с, $b = 2.57 \times 10^{-8}$ см, $m = 4.5 \times 10^{-23}$ г – масса атомов алюминия.

Скорость перегиба находилась следующим образом. С помощью уравнения синус Гордона находилось поле смещений дислокации. Затем – поле деформаций, поле скоростей деформаций. Используя формулу [98]:

$$\dot{\varepsilon} = \rho b v,$$

(ρ - общая длина дислокаций в единице объема, b - модуль вектора Бюргерса, $\dot{\varepsilon}$ - скорость деформации, v - скорость дислокации) находим скорость дислокации. Используя физические константы для алюминия, зная скорость дислокации, можно найти скорость перегиба [98].

Представим сравнительный численный эксперимент при надбарьерном движении полной дислокации и туннелировании посредством перегибов в алюминии.

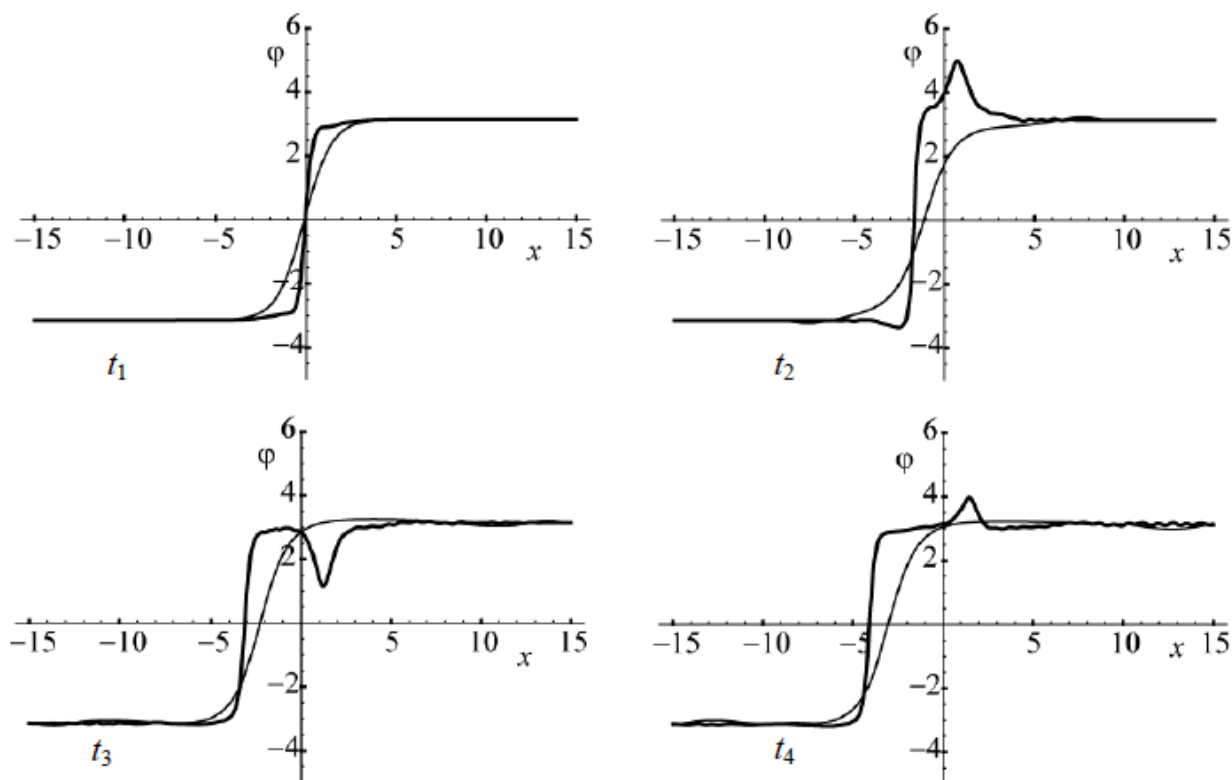


Рис.5.7. Поле смещений двух дислокаций для разных моментов времени

Как видно из Рис. 5.7, одна из дислокаций совершает туннельный переход в направлении скольжения с высоким барьером Пайерлса (жирная линия) ($W_{\text{П}} \sim 4,14 \times 10^{-15}$ эрг [100]), другая, для сравнения, совершает надбарьерное движение. Дислокация, совершающая туннельный переход, из-за отсутствия трения опережает вторую дислокацию ($t_1 < t_2 < t_3 < t_4$).

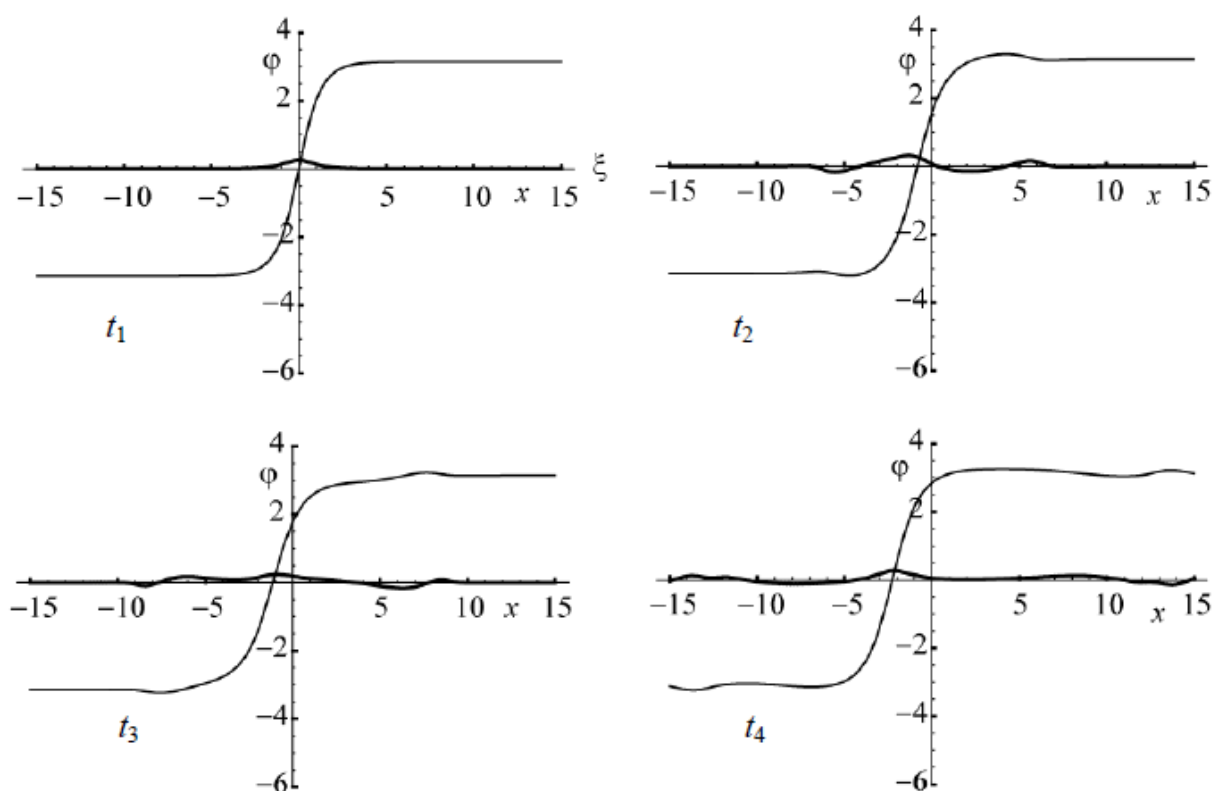


Рис.5.8. Поле смещений дислокации, совершающей надбарьерное движение, и распределение скоростей по координате той же дислокации для разных моментов времени (жирная линия).

Из Рис. 5.8 видно, что скорость дислокации, совершающей надбарьерное движение, в процессе скольжения знака не меняет, оставаясь также постоянной по модулю. На Рис. 5.9 представлено поле смещений дислокации, движущейся посредством туннелирования перегибов, и распределение скоростей по координате той же дислокации для последовательных моментов времени.

Из Рис. 5.9 видно, что скорость отдельных фрагментов дислокации (перегибов) при туннелировании различна и меняет знак в процессе скольжения, дислокация движется скачкообразно, совершает колебания в направлении скольжения. Полученный результат находится в согласии с результатами работы [131], где показано, что при низких температурах в меди и алюминии деформация приобретает скачкообразный характер.

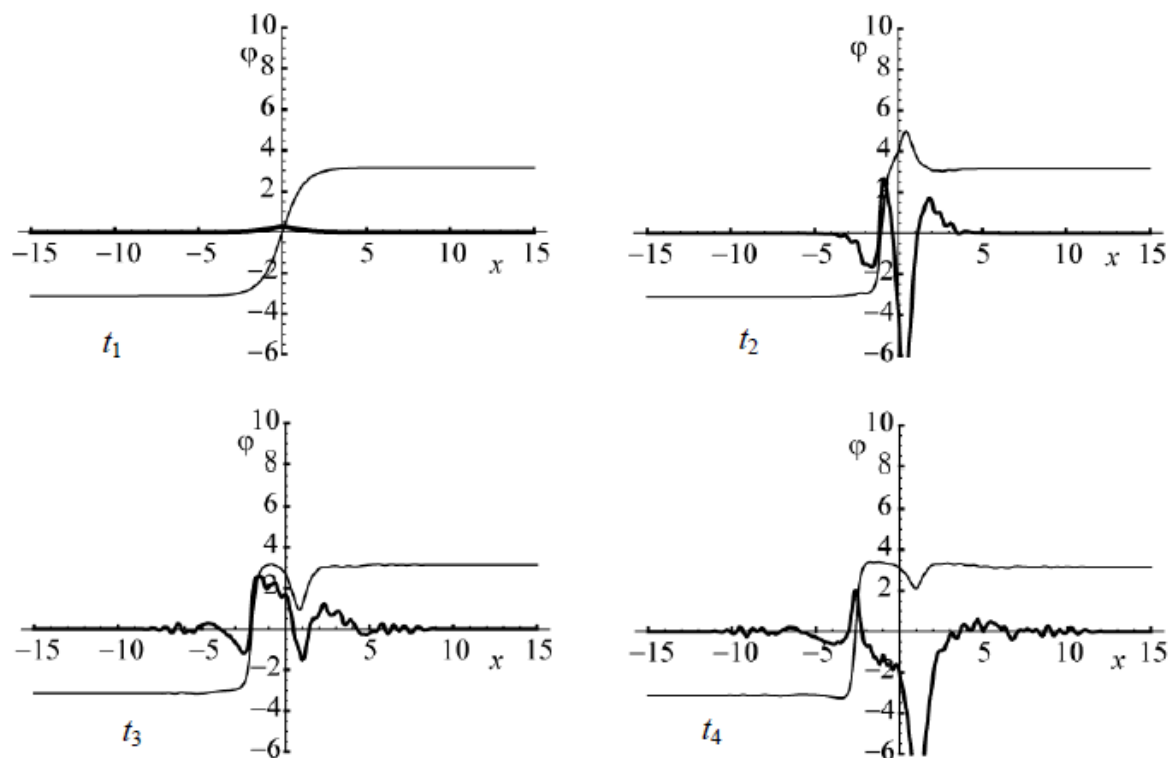


Рис.5.9. Поле смещений дислокации, движущейся посредством туннелирования перегибов, и распределение скоростей по координате той же дислокации (жирная линия) для последовательных моментов времени.

Экспериментально наблюдаемая низкотемпературная скачкообразная деформация в алюминии описана также в [132,133].

Предварительно покажем, что на макроуровне туннелированию соответствует разупрочнение кристалла. Используем уравнение синус-Гордона (5.14) и зависимость напряжения от деформации, скорости деформации и температуры при разупрочнении, полученную в [128]:

$$\sigma = a_0 \varepsilon^{a_1} \zeta^{a_2} e^{-a_3 \theta} \quad (5.15)$$

$$a_0 = 3.6 \times 10^6 \text{ МПа}, a_1 = 0.255, a_2 = 0.05, a_3 = -0.01, (a_0, a_1, a_2, a_3$$

- константы материала, ζ - скорость деформации, θ - безразмерная температура по Цельсию.

Здесь a_1 характеризует материал, a_2 зависит от характера приложения внешней нагрузки, поэтому, создавая разные условия скорости деформации, можем

регулировать a_2 в пределах до нескольких порядков, что соответствует деформированию от квазистатического режима деформирования, до импульсно-динамического.

Сначала в уравнении синус Гордона берем высокий барьер Пайерлса (при котором наблюдается туннелирование), комнатные температуры, $a_2 = 0.05$ в уравнении (5.15). Получим зависимость $\sigma(\varepsilon)$: Рис. 5.10. Затем берем барьер Пайерлса, при котором не наблюдается туннелирование, $a_2 = 0.05$ и низкие температуры и вновь получим зависимость $\sigma(\varepsilon)$: Рис.5.11.

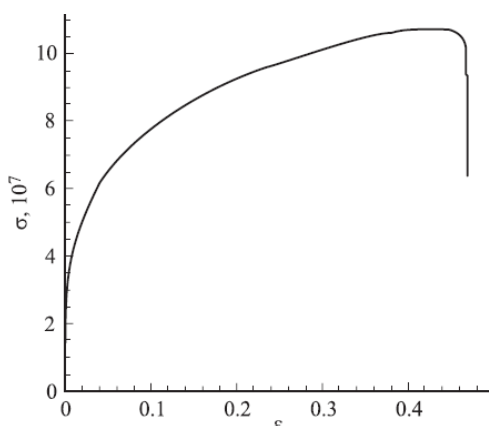


Рис.5.10. $\sigma(\varepsilon)$: высокий барьер, комнатные температуры.

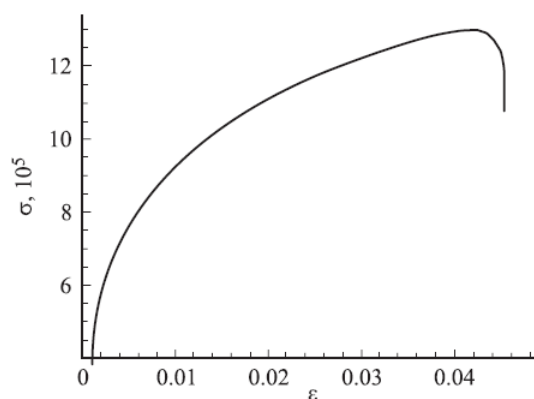


Рис.5.11. $\sigma(\varepsilon)$: низкий барьер, низкие температуры.

Как следует из рисунков 5.10, 5.11, ход кривых аналогичен. Можно заключить, что действие высокого барьера Пайерлса аналогично действию низких температур или иначе, что находится в согласии с [98], при понижении температуры барьер Пайерлса уменьшается. Кроме того, можем заключить, что при определенном значении скорости деформации имеет место резкое разупрочнение ($a_2 = 0.05$).

Для $a_2 = 10$, комнатных температур и наличия внешнего упругого поля резонансной частоты ($\sim 10^{12}$ Гц) и близлежащих частот ($\sim 10^{13}$ Гц, $\sim 10^{11}$ Гц) численный эксперимент дает: Рис.5.12.

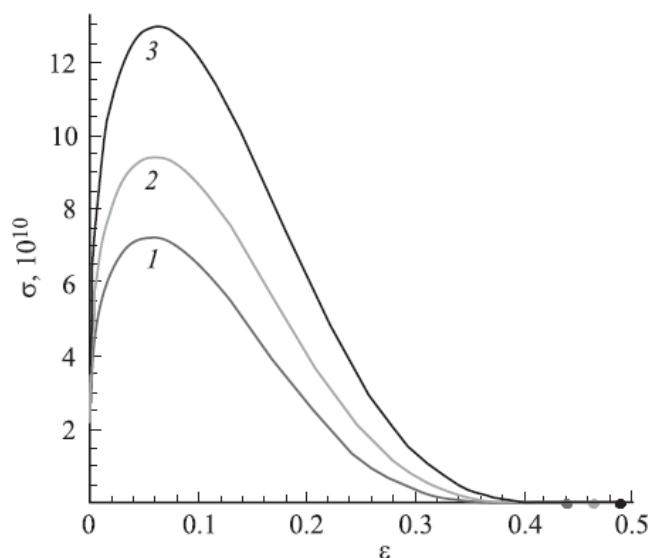


Рис. 5.12. Зависимость напряжения от деформации для $a_2 = 10$ в присутствии высокочастотного звукового поля. 1: резонансная частота ($\sim 10^{12}$ Гц), 2: ($\sim 10^{13}$ Гц), 3: ($\sim 10^{11}$ Гц).

Как видно из Рис.5.12, при резонансной частоте уменьшается сопротивление деформированию, укорачивается стадия упрочнения и удлиняется стадия разупрочнения.

Таким образом, изучение совместного влияния температуры и скорости деформации на вид процесса деформации показало, что даже при низкой температуре, при $a_2 = 0.05$ может происходить разупрочнение, однако при $a_2 = 10$ упрочнение и разупрочнение наблюдаются при высоких температурах, при этом область упрочнения сжимается, а область разупрочнения расширяется, по сравнению с областями при $a_2 = 0.05$.

Эффект туннелирования подтверждается еще одним компьютерным экспериментом. Численно решая синус уравнение Гордона с высоким барьером Пайерлса и используя (5.15), находим зависимости истинных значений напряжений от деформации в алюминии при гелиевых температурах в переменных Эйлера. Рис.5.13а.

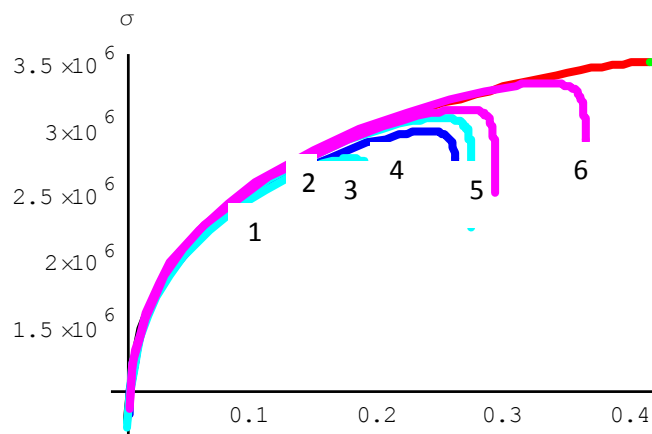


Рис.5.13а.Зависимость напряжения от деформации в переменных Эйлера.

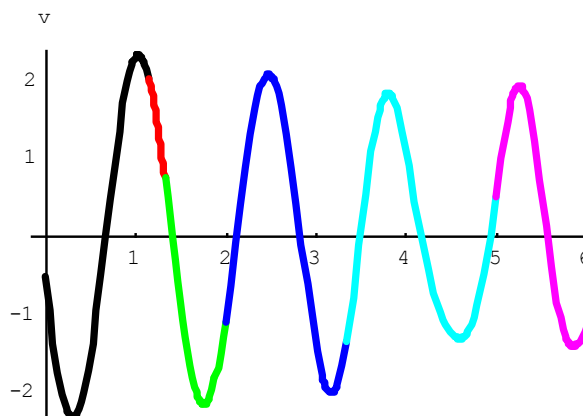


Рис.5.13б. Зависимость скорости дислокации от времени для тех же интервалов времени.

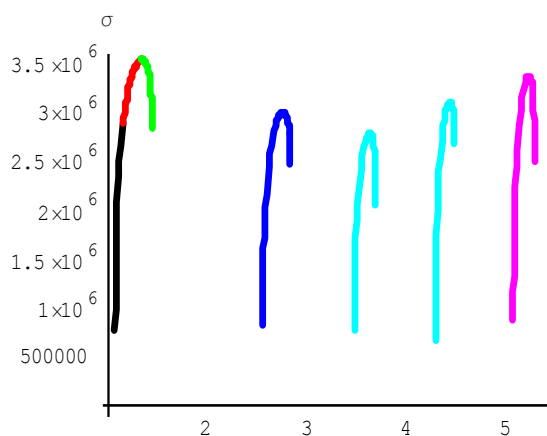


Рис. 5.13с. Зависимость напряжения от времени в окрестности дислокации для тех же интервалов времени.

Как известно, условное значение предела прочности σ_b для алюминия $8 \cdot 10^8$ дн/см². Получим выражение для истинного (реального) значения предела прочности алюминия.

$$\sigma_b = \frac{F_{\max}}{S_0},$$

где $F_{\max}$ - максимальная сила при деформации растяжения, S_0 - исходная площадь поперечного сечения образца. Истинное значение предела прочности $\sigma_{real} = \frac{F_{\max}}{S}$, где S - текущая площадь поперечного сечения.

Из условия постоянства объема $S_0 l_0 = Sl$, где $l = l_0 + \Delta l$, получим

$$\sigma_{real} = \frac{F_{\max}}{S_0 / (1 + \varepsilon)} = \sigma_b (1 + \varepsilon), \text{ где } \varepsilon - \text{относительная деформация.}$$

Истинное напряжение σ_{real} это напряжение, отнесенное к текущей площади поперечного сечения образца.

Тогда истинное значение предела прочности: $8 \cdot 10^8 (1 + \varepsilon)$, где ε - значения относительной деформации (на Рис.5.13 в точках начала спуска). Если значения напряжения σ_n , при которых кривая начинает идти вниз (Рис.5.13а), $\sigma_n < 8 \cdot 10^8 (1 + \varepsilon)$, то происходит эффект туннелирования, если в какой-либо из точек начала разупрочнения эти значения больше истинного значения предела прочности, то происходит локализация деформации и разрушение образца. Таблица 1

	ε	σ	$8 \cdot 10^8 (1 + \varepsilon)$
1.	0,185	$2,73 \cdot 10^6$	$9,48 \cdot 10^8$
2.	0,254	$2,94 \cdot 10^6$	$10,032 \cdot 10^8$
3.	0,267	$3,06 \cdot 10^6$	$10,136 \cdot 10^8$
4.	0,288	$3,1 \cdot 10^6$	$10,304 \cdot 10^8$
5.	0,358	$3,26 \cdot 10^6$	$10,864 \cdot 10^8$
6.	0,465	$3,42 \cdot 10^6$	$11,72 \cdot 10^8$

Таблица 1. Истинные значения напряжений и деформаций, при которых происходит резкое разупрочнение, и истинные значения напряжения, соответствующие пределу прочности алюминия.

Из данных численного эксперимента (Рис.5.13а) нами рассчитаны истинные значения напряжений и деформаций, при которых происходит резкое разупрочнение, и проведено сравнение полученных значений напряжений в этих точках с истинным значением, соответствующим пределу прочности алюминия.

Расчеты показывают, что в нашем численном эксперименте в точках резкого разупрочнения (точки (1-6) на Рис.5.13а) разрыва (разрушения) кристалла не происходит, т.к. значения напряжений в этих точках меньше истинного значения предела прочности.

В [128] эффект трактуется следующим образом: при увеличении деформации динамические процессы разупрочнения ускоряются настолько, что снимают упрочнение, достигнутое на предыдущих этапах деформации.

В [104] получена аналогичная зависимость напряжения от деформации при растяжении образцов алюминия с различными величинами зерен ($0,27 \mu m$ - $10 \mu m$) при 293К. Резкое уменьшение напряжения при почти постоянной деформации при размере зерна $<1 \mu m$ здесь соответствует локализации деформации и разрушению образцов. Эффект, в отличие от нашего случая, проявляется здесь практически на пределе текучести. В нашем случае рассмотрение происходит при гелиевых температурах и требует другой трактовки.

Мы предполагаем, что резкое уменьшение напряжения при почти постоянной деформации, имеющее периодический характер, предположительно может быть объяснено туннелированием перегибов через потенциалы Пайерлса

Имеют место два эквивалентных подхода при рассмотрении движения деформируемого материала: подход Эйлера и подход Лагранжа. Когда внимание концентрируют на данной точке пространства, в которую приходят разные частицы деформируемой среды, это – подход Эйлера. Движение с точки зрения Эйлера считается известным, если скорость, ускорение, температура и т.д. заданы как функции координат данной точки пространства и времени – переменные Эйлера.

Когда внимание концентрируют на конкретной частице среды и изучают историю ее деформирования и движения – это подход Лагранжа. Соответствующие координаты этой точки и время – переменные Лагранжа. Выбор вида переменных делают на основе характера задачи, которую предстоит решать. Точка зрения

Лагранжа лежит в основе физических законов, т.к. они связаны с движением индивидуальных материальных частиц.

Задача решалась нами в Эйлеровом рассмотрении по следующим соображениям. При Эйлеровом подходе мы изучаем характеристики изменения поля движущейся дислокации в данной точке пространства с течением времени. При Лагранжевом рассмотрении исследуется эволюция движения данной конкретной точки поля дислокации в пространстве.

С этой точки зрения, представленный на Рис.5.13а результат может быть объяснен следующим образом. При движении дислокации вокруг нее создается поле напряжений, которое отражает характер эволюции упругих свойств среды (5.13с). Из численного эксперимента следует (Рис.5.13b), что скорость движения дислокации относительно среды носит периодический характер. В интервале убывания скорости дислокации происходит упрочнение, уменьшение скорости дислокации обусловлено увеличением сопротивления среды со стороны барьера Пайерлса. Следствием этого является возрастание напряжения. Когда дислокация, преодолев потенциал Пайерлса, попадает в ложбину потенциального рельефа, сопротивление движению дислокации резко уменьшается, вследствие чего происходит релаксация напряжения (разупрочнение) и изменение знака скорости дислокации на противоположный. Таким образом, при преодолении барьера Пайерлса дислокация движется неравномерно, замедляясь перед барьером и ускоряясь после преодоления барьера (Рис.5.13b), т.е. периодически происходят процессы микроупрочнения и микроразупрочнения. Вследствие этого, характер изменения напряжения в окрестности исследуемой области (вблизи дислокации) отражает вышеуказанный характер движения дислокации, обусловленный дискретностью среды: разупрочнение имеет периодический характер, что коррелирует с осциллирующей зависимостью деформации от координаты (Рис.4.1) в данном кристалле. Рост кривой зависимости $\sigma(\epsilon)$ имеет нелинейный характер.

Из численного эксперимента (Рис.5.13а, 5.13b, 5.13с) следует, что процесс туннелирования, как и следовало ожидать, является нестационарным.

В работах [132, 133] дана интерпретация низкотемпературных аномалий движения дислокаций с динамическими перегибами в чистых металлах. Показано, что отжиг образца, приводящий к исчезновению перегибов, вызывает подавление указанных

особенностей. Таким образом, эти аномалии тесно связаны с наличием перегибов на дислокации и могут быть объяснены туннелированием перегибов при низких температурах.

5.3. Удаление дислокаций несоответствия из граничных областей гетероперехода [134,135]

Тонконкопленочные гетероструктуры широко используются в нанoeлектронике для изготовления полупроводниковых лазеров, оптических модуляторов, СВЧ транзисторов, квантовых компьютеров и т.д. Качество низкоразмерных слоев и резкость гетерограниц оказывают сильное влияние на электрофизические свойства гетероструктуры. Жесткие требования предъявляются к размеру, форме и однородности гетероструктуры. Однако при получении гетероструктур возникают внутренние напряжения. Релаксация внутренних напряжений осуществляется путем пластической деформации, в результате которой образуются дислокации несоответствия, лежащие в плоскости границы раздела. Наличие дислокаций несоответствия ухудшает функциональные свойства гетероструктуры [136]. Возникает проблема избавления от дислокаций на границе гетероперехода.

Основой гетероструктуры является гетеропереход - контакт двух различных по химическому составу полупроводников, при котором кристаллическая решетка одного материала без нарушения периодичности переходит в решетку другого материала. Гетеропереходы получают различными методами. Например, при жидкофазной эпитаксии происходит осаждение эпитаксиального слоя из раствора или расплава, находящегося в контакте с поверхностью подложки. Наиболее эффективным является метод молекулярно-лучевой эпитаксии. Этот метод позволяет контролировать структуру и качество поверхности подложки, регулировать скорость роста кристалла. С помощью этого метода можно выращивать сверхтонкие слои от 1 нм до 100 нм.

В процессе выращивания в гетеросистемах возникают внутренние напряжения. Их возникновение обусловлено следующими причинами: 1) различием коэффициента термического расширения контактирующих материалов, приводящих к появлению термических напряжений; 2) несоответствием кристаллических решеток пленки и подложки, в результате которого возникают напряжения несоответствия; 3) наличием в пленках дефектов структуры. Релаксация внутренних напряжений осуществляется

путем пластической деформации, в результате которой образуются дислокации несоответствия, лежащие в плоскости границы раздела. Гетероэпитаксиальный рост сопровождается образованием дислокаций, если толщина пленки превышает некоторую критическую. Критическая толщина зависит от рассогласования периодов решетки пленки и подложки. Очевидный способ избавления от дислокаций – использование пленок докритической толщины. Однако на практике это не всегда возможно из-за ее малости. Одним из методов увеличения критической толщины пленок является предварительная пластическая деформация подложек, приводящая к образованию стенок краевых дислокаций, которые препятствуют зарождению дислокаций несоответствия в гетероструктурах [137].

В [138] для увеличения критической толщины пленок на границе между пленкой и подложкой формировались тонкие буферные слои с заданной структурой. В [139] было предложено удалять дислокации несоответствия из эпитаксиальных пленок через боковые поверхности приложением напряжения несоответствия. В [140] изучались теоретические модели интерфейсов и дефектов несоответствия в поликристаллических и нанокристаллических пленках и вопросы огранки границ зерен действием напряжения несоответствия. Согласно [141] дислокации несоответствия могут быть удалены скольжением к боковым граням под действием сил изображения [98] .

И.А. Овидько [142] предложил теоретическую модель, которая описывает новый физический механизм для релаксации напряжений несоответствия в кристаллических пленках, а именно, формирование стенок из краевых дислокаций.

В настоящем параграфе предложен новый, многосолитонный подход к решению этой задачи. В [136] показано, что основные изменения смещений у дислокаций, возникающих на границе гетероструктуры, подобны смещениям в модели Френкеля Конторовой (Рис. 5.10).

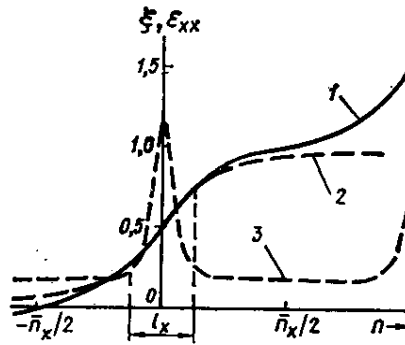


Рис.5.14. 1- смещения дислокаций на границе гетероструктуры, 2 – смещения дислокации Френкеля-Конторовой, 3 – распределение деформаций для смещений 1.

Будем считать, что на границе гетероструктуры возникают дислокации несоответствия, которые можно аппроксимировать дислокациями Френкеля-Конторовой. Дислокации Френкеля –Конторовой являются топологическими солитонами или структурными дефектами параметра порядка, их движение может быть описано уравнением синус-Гордона. Фундаментальными решениями этого уравнения, наряду с другими решениями, являются связанные состояния солитон-солитон, солитон-антисолитон, бризер и т.д. Как известно [106], солитоны, взаимодействующие с периодическим потенциалом решетки или солитон-солитон связанные состояния адекватны перегибам, пересекающим потенциальные барьеры. При $T \leq 50K$ приложенное механическое напряжение вызывает движение одиночных перегибов, а термически активированное образование пар солитон-антисолитон происходит при более высоких температурах. С помощью известных технологий [106] в кристаллах получают цепочки солитонов одного знака. (Образец подвергается большой пластической деформации и затем выдерживается в течение нескольких суток при комнатной температуре. В результате беспорядочно переплетенные дислокационные скопления распадаются, и определенная часть дислокаций ориентируется под малыми углами к кристаллографическим направлениям).

Нами моделировано получение такой цепочки солитонов и изучено воздействие двухсолитонной и многосолитонной цепочки на движение дислокаций.

Рассмотрим взаимодействие движущейся одиночной дислокации Френкеля-Конторовой с упругим полем дислокационной цепочки, движущейся в том же направлении с той же скоростью. В этом случае в уравнении синус- Гордона

добавляется член, описывающий такое поле, и рассматривается воздействие этого поля на одиночную дислокацию при разных скоростях совместного движения. Двухсолитонное решение невозмущенного уравнения синус- Гордона, как известно, имеет вид: [91]

$$\varphi(x,t) = 4 \operatorname{arctg} \left[\left\{ 1 - \frac{1 - u_1 u_2 - \sqrt{(1 - (u_1)^2)} \sqrt{(1 - (u_2)^2)}}{1 - u_1 u_2 + \sqrt{(1 - (u_1)^2)} \sqrt{(1 - (u_2)^2)}} \operatorname{Exp} \left[-\frac{x - x_1 - u_1 t}{\sqrt{(1 - (u_1)^2)}} - \frac{x - x_2 - u_2 t}{\sqrt{(1 - (u_2)^2)}} \right] \right\} / \right. \\ \left. \left(\operatorname{Exp} \left[-\frac{x - x_1 - u_1 t}{\sqrt{(1 - (u_1)^2)}} \right] + \operatorname{Exp} \left[-\frac{x - x_2 - u_2 t}{\sqrt{(1 - (u_2)^2)}} \right] \right) \right], \quad (5.11)$$

где u_1, u_2 - модули скоростей, x_1, x_2 - начальные фазы, φ - отклонение атома от положения равновесия, измеренное в углах.

С помощью преобразования Беклунда нами найдено и моделировано также трехсолитонное решение уравнения синус- Гордона (см. следующий параграф). Двух и трехсолитонные решения уравнения синус- Гордона представлены на Рис.5.15, Рис. 5.16.

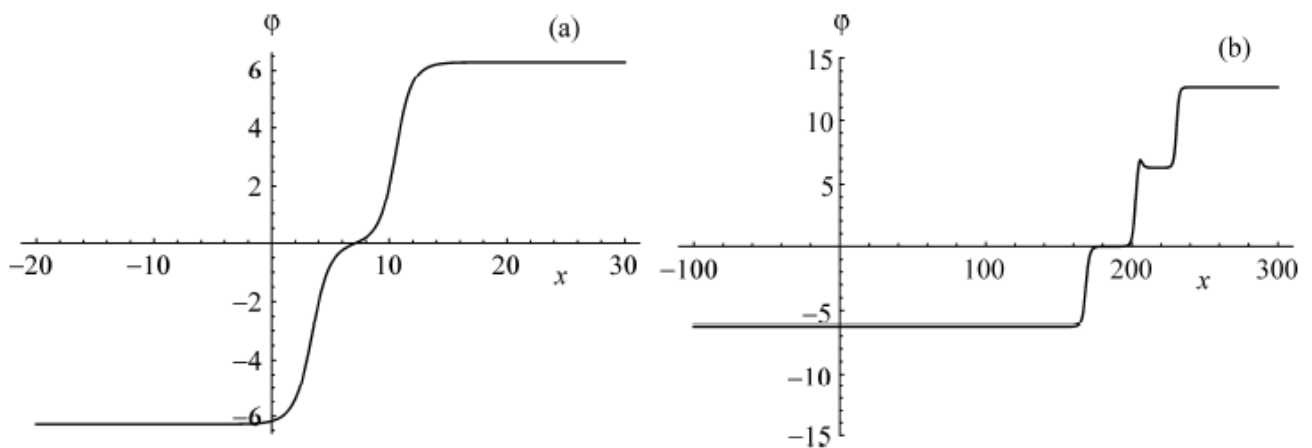


Рис.5.15, Рис. 5.16. Поля смещений двухсолитонной и трехсолитонной цепочек.

Связанные состояния нескольких солитонов мы рассматриваем как дислокационную стенку.

Уравнение синус- Гордона с учетом возмущения со стороны дислокационной стенки принимает вид:

$$\varphi_{tt} - c_0^2 \varphi_{xx} + \omega_0^2 \sin \varphi - \frac{2\pi F}{ma} = 0, \quad (5.12)$$

где c_0 - скорость звука, $\omega_0^2 \equiv \frac{2\pi f_0}{ma}$ - характерная частота, $f = f_0 \sin(\frac{2\pi x}{a})$ - периодическая сила, действующая со стороны подложки в модели Френкеля-Конторовой, a - постоянная решетки, F - модуль силы, действующей со стороны дислокационной стенки.

В плоскости скольжения ($\sigma_{xx} = 0, \sigma_{yy} = 0, \sigma_{zz} = 0$) действуют только касательные напряжения σ_{xy} (в наших обозначениях σ_x). Деформация является производной от смещения и определяет компоненты напряжения и силы:

$$\varepsilon_x = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \sigma_x = E \varepsilon_x, F_x = b \sigma_x, \quad (5.13)$$

где ε_x - компонента деформации, σ_x - компонента сдвигового напряжения, F_x - проекция силы, действующей на единицу длины дислокации, b - модуль вектора Бюргерса, E - модуль Юнга.

Численным экспериментом исследовалось воздействие поля двухсолитонной стенки на одиночную дислокацию в зависимости от скорости движения такой структуры. При отсутствии взаимодействия совместное движение такой структуры для разных моментов времени представлено на Рис.5.13.

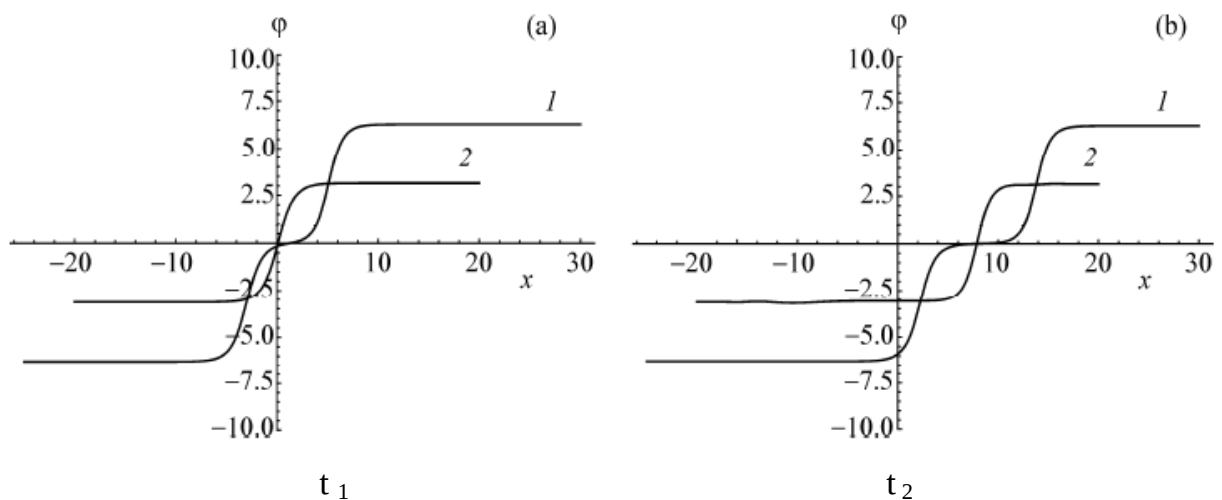


Рис. 5.17. Движение дислокационной стенки (1) и одиночной дислокации (2) в последовательные моменты времени $t_1 < t_2$ при отсутствии взаимодействия между ними.

Как видно из рис. 5.17, одиночная дислокация и двухсолитонная стенка движутся с одинаковой скоростью, не взаимодействуя друг с другом. При взаимодействии

дислокации с дислокационной стенкой численный эксперимент дал следующий результат для больших скоростей скольжения. Рис.5.18.

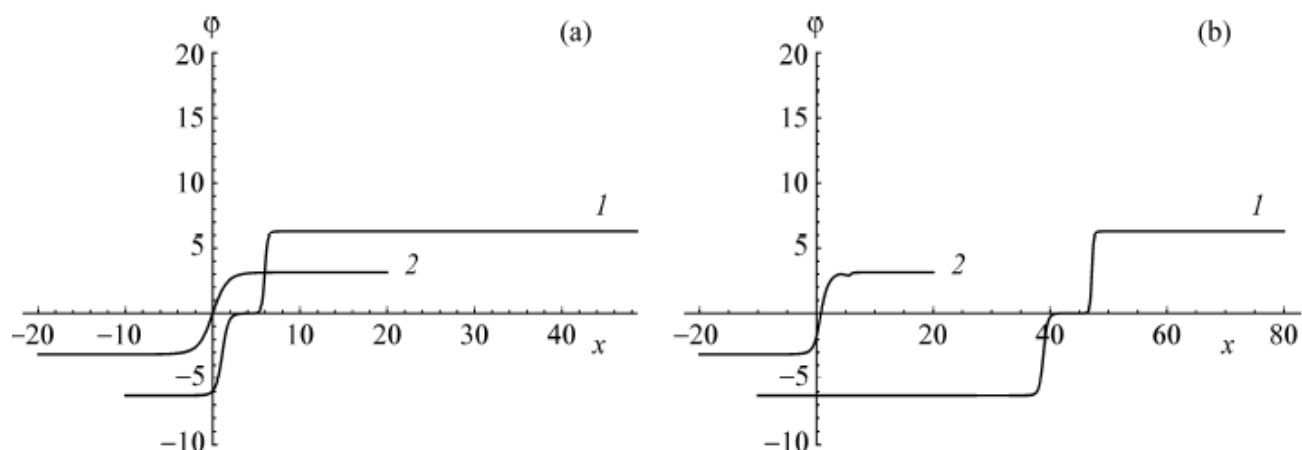


Рис. 5.18. Движение взаимодействующих двухсолитонной цепочки и одиночной дислокации в те же моменты времени $t_1 < t_2$ для скоростей скольжения $9 \cdot 10^{-1}$ см/с.

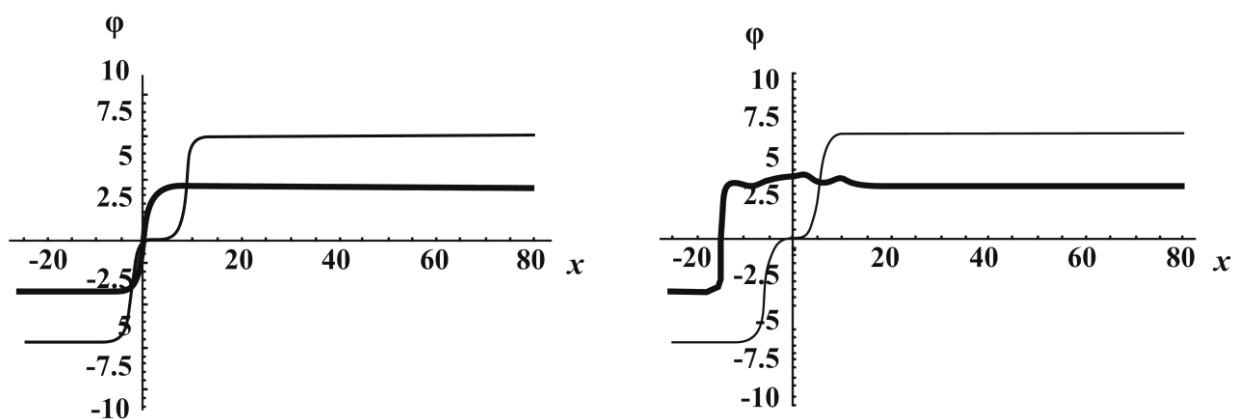


Рис.5.19. Движение одиночной дислокации, находящейся в поле двухсолитонной цепочки в те же моменты времени, что и при отсутствии взаимодействия для малых скоростей скольжения. (Свободная дислокационная цепочка для наглядности фиксирована.)

Как видно из рисунка 5.18, движение дислокации замораживается полем дислокационной стенки при больших скоростях скольжения. Из рисунка 5.19 видно, что при малых скоростях скольжения дислокация выталкивается из занимаемой позиции. Это объясняется тем, что в определенном интервале скоростей сила отталкивания растет с уменьшением скорости.

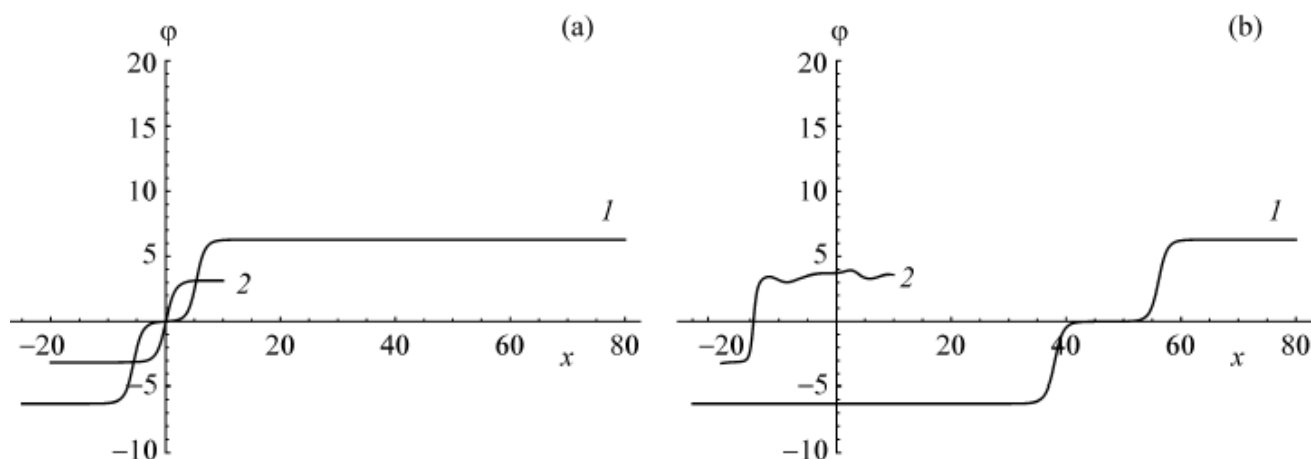


Рис.5.20. Движение одиночной дислокации, находящейся в поле двухсолитонной цепочки в те же моменты времени, что и при свободном скольжении обоих субъектов для малых скоростей скольжения ($3 \cdot 10^{-1}$ см/с).

Из Рис.5.20 видно, что солитонная цепочка и дислокация взаимно отталкиваются.

Для объяснения полученного эффекта моделировано поле напряжений дислокационной стенки при исследуемых скоростях движения. Рис.5.21.

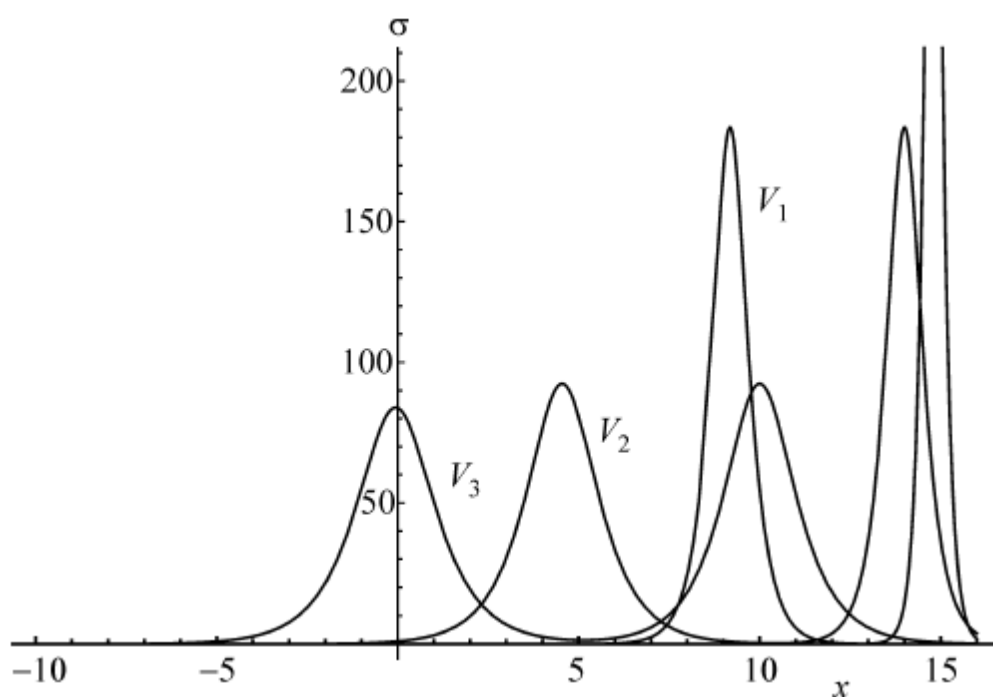


Рис.5.21. Поля напряжений двухсолитонной цепочки при скоростях скольжения $V_1 > V_2 > V_3$.

Как видно из результата численного эксперимента при увеличении скорости скольжения поле напряжений дислокационной цепочки сжимается в направлении скольжения, увеличиваясь в амплитуде. Соответственно, с увеличением скорости уменьшается взаимодействие дислокации и дислокационной цепочки. Изменяя скорость

скольжения, можно регулировать степень воздействия поля дислокационной цепочки на дислокацию. Таким образом, многосолитонная цепочка является стопором, отталкивающим дислокацию. В зависимости от соотношения между временем задержки дислокации и временем ее свободного пробега между барьерами последние можно условно разделить на низкие и высокие, которые действуют как слабые и сильные стопоры. Слабые стопоры эквивалентны существованию силы трения, действующей на дислокацию. Сильные стопоры связаны с высокими и протяженными барьерами. Наличие стопоров приводит к упрочнению кристалла, то есть замораживанию релаксации на определенном уровне.

Практически используется полубесконечная подложка с цепочками солитонов и пленка. Пленка и подложка упругоизотропные твердые тела с одинаковыми модулями сдвига и коэффициентами Пуассона. Пленка и подложка имеют одинаковые типы кристаллических решеток, но различные параметры решеток. В этом случае наличие в подложке многосолитонной цепочки приводит к тому, что на границе пленка-подложка дислокации несоответствия выталкиваются из рабочей области гетероструктур полем цепочки, что увеличивает стабильность свойств таких структур. Мы рекомендуем использовать гетероструктуры Co/Cu, в которых критическая толщина достаточно мала, а линейная плотность дислокаций несоответствия большая (больше $1,3 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$) [143]. Может быть использована также гетероструктура Fe/Cu или другие с подложками из гранецентрированных кубических металлов, для которых характерна большая плотность дислокаций [144]. Имеют также широкое применение гетероструктуры кремний на сапфире [145].

Все константы взяты для меди. Нами выбрана медь, так как движение дислокаций в меди (ГЦК структура) начинается при очень низких нагрузках (при 298К скорость составляет $8 \cdot 10^2 \frac{\text{см}}{\text{с}}$ при напряжении $\sigma \approx 10^6 \frac{\text{дн}}{\text{см}^2}$) и может меняться в зависимости от напряжения в широком интервале скоростей [98].

Существует другая возможность получения гетероструктур без дислокаций или с их минимальным количеством, например, при применении подложек с определенными, качественными параметрами, выращенных специальными методами [215,216]. В этих случаях возможно эффективное увеличение критической толщины пленки. Речь идет о сапфировых подложках. Выращивание сапфировых подложек с определенными, заранее

заданными параметрами, является первостепенной задачей при изготовлении гетероструктур.

5.4. Получение многосолитонных решений уравнения синус-Гордона с помощью преобразований Беклунда

1.1 Преобразования Беклунда

Уравнение синус-Гордона можно привести к виду $v_{tt} - v_{xx} + \sin v = 0$

Введем следующие обозначения:
$$\begin{cases} \eta = \frac{x+t}{2} \\ \xi = \frac{x-t}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} \end{cases}$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{1}{2}, \quad \frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \right), \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{1}{4} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial \xi} + \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) = \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} + 2 \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} + \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} \right)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial t^2} = \frac{1}{4} \left(\frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial \eta} - \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) = \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} - 2 \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} + \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} \right)$$

Подставляя полученные выражения в уравнение синус-Гордона,

$$\frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} - 2 \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} + \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} \right) - \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} + 2 \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} + \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} \right) + \sin v = 0 \Rightarrow \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \eta} = \sin v, \text{ или}$$

$$v_{\xi\eta} = \sin v \quad (5.14)$$

Уравнение (5.14) можно представить в виде двух дифференциальных уравнений первого порядка [146].

Пусть функции u и v удовлетворяют следующей системе уравнений.

$$\begin{cases} \frac{u_\xi - v_\xi}{2} = -\lambda \sin \frac{u+v}{2} \\ \frac{u_\eta + v_\eta}{2} = -\frac{1}{\lambda} \sin \frac{u-v}{2} \end{cases}, \quad \text{где } \lambda \text{ произвольная постоянная} \quad (5.15)$$

Преобразования (5.15) представляют собой преобразования Беклунда для уравнения синус Гордона, т.е. функция $v = v(\xi, \eta)$ является решением уравнения синус Гордона, если имеют место (5.14), (5.15). Для доказательства первое уравнение продифференцируем по η , а второе - по ξ :

$$\frac{u_{\xi\eta} - v_{\xi\eta}}{2} = -\lambda \cos \frac{u+v}{2} \left(\frac{u_{\eta} + v_{\eta}}{2} \right) = \cos \frac{u+v}{2} \sin \frac{u-v}{2}$$

$$\frac{u_{\eta\xi} + v_{\eta\xi}}{2} = -\frac{1}{\lambda} \cos \frac{u-v}{2} \left(\frac{u_{\xi} - v_{\xi}}{2} \right) = \cos \frac{u-v}{2} \sin \frac{u+v}{2}$$

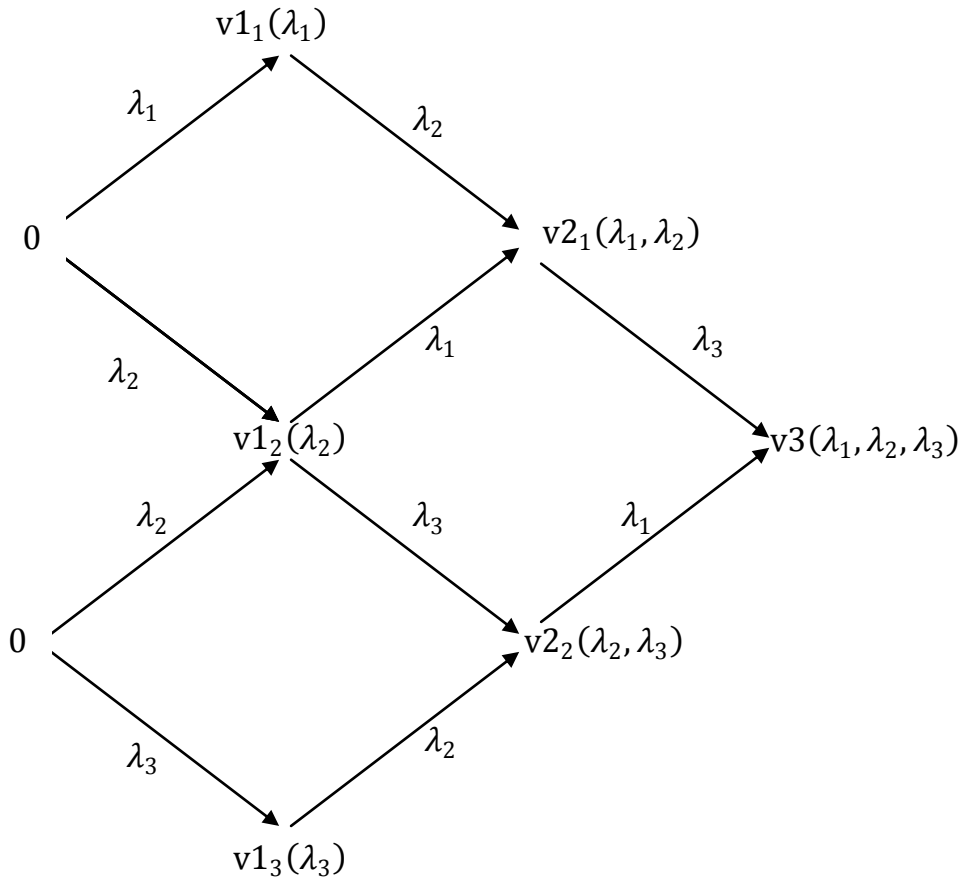
Вычитая из второго уравнения первое, получим

$$\frac{u_{\eta\xi} + v_{\eta\xi}}{2} - \frac{u_{\xi\eta} - v_{\xi\eta}}{2} = \sin \frac{u+v}{2} \cos \frac{u-v}{2} - \cos \frac{u+v}{2} \sin \frac{u-v}{2} =$$

$$= \sin \left(\frac{u+v}{2} - \frac{u-v}{2} \right) = \sin v \Leftrightarrow v_{\xi\eta} = \sin v$$

Далее с помощью преобразования Беклунда (5.15) получим трехсолитонное решение уравнения синус Гордона. Односолитонное и двухсолитонное решения получены, например, в [146]. Если задано хотя бы одно решение уравнения (5.14), то система (5.15) позволяет построить семейство решений, содержащих два параметра и связанных между собой. Тривиальным решением (5.14) является решение $v(\xi, \eta) = 0$.

1.2. Построение трехсолитонного решения



$$\left(\frac{v_1 - v_0}{2}\right)_x = \lambda_1 \sin \frac{v_1 + v_0}{2}$$

$$\left(\frac{v_2 - v_0}{2}\right)_x = \lambda_2 \sin \frac{v_2 + v_0}{2}$$

$$\left(\frac{v_3 - v_0}{2}\right)_x = \lambda_3 \sin \frac{v_3 + v_0}{2}$$

$$\left(\frac{v_2 - v_1}{2}\right)_x = \lambda_2 \sin \frac{v_2 + v_1}{2}, \quad \left(\frac{v_2 - v_1}{2}\right)_x = \lambda_1 \sin \frac{v_2 + v_1}{2}$$

$$\left(\frac{v_2 - v_1}{2}\right)_x = \lambda_3 \sin \frac{v_2 + v_1}{2}, \quad \left(\frac{v_2 - v_1}{2}\right)_x = \lambda_2 \sin \frac{v_2 + v_1}{2}$$

$$\left(\frac{v_3 - v_2}{2}\right)_x = \lambda_3 \sin \frac{v_3 + v_2}{2}, \quad \left(\frac{v_3 - v_2}{2}\right)_x = \lambda_1 \sin \frac{v_3 + v_2}{2}$$

$$\left(\frac{v_2}{2}\right)_x = \left(\frac{v_1}{2}\right)_x + \lambda_2 \sin \frac{v_2 + v_1}{2} = \lambda_1 \sin \frac{v_1}{2} + \lambda_2 \sin \frac{v_2 + v_1}{2}$$

$$\left(\frac{v_2}{2}\right)_x = \left(\frac{v_1}{2}\right)_x + \lambda_2 \sin \frac{v_2 + v_1}{2} = \lambda_2 \sin \frac{v_1}{2} + \lambda_2 \sin \frac{v_2 + v_1}{2}$$

$$\lambda_1 \left(\sin \frac{v_1}{2} - \sin \frac{v_2 + v_1}{2} \right) = \lambda_2 \left(\sin \frac{v_1}{2} - \sin \frac{v_2 + v_1}{2} \right)$$

$$\lambda_1 \sin \left(\frac{v_2 + v_1 - v_1}{4} \right) \cos \left(\frac{v_2 + v_1 + v_1}{4} \right) = \lambda_2 \sin \left(\frac{v_2 + v_1 - v_1}{4} \right) \cos \left(\frac{v_2 + v_1 + v_1}{4} \right)$$

Принимая во внимание, что $\sin(\alpha \pm \beta) = \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta$, получим

$$\lambda_1 \left(\sin \frac{v_2}{4} \cos \frac{v_1 - v_1}{4} + \cos \frac{v_2}{4} \sin \frac{v_1 - v_1}{4} \right) = \lambda_2 \left(\sin \frac{v_2}{4} \cos \frac{v_1 - v_1}{4} - \cos \frac{v_2}{4} \sin \frac{v_1 - v_1}{4} \right)$$

$$(\lambda_1 - \lambda_2) \sin \frac{v_2}{4} \cos \frac{v_1 - v_1}{4} = -(\lambda_1 + \lambda_2) \cos \frac{v_2}{4} \sin \frac{v_1 - v_1}{4}$$

$$\operatorname{tg} \frac{v_2}{4} = -\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \operatorname{tg} \frac{v_1 - v_1}{4}$$

$$v_2 = 4 \operatorname{arctg} \left[-\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \operatorname{tg} \frac{v_1 - v_1}{4} \right]$$

$$\left(\frac{v2_2}{2}\right)_x = \left(\frac{v1_2}{2}\right)_x + \lambda_3 \sin \frac{v2_2 + v1_2}{2} = \lambda_2 \sin \frac{v1_2}{2} + \lambda_3 \sin \frac{v2_2 + v1_2}{2}$$

$$\left(\frac{v2_2}{2}\right)_x = \left(\frac{v1_3}{2}\right)_x + \lambda_2 \sin \frac{v2_2 + v1_3}{2} = \lambda_3 \sin \frac{v1_3}{2} + \lambda_2 \sin \frac{v2_2 + v1_3}{2}$$

$$\lambda_2 \left(\sin \frac{v2_2 + v1_3}{2} - \sin \frac{v1_2}{2} \right) = \lambda_3 \left(\sin \frac{v2_2 + v1_2}{2} - \sin \frac{v1_3}{2} \right)$$

$$\lambda_2 \sin \left(\frac{v2_2 + v1_3 - v1_2}{4} \right) \cos \left(\frac{v2_2 + v1_3 + v1_2}{4} \right) = \lambda_3 \sin \left(\frac{v2_2 + v1_2 - v1_3}{4} \right) \cos \left(\frac{v2_2 + v1_3 + v1_2}{4} \right)$$

$$\lambda_2 \left(\sin \frac{v2_2}{4} \cos \frac{v1_3 - v1_2}{4} + \cos \frac{v2_2}{4} \sin \frac{v1_3 - v1_2}{4} \right) = \lambda_3 \left(\sin \frac{v2_2}{4} \cos \frac{v1_3 - v1_2}{4} - \cos \frac{v2_2}{4} \sin \frac{v1_3 - v1_2}{4} \right)$$

$$v2_2 = 4 \arctg \left[-\frac{\lambda_2 + \lambda_3}{\lambda_2 - \lambda_3} \operatorname{tg} \frac{v1_3 - v1_2}{4} \right]$$

$$\left(\frac{v3}{2}\right)_x = \left(\frac{v2_1}{2}\right)_x + \lambda_3 \sin \frac{v3 + v2_1}{2} = \lambda_2 \sin \frac{v1_2}{2} + \lambda_1 \sin \frac{v2_1 + v1_2}{2} + \lambda_3 \sin \frac{v3 + v2_1}{2}$$

$$\left(\frac{v3}{2}\right)_x = \left(\frac{v2_2}{2}\right)_x + \lambda_1 \sin \frac{v3 + v2_2}{2} = \lambda_2 \sin \frac{v1_2}{2} + \lambda_3 \sin \frac{v2_2 + v1_2}{2} + \lambda_1 \sin \frac{v3 + v2_2}{2}$$

$$\lambda_2 \sin \frac{v1_2}{2} + \lambda_1 \sin \frac{v2_1 + v1_2}{2} + \lambda_3 \sin \frac{v3 + v2_1}{2} = \lambda_2 \sin \frac{v1_2}{2} + \lambda_3 \sin \frac{v2_2 + v1_2}{2} + \lambda_1 \sin \frac{v3 + v2_2}{2}$$

$$\lambda_3 \left(\sin \frac{v3 + v2_1}{2} - \sin \frac{v2_2 + v1_2}{2} \right) = \lambda_1 \left(\sin \frac{v3 + v2_2}{2} - \sin \frac{v2_1 + v1_2}{2} \right)$$

$$\lambda_3 \sin \left(\frac{v3 + v2_1 - v2_2 - v1_2}{4} \right) \cos \left(\frac{v3 + v2_1 + v2_2 + v1_2}{4} \right) = \lambda_1 \sin \left(\frac{v3 + v2_2 - v2_1 - v1_2}{4} \right) \cos \left(\frac{v3 + v2_1 + v2_2 + v1_2}{4} \right)$$

$$\lambda_3 \sin \left[\frac{(v3 - v1_2) + (v2_1 - v2_2)}{4} \right] = \lambda_1 \sin \left[\frac{(v3 - v1_2) + (v2_2 - v2_1)}{4} \right]$$

$$\lambda_3 \left(\sin \frac{v3 - v1_2}{4} \cos \frac{v2_2 - v2_1}{4} - \cos \frac{v3 - v1_2}{4} \sin \frac{v2_2 - v2_1}{4} \right) = \lambda_1 \left(\sin \frac{v3 - v1_2}{4} \cos \frac{v2_2 - v2_1}{4} + \cos \frac{v3 - v1_2}{4} \sin \frac{v2_2 - v2_1}{4} \right)$$

$$(\lambda_3 - \lambda_1) \sin \frac{v3 - v1_2}{4} \cos \frac{v2_2 - v2_1}{4} = (\lambda_1 + \lambda_3) \cos \frac{v3 - v1_2}{4} \sin \frac{v2_2 - v2_1}{4}$$

$$\operatorname{tg} \left(\frac{v3 - v1_2}{4} \right) = \frac{\lambda_1 + \lambda_3}{\lambda_3 - \lambda_1} \operatorname{tg} \left(\frac{v2_2 - v2_1}{4} \right)$$

$$v3 = v1_2 + 4 \arctg \left[\frac{\lambda_1 + \lambda_3}{\lambda_3 - \lambda_1} \operatorname{tg} \left(\frac{v2_2 - v2_1}{4} \right) \right]$$

Используя полученное выражение, мы моделировали трехсолитонное решение.

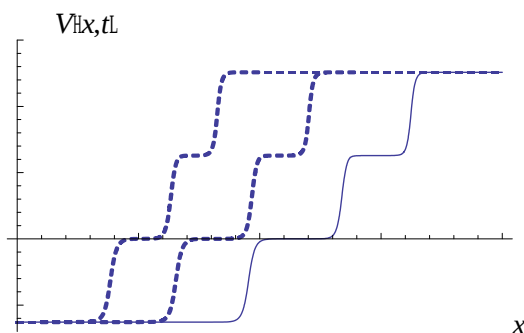


Рис.5.22.Трехсолитонное решение уравнения синус Гордона для трех моментов времени

На рисунке 5.22 представлено трехсолитонное связанное состояние, которое в твердых телах можно рассматривать как дислокационную стенку.

Таким образом, происходит разветвление решений уравнения синус Гордона (бифуркация), дающее многосолитонные решения, то есть однородная система разделяется на области разных типов. Очевидно, что при возникновении таких новых упорядоченных структур энтропия занимаемой ими области понижается, а энтропия прилегающих областей растет. Суммарное изменение энтропии положительно, что является прямым следствием второго закона термодинамики и основных свойств энтропии. Появление новых упорядоченных структур в нелинейной, неравновесной системе позволяет говорить о том, что природа избрала уникальный механизм развития системы, позволяющий использовать одни и те же уравнения для трактовки различных явлений природы.

Выводы к главе 5

При совместном движении двух аналогичных дислокаций Френкеля-Конторовой в одной плоскости скольжения с одинаковыми скоростями наблюдаются следующие закономерности взаимодействия дислокаций.

При увеличении скорости дислокаций Френкеля-Конторовой область постоянных сдвиговых напряжений сжимается в направлении скольжения. Этот

эффект приводит к тому, что в этом случае взаимодействие между дислокациями уменьшается.

При малых скоростях поле данной дислокации под действием поля соседней дислокации искажается уже в течение небольшого интервала времени, то есть взаимодействие между дислокациями существенно. При увеличении скорости взаимодействие ослабляется. Как показал численный эксперимент, в пределе, когда скорость дислокаций стремится к скорости звука, взаимодействие между ними стремится к нулю.

Периодичность решетки реальных кристаллов влияет на характер и скорость движения дислокации.

При низких барьерах Пайерлса движение дислокации поступательное. При увеличении высоты барьера Пайерлса характер движения изменяется. В кристаллах с высоким барьером дислокация совершает колебательное движение в направлении скольжения. Происходит искажение хвостовых областей дислокаций. Ширина дислокации периодически меняется, оставаясь все время меньше, чем в кристаллах с низким барьером. При учете силы трения движение дислокаций замедляется, амплитуда колебаний в направлении скольжения значительно уменьшается.

Теоретический расчет и математическое моделирование позволили заключить, что в алюминии с учетом барьера Пайерлса при низких температурах дислокации Френкеля Конторовой движутся посредством туннелирования перегибов. Сделана теоретическая оценка возможности такого эффекта. Моделирование полей смещений и скоростей при движении дислокации демонстрирует квантовый характер их движения.

Полученный результат объясняет аномальное уменьшение напряжения пластического течения и рост накопленной деформации в алюминии при низких температурах [131, 132,133].

Изучено воздействие двухсолитонной и многосолитонной цепочки на движение дислокаций при их скольжении с разными скоростями совместного движения на границе пленка – подложка гетероперехода.

Движение дислокации замораживается полем дислокационной стенки при больших скоростях скольжения. При малых скоростях скольжения дислокация выталкивается дислокационной стенкой из рабочей области гетероперехода.

Таким образом, многосолитонная цепочка является стопором, отталкивающим дислокацию. В зависимости от соотношения между временем задержки дислокации и временем ее свободного пробега между барьерами последние действуют как слабые или сильные стопоры. Наличие стопоров приводит к упрочнению кристалла, то есть замораживанию релаксации на определенном уровне.

Практически используется полубесконечная подложка с цепочками солитонов и пленка. Пленка и подложка упругоизотропные твердые тела с одинаковыми модулями сдвига и коэффициентами Пуассона. Пленка и подложка имеют одинаковые типы кристаллических решеток, но различные параметры решеток. В этом случае наличие в подложке многосолитонной цепочки приводит к тому, что на границе пленка-подложка дислокации несоответствия могут регулируемо выталкиваться из рабочей области гетероструктур, что увеличивает стабильность их свойств и улучшает функциональные качества приборов, построенных на их основе.

ГЛАВА 6. СОЛИТОННЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В ЕСТЕСТВЕННЫХ ОБЪЕКТАХ

6.1. Селевая волна как уединенная волна – солитон [25,147,148, 175]

В последнее время актуальной становится проблема катастроф, связанных с водными объектами (наводнения, сели, цунами и т.д.). Несомненно, такие природные явления связываются с сезоном выпадения большого количества осадков. Однако практика показывает, что это не всегда так, поскольку иногда сели образуются при относительно малом количестве осадков. Несмотря на повышенный интерес исследователей, в настоящее время нет достаточно полного представления (ни математического, ни физического) о закономерностях процесса образования селей. Определенные трудности возникают при оценке количества воды, участвующего в формировании селя. Также нет математической модели селевой волны, как таковой. С другой стороны, селевые явления трудно прогнозировать, поскольку пока не выявлены закономерности возникновения селевых явлений. С этой точки зрения, поиск моделей, позволяющих прогнозировать и описывать селевые катастрофические явления, является актуальной задачей.

Динамика развития селевого выброса – модель нелинейного волнового процесса с источниками.

Введение

Катастрофические наводнения и селевые потоки/сели, как природные явления, являются очень опасным стихийным бедствием. Вовлекаемые большие массы воды и часто бурные водные потоки с большим содержанием твердого материала (камней и различных пород), возникая внезапно и/или плавно возрастая по интенсивности, при их движении могут распространяться с большой скоростью и приводить к катастрофическим последствиям – разрушениям и большим человеческим жертвам [149]. Данные явления являются типично нелинейными процессами, происходящими в открытой системе с пространственно распределенной обратной связью [22] и могут быть проанализированы в рамках стандартных гидродинамических подходов.

Действительно, подобные процессы хорошо известны для нелинейных гидродинамических систем открытого и закрытого типов (с открытой водной поверхностью и закрытого в некотором объеме – трубе – водного объекта, соответственно), для которых определяются соответствующие управляющие параметры в рамках классических дифференциальных уравнений [150] и гидравлических схем [24] при заданных начальных/граничных условиях.

Нами проведен анализ с использованием подходов нелинейной гидродинамики для формирования мощной уединённой волны (солитона). На основе данной волновой концепции проводится обсуждение возможных механизмов возникновения и развития катастрофических наводнений и селевых потоков в горных речных бассейнах. Для этих явлений транзит вод определяется трещиноватостью горных пород (3D-сеть трещин/разломов с зонами бифуркаций и фрактальной структурой [151,152,153]). При этом рассматриваются два типа выброса на поверхность подземных вод – внезапный пороговый (flash в англоязычной литературе) и относительно затяжной с непрерывной подпиткой поверхностного стока за счет изливания потоков из подземных источников.

Оценка объема селя – доминирующие факторы

Проблемы исследований селевых потоков, которые обычно возникают в руслах небольших горных рек или даже сухих русел, включает в себя комплексный анализ их катастрофических последствий, оценку существующих рисков, прогноз места и времени их возникновения и путей распространения, а в конечном итоге – меры по защите населения и сооружений от этих грозных процессов. К сожалению, данная проблема еще далека от успешного разрешения и не существует эффективных методов прогноза селей, что подтверждается, во-первых, всей имеющейся на сегодняшний день литературой, как классической, так и современной (см., например, [154-158], а также многочисленными недавно изданными академическими энциклопедическими профильными изданиями) и свидетельствами очевидцев в средствах массовой информации.

Во-вторых, – из-за нерешенности этой проблемы возникают те колоссальные жертвы и разрушения, которые, к сожалению, сопровождают такие катастрофические

явления на протяжении всей истории их наблюдений и которые особенно активно обсуждаются в последнее время на разных уровнях.

Ключевой вопрос общепринятого механизма возникновения этих селевых процессов – кратковременные обильные (2-4 часа) ливни и ливневые дожди и/или длительные менее интенсивные обложные дожди (до нескольких суток) [149,156,157].

В количественном выражении речь идет о 100-300 мм таких осадков с интенсивностью до 20 мм/час – в первом случае, и до 1800 мм (с интенсивностью 2 мм/час) – во втором. Важно, что они выпадают на площади как минимум в десятки квадратных километров, но она может охватывать и огромные пространства (десятки тысяч квадратных километров).

Если говорить о корреляции уровня сезонных осадков с катастрофическими явлениями, то она часто не прослеживается явно даже для больших временных периодов – например, при сезонном рассмотрении.

Действительно, катастрофические пороговые процессы, не имеют регулярной сезонной динамики, проявляются внезапно. Именно для малых рек наиболее опасный период катастрофических явлений сдвинут в летне-осенний период, и, по-видимому, не связан напрямую с весенним стоком.

Кроме того, проводимые оценки не всегда согласуются с объемами воды, вовлеченными в селевой поток. Действительно, типичная интенсивность селевого потока – от 10-50 до 5000-10000 м³/с [149], что намного превышает объем осадков в период, предшествующий сходу селя.

Существующие проблемы в развитии селевого процесса

Первый удивительный факт в связи с анализом источников формирования обычного селя – как такая масса атмосферной воды одновременно локализуется при селе именно в русле конкретной небольшой горной реки, хотя для обозначенных выше площадей охвата осадков существует множество «более выгодных» параллельных водных стоков в рамках единого водосборного речного бассейна горного массива, в т.ч. и в виде обширных долин. Более того, общепринято считать, что характерной особенностью предпосылок селевых потоков является факт, что максимальные расходы селевых потоков в десятки раз превосходят расходы водных

паводков в тех же бассейнах, а ведь для селевых потоков низкой плотности – это один и тот же процесс.

Второе странное обстоятельство связано с составом селя – селевые потоки высокой плотности (сходные оползневым течениям), в которых обломочный материал составляет до 75%, способны перемещать крупногабаритные породы размером в поперечнике до нескольких метров и весом до нескольких тонн на значительные расстояния (до 5-15 км) со скоростью до нескольких десятков км/час вне зависимости от наличия естественных и/или искусственных заторов и засоренности речных русел с итоговой толщиной селевых отложений до 6-10 м.

Однако хорошо известно, что даже в бурных горных реках с большим объемом воды русловая каменно-почвенная структура является все же устойчивой и не может массово перемещаться только под напором поверхностных вод.

Третья группа проблемных фактов связана с попытками объяснить часто наблюдающееся разделение по сезонам, с одной стороны, периодов схода селей, а с другой стороны – интенсивных дождевых процессов и снеготаяния в горах. Так, обычно, в горных массивах период активного селеобразования длится с апреля по ноябрь, но он отнюдь жестко не коррелирует с периодом интенсивных атмосферных осадков. В частности, катастрофический сел, прошедший 25 мая 1946г. на р. Гедар (Армения), не сопровождался обширными ливневыми дождями – они были невелики (до 15-20 мм), а общий объем селя, тем не менее, составил $1,7 \times 10^6 \text{ м}^3$. Аналогичные явления наблюдаются и в Приэльбрусье, и на Военно-грузинской дороге, где таяние снежного покрова само по себе не порождает сколько-нибудь значительных грязекаменных селей. Обычные утверждения, что такое различие во временных периодах описываемых явлений связано с предварительным увлажнением ландшафта и процессами выветривания, которые затем и сказываются на возникновении селевых потоков – не очень убедительны.

Более важным нам представляется наблюдаемый подмыв основания речного русла в потенциальных селевых очагах и наличие водно-аккумулятивных очагов, которые возможны в т.ч. за счет глубинных подземных вод, к которым следует относить грунтовые воды, наиболее близко расположенные к поверхности земли.

Более того, по сравнению с периодичностью обильных атмосферных осадков, повторяемость селей происходит значительно реже – 1 раз в 2-3 года для маломощных селей (с объемом до 1000 м^3) и – в 30-50 лет для рекордных селей (с объемом грязекаменных и водоснежных селей больше 10^6 м^3 [158,159].

В этой связи отметим, что во французских Альпах селевые потоки в значительной степени определяются спецификой геоморфологической ситуации, а не только обильными осадками. В Хибинах водоснежные селевые потоки систематизируются не столько локализованной областью осадков и снеготаяния на разных склонах, а скорее могут быть проанализированы в рамках единого водосборного бассейна (эти результаты были получены с использованием аэрокосмических методов наблюдения) [160,161].

Далее, селевые потоки носят обычно пульсационный (волновой) характер – часто 10-100 волн за 1-4 часа высотой 2-10 м, и часто сопровождаются гулом и вибрацией поверхности земли. Все это также трудно связать только с поверхностными и атмосферными явлениями.

Эти процессы интересны, прежде всего, в аспекте дождевого смыва почвы при катастрофических грязевых наводнениях. Хотя он может достигать нескольких десятков тонн с гектара в год (при норме естественного смыва не более одной тонны с га), тем не менее это несравнимо меньше объемов пород, вовлекаемых в процесс внезапных катастрофических наводнений и селевых потоков.

Действительно, даже для относительно крутых склонов (более 10°) дождевой (а также из-за весенних талых вод) смыв почвы в пределах водосборного бассейна не превышает нескольких десятков тонн с гектара. Он, разумеется, зависит от типа почв и агрофона, но максимальных значений достигает для серых лесных среднесмытых почв [162].

Тем не менее, в рамках всех этих моделей, основывающихся только на учете дождевых стоков, численные параметры вовлекаемых водных и почвенных масс (в общем случае – продуктов разрушения пород, в т.ч. горных пород из-за процессов выветривания) не стыкуются с теми огромными их значениями для быстро развиваемых кратковременных стихийных бедствий ([154]).

Таким образом, наличие дополнительных источников больших водных и грязевых потоков – возможное условие для объяснения данных катастрофических явлений. Эти дополнительные источники могут определяться подземными водами и их внезапным выбросом в определенно сложившихся/благоприятных для данного процесса условиях [25].

Речные бассейны как базовые элементы земных ландшафтов

В последнее время достаточно большое внимание специалистами уделяется процессам, происходящим внутри речных бассейнов, которые являются фундаментальными структурами на поверхности Земли (см. напр.[151,163]).

Действительно, практически всю земную поверхность (и даже иногда, подводную ее часть) можно представить в виде водосборных бассейнов различных порядков[164-167]. Как правило, основное внимание исследователей сосредоточено на динамической системе «река-климат» (в зависимости от вариаций, как правило, температуры и атмосферных осадков), но при незначительном учете непрерывного влияния на функционирование речного бассейна подземных вод. В таком представлении река рассматривается как поверхностный географический объект, жизненные циклы которого, в основном, зависят от количества выпадающих атмосферных осадков. При этом подземной гидросфере отводится вспомогательная роль (см. напр. с [149]).

Однако рассмотрение этих вопросов требует не только тщательного изучения процессов, происходящих в пределах поверхностного речного русла, но и выяснения базовых механизмов возникновения и развития речной 3D-системы на конкретной территории [166,167].

Тот факт, что распространение подземных вод в речном бассейне территориально коррелирует с поверхностным стоком, отмечали многие исследователи (см. напр. [169,170]). На более сложные взаимодействия подземных и поверхностных вод указывается в работах [171].

Таким образом, только при учете взаимодействия поверхностных и подземных вод можно говорить о реальном водном потенциале и балансе водных потоков в конкретном речном бассейне[169,170].

Динамика развития селевого выброса – модель нелинейного волнового процесса с источниками

Распространение фронта катастрофического водного потока/селя может быть описано как развитие волнового процесса с диссипацией в нелинейной системе с образованием уединенной волны или солитона, который является решением гидродинамического уравнения Кортевега де Фриза (КдФ) [22]. Наблюдаемые в природе принципиальные закономерности при образовании и распространении селевого процесса сводятся к следующему: внезапность возникновения (как во времени, так и в пространстве), наибольшая интенсивность потока в первоначальный момент, превышение массы воды в образовавшемся селе по сравнению с количеством выпавших осадков, непрерывная подпитка первоначального селевого импульса и его усиление при распространении, определенная повторяемость во времени и т.д. Эти факторы и обуславливают открытость и нелинейность рассматриваемой системы с распределенной по пространству и времени обратной связью. Все это позволяет использовать солитонную модель, с помощью которой может быть промоделирован процесс возникновения и распространения селевого потока. Как известно, солитон – так называемая уединенная волна, описываемая в простейшем случае классическим уравнением КдФ. В нашей задаче нелинейность обеспечивается подпиткой селя подземными водами, а дисперсия соответствует делокализации селя за счет пространственного распределения его потоков на склоне. При этом происходит и затухание селя, т.е. перераспределение импульса, но уже из-за процессов диссипации – влияния трения на селевой поток со стороны поверхности массива, по которой он распространяется, в том числе из-за взаимодействия твердых фракций селя с окружением, внешними препятствиями и друг с другом.

Из множества классов решений уравнения КдФ для нас наибольший интерес представляют 4 их типа [23,172]: одиночный солитон, его распад на последовательность нескольких волновых пакетов, солитонный объект с протяженным шлейфом (полочкой и/или осцилляциями), неустойчивый интенсивный солитон с опрокидыванием.

Именно эти классы решений (хотя их реализация требует отдельного анализа с учетом изменяющихся во времени коэффициентов, в т.ч. случайных значений параметров уравнения КдФ) могут быть ассоциированы с наблюдающимися водными катастрофическими явлениями. Основная проблема здесь – связь требуемых под данные классы решений численных значений коэффициентов уравнения КдФ и реальных параметров, характеризующих природные водные потоки. Такое сопоставление не всегда можно провести, но анализ в рамках решения обратной задачи вариационным методом [165,166,23] дает процедуру для обоснования данной аналогии.

Однако мы остановимся на простом анализе (в безразмерных относительных единицах) нелинейного волнового распространения водного потока на свободной поверхности с использованием уравнения КдФ, которое удобно переписать в форме [139]:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 u(x,t)}{\partial x^3} + \alpha u(x,t) \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = 0, \quad (6.1)$$

где третий член описывает дисперсию волн в системе, а четвертый член – ее нелинейность (зависит от самой величины смещения $u(x,t)$), α, β – некие числовые коэффициенты, однако зависящие от глубины канала (русла), когда вода находится в состоянии покоя, v – скорость распространения, t – время. При рассмотрении гидродинамической модели под $u(x,t)$ следует понимать поперечное смещение поверхности жидкости от равновесного уровня. Нижеприводимые расчеты в соответствии с уравнением (6.1) сделаны с помощью программного пакета Mathematica.

Решение этого нормализованного уравнения для бегущего со скоростью v импульса хорошо известно :

$$u(x,t) = \frac{v}{2} \operatorname{sech}^{-2} \left(\frac{\sqrt{v}}{2} (x - vt) \right), \quad (6.2)$$

где $u(x,t)$ – определяет вертикальное смещение единицы селевой массы относительно положения покоя, зависящее от пространственной координаты

(x) и времени (t), v – скорость селевого импульса.

Следствием решения (6.2) является факт, что скорость волнового пакета прямо пропорциональна амплитуде солитона, а ширина Δ – обратно пропорциональна корню квадратному из амплитуды ($\Delta \sim \frac{1}{\sqrt{v}}$), имеет принципиальное значение для распространения солитона и определяет все его физические проявления.

Профиль такой волны представляет собой возмущение колоколообразной формы с некоторой максимальной амплитудой (определяет мощность селея), не изменяющейся со временем по мере его распространения. На это можно посмотреть по другому: продолжающее вовлечение подземных вод в развивающийся сель, о котором шла речь выше, приводит к возрастанию скорости селевого импульса. Такое увеличение скорости селевого импульса приводит к его существенной модификации: он становится более узким, и его амплитуда увеличивается.

Далее, в соответствии с проведенными расчетами стабильная форма солитонов устойчива по отношению к выбору начальных условий. В нашей модели полагаем начальное возмущение в виде либо

$$u(x, 0) = u_0 \exp(-x^2 / l^2) \quad (6.3)$$

(l – линейный размер начального возмущения), и/или в виде косинуса гиперболического (см. ниже соотношение (6.5)). Со временем в обоих случаях реализуется солитонный режим. Если начальное возмущение сильное, то формируется несколько солитонов, если оно слабое, то солитон не возникает. Таким образом, существует минимальное начальное возмущение – порог – для возбуждения солитонов. Действительно, в уравнении КдФ управляющим безразмерным параметром является $\sigma = l(u_0 / \beta)^{1/2}$, где l – линейный размер начального возмущения для типичного возмущения (6.3). Наш численный анализ показал, что при $\sigma \leq \sigma_{\min}$ солитоны отсутствуют, но возникают синусоидального типа осцилляции. При увеличении σ происходит зарождение солитонов: могут формироваться одновременно два-три и большее число солитонов. Например, для $\sigma = 9$, $\eta_0 = 1.71$,

$t=0.84$ трехсолитонный режим показан на Рис.6.1 слева. Другие отмеченные режимы приведены на Рис. 6.2,6.3. (В некоторых рисунках возмущение $u(x,t)$ заменено на $\eta(x,t)$).

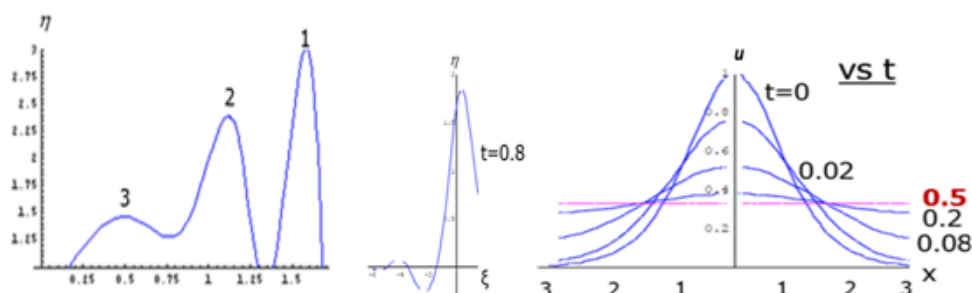


Рис.6.1. Различные варианты решения нормированного уравнения Кортевега де Фриза для соответствующих параметров.

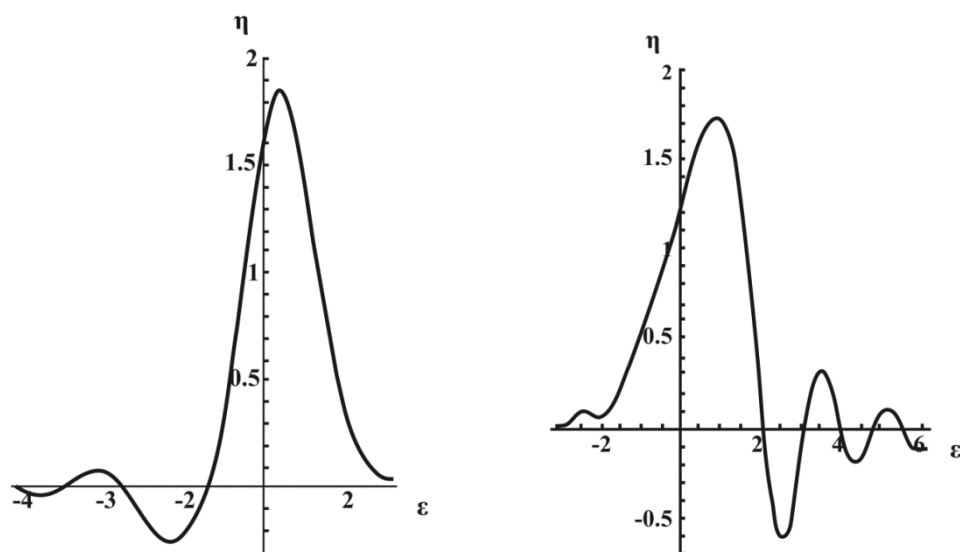


Рис.6.2. Синусоидального типа осцилляции при $\sigma \leq \sigma_{\min}$

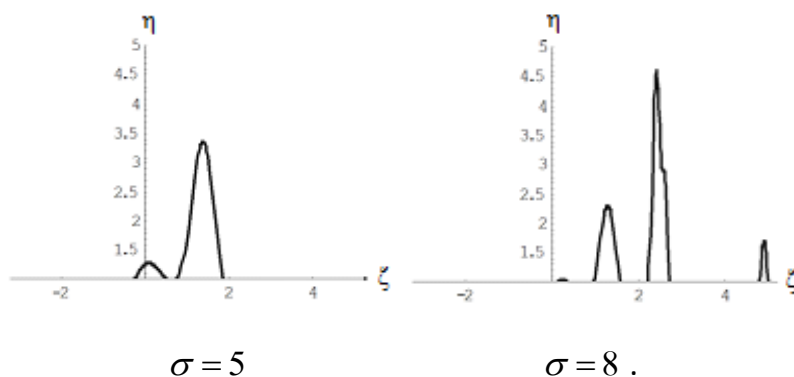
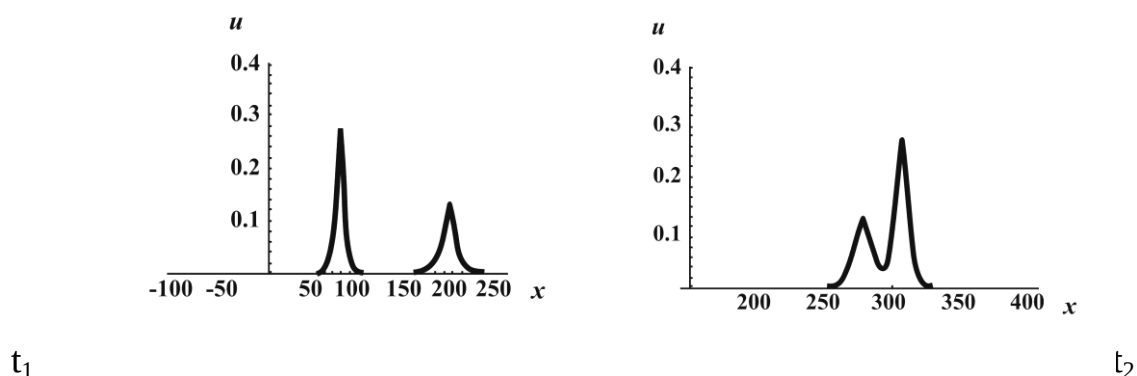


Рис. 6.3. Рождение различного числа солитонов для разных σ .

На Рис. 6.2 представлен случай когда в русле реки нет сильного поверхностного стока и подземный водный пул недостаточно мощный. В этом случае первоначальный импульс малой интенсивности (ниже пороговой) не дает солитонного решения, а представляет обычный волновой процесс: возникают осцилляции на хвосте, селевой процесс быстро затухает и не представляет особой опасности. Тогда можно говорить о маломощном селе. Процесс не является солитонным, а представляет обычный волновой процесс без усиления.

Из Рис. 6.3 следует, что в зависимости от мощности исходного селевого выброса происходит его распад на разное число солитонов (селевых потоков). Результаты Рис. 6.3 имеют особую ценность при оценке возможных режимов селевого потока при мощных начальных выбросах с учетом реализуемого количества вовлекаемых подземных вод.

В случае, когда распространяющийся импульс представляет собой «дублет», который состоит из высокоамплитудного импульса-лидера и низкоамплитудного волнового объекта, при их столкновении лидеры аннигилируют, а происходящее за ним столкновение низкоамплитудных объектов приводит к их суммированию. Во время перекрывания солитонов профиль ансамбля меняется. Важно, что селевой процесс на этапе перекрывания может существенно усиливать разрушительное воздействие (локализация в одном месте большой массы воды). В месте столкновения имеем надпороговые условия, что вызывает регенерацию «дублетов», которые разбегаются в разные стороны. Нами моделировано столкновение двух солитонов, которое происходит в аналогичном режиме (Рис.6.4).



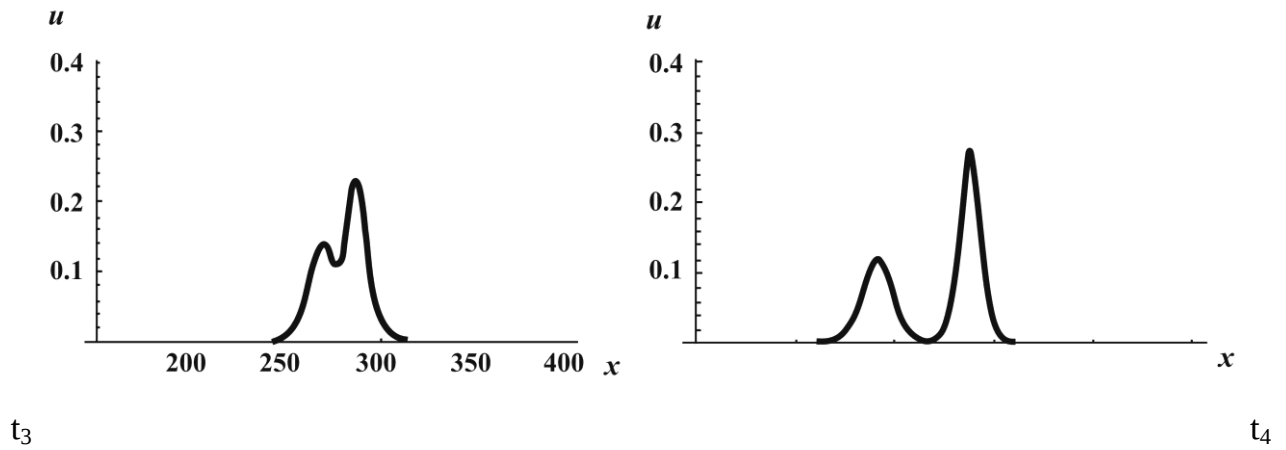


Рис. 6.4. Столкновение двух солитонов: представлены их формы в последовательные моменты времени $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$.

Для реальных условий энергия солитона не сохраняется из-за эффектов диссипации энергии и притока энергии за счет внешних воздействий. Этот процесс открытости системы можно учесть методами теории возмущений и ввести дополнительный член в уравнение (6.1) $\mu \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ (где μ - малый параметр, характеризующий диссипацию).

Решение (6.3) верно для малых μ . Таким образом, селевому импульсу можно приписать свойства солитона, и он в процессе распространения сохраняет свою форму. Однако, если μ существенно, то солитон изменяет свою форму, затухает или происходит опрокидывание. Сель в этом случае перестает быть опасным.

При учете диссипации уравнение КдФ (6.1) можно феноменологически записать в виде (для переменной $u(t, x)$):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \mu \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0, \quad (6.4)$$

где μ - коэффициент диссипации. Предположим, что при $t = 0$ имеем начальное возмущение в виде

$$u(0, x) = u_0 c h^{-2}(x/\ell). \quad (6.5)$$

Как известно, солитон КдФ под действием диссипации постепенно замедляет движение, и уменьшается его высота – он расплывается. Время жизни солитона обратно пропорционально силе трения. Действительно, при $\beta=0.3$, $\mu=2$, $u_0=1$ результаты численного эксперимента показаны на рис. 6.5 (1) для $t=0, 0.02, 0.08, 0.2, 0.5$. Для $\mu=10$ (см. Рис. 6.5 (2)) затухание происходит быстрее.

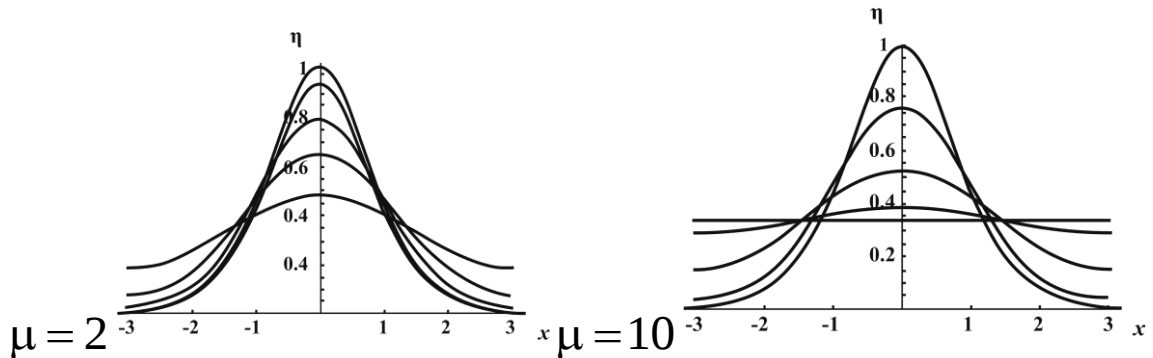


Рис.6.5. Затухание амплитуды солитонов за эквивалентные промежутки времени для различных коэффициентов затухания.

Таким образом, в рамках данной модели – в случае образования поверхностной волны в виде изолированного водного выброса за счет, в частности прорыва глубинных вод (сценарий 1), он полностью определяется амплитудой волны η , а параметр β характеризует водный канал/русло реки, по которому распространяется произошедший выброс. Этот тип решений – внезапный выброс, обычно характерен для катастрофических водных событий в горном ландшафте.

Для плавного водного потока (в частности, равнинных рек) и/или истечения воды после выброса обозначенная связь глубинных (подземных) и поверхностных вод сводится к другому классу решений (сценарий 2) – со шлейфом при затяжном выходе (самоизливе) подземных вод наружу: речь идет уже о длинном волновом объекте с устойчивым и/или нестационарным (осцилляционным) поведением. Эти решения (они получаются в рамках теории возмущений) также хорошо известны (см., например, [172,173]).

Проведенный анализ показывает, что качественно селевой процесс можно представить в виде четырех этапов (Рис.6.6): на первом этапе происходит основной выброс селя; на втором – его распад на отдельные солитоны-сателлиты; на третьем

этапе происходит самоорганизация этих сателлитов – солитоны выстраиваются по величине своих амплитуд в процессе своего распространения; на заключительном (четвертом) этапе происходит опрокидывание (большая нелинейность) или рассасывание (большая диссипация) солитона.

Опрокидывание происходит по следующей причине. В селевом потоке имеет место распределение взвешенных частиц по высоте (наиболее тяжелые частицы оказываются внизу и движутся вследствие наличия силы трения медленнее, чем более легкие и расположенные выше). В результате со временем развивается важный нелинейный эффект – процесс опрокидывания, характерный для нелинейного процесса с распределением скоростей волн по пространству. Это приводит в момент столкновения со встречными объектами к дополнительным их разрушениям.

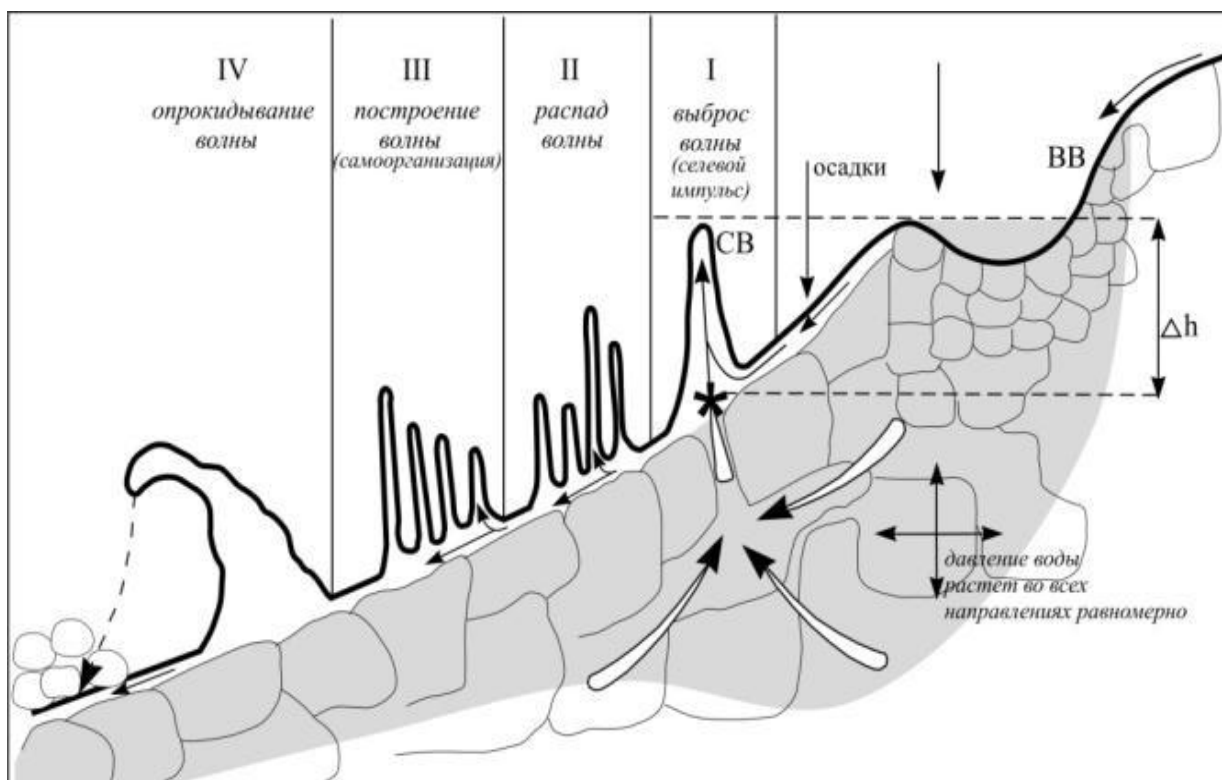


Рис.6.6. Этапное развитие и распространение селевой волны:

ВВ – водосборная воронка; СВ – селевая волна; * – ворота селя;

Δh – гидростатический напор; ■ – вода ↗ – подземные воды;

Очевидно, что такой сюжет развития процесса может иметь место при определенных (селеопасных) значениях уклона русла [167,168]. Наконец, характерная периодичность процесса селеобразования на данной территории также находит объяснение в рамках используемой солитонной модели. Действительно, такие решения (локально периодические, но не синусоидальные) существуют для уравнения (6.1). Однако, они переходят к предельному случаю уединенной бегущей длинной волны, рассматриваемой нами для случая однократного схода селя в форме бегущего потока.

Краткое обсуждение реальных событий в рамках солитонной модели

Оценим тот усредненный дебит Q' (т.е. количество воды), который необходим для формирования наблюдаемого водного выброса в виде уединенной волны заданной высоты в процессе произошедшего/наблюдаемого катастрофического события на земной поверхности – на примере события в г. Крымск (2012 г.). Это позволит получить численные значения параметров системы при взрывном выбросе водного потока (сценарий 1).

Основываясь на соотношении (6.2) и полагая начальную высоту волны, равной например $u_{\max}=7$ м (волна именно такой максимальной высоты наблюдалась в г.Крымск при катастрофическом наводнении 07.07.2012), а эффективный размер области начального возмущения ℓ равным 2.93 м (ср. с данными [174]), имеем:

$$u(x) = 7 \operatorname{ch}^{-2} \left(x \frac{1}{2.93} \right). \quad (6.6)$$

Произведя интегрирование в пределах полной (продольной) длины ($x=20$ м) солитона, т.е. учитывая дистанцию, на которой была локализована распространяющаяся катастрофическая водная масса и определяемая пределами интегрирования по x ($b-a$) = 20 м (ср. с данными [174]), получаем для области $S(x)$ солитонным объектом в продольном направлении по одному срезу поперечного сечения канала/русла реки на поверхности:

$$S = \int_a^b q(x) dx = 40.9 \text{ м}^2. \quad (6.7)$$

Считая солитонный режим одинаковым по ширине (координата w) канала (равной для определенности $w=10$ м), оцениваем объем водной массы в данной модели

катастрофической уединенной волны (солитона) простым умножением соотношения (6.7) на $w=10\text{м}$. Тогда этот объем равняется $\sim 409 \text{ м}^3$ по всему отрезку канала длиной 20м и шириной 10м . Если эта волна из-за подземного выброса формируется, например за 4с, то для среднего дебита Q' получаем значение $Q' = 102 \text{ м}^3/\text{с}$.

Если связать этот водный выброс с подземным источником, то оценочный анализ давлений для выброса подземных вод в русле реки/канала можно в первом приближении провести, считая, что по глубине сечение выброса совпадает с сечением вертикального канала/системы трещин, т.е. в рамках нашей модели водный выброс формируется над обычным (спокойным) уровнем воды в реке в режиме его образования на дне реки при непосредственном выбросе из подземного канала/системы трещин (для конкретности – с консолидированным диаметром системы трещин $\sim 1\text{м}$).

Тогда приходим к следующим значениям (ср. с [175]): по факту произошедшего водного выброса в атмосферу – давления $P'_1 \approx 62.1 \text{ атм}$ (по принятым условиям русла реки глубиной 5 м – на дне реки давление 63.6 атм), а давление в глубине водного горизонта, с которого произошел выброс P'_2 приблизительно равно для двух возможных горизонтов (но неизвестных по произошедшему и наблюдаемому на поверхности событию) значениям 64.8 атм и 78.6 атм, соответственно для глубин трещин 12м и 150м (за атмосферное давление взято давление в 1 атм).

Таким образом, механизм произошедшего катастрофического водного события для принятых условий реализуется при значениях давлений в двух подземных водных горизонтах $\sim 65 \text{ атм}$ или $\sim 79 \text{ атм}$.

Эти требуемые давления в подземных водных горизонтах могут возникать в условиях интенсивных атмосферных осадков, из-за которых происходит резкое увеличение объема и скорости движения водных потоков как на поверхности, так и в подземных горизонтах. Кроме того, внезапно возникшие быстрые поверхностные водные массы проводят к локальному понижению давления в руслах рек, по которым они распространяются (из-за соотношения Бернулли) по сравнению с состоянием водного речного потока в спокойных условиях, возникшая таким образом обратная связь в единой 3D водной транспортной системе может способствовать внезапному

выбросу подземных вод на земную поверхность. В дальнейшем появляющаяся такая гидравлическая связь может способствовать довольно длительному изливу вод наружу из подземных источников.

Хотя данные оценки являются достаточно грубыми, т.к. содержат множество допущений и идеализаций, в частности, по топологии транспортных каналов для водных потоков, они, однако, позволяют примерно оценить порядок требуемых давлений в водном горизонте для ожидаемого/наблюдаемого объема водного/селевого потока при выбранных параметрах. Отметим, что в величине этого общего глубинного давления, требуемого для формирования рассматриваемого катастрофического явления на поверхности, значение давления, затрачиваемого на подъем воды с глубины канала на поверхность, в оцениваемых случаях может играть второстепенную роль из-за доминирующей роли сопротивления водному потоку, всегда существующему (по разным причинам, в т.ч. из-за «засоренности») в канале выброса. По этой причине, а также из-за эффекта гидроудара (выброса водной массы в расширяющуюся полость) [176], наблюдаемые выбросы в атмосферу могут иметь намного меньшую высоту по сравнению с ожидаемой, исходя из прямой оценки P'_2 , что обычно и наблюдается.

Полученные глубинные давления (более 60 атм) возможны за счет различных внешних причин (в т.ч. сейсмического характера), которые в рамках нашей модели можно формально учесть в скорости подземного потока, что фиксирует фактический дебит такого «критического» водного горизонта. Зная характерный размер уже горизонтальной трещины (по которой идет подземный поток), можно определить величину этого дебита и/или скорость потока [175].

Выводы

В данном параграфе рассмотрена модель формирования объема селя и проанализированы особенности гидродинамического механизма распространения водных потоков в сложных гидравлических схемах с глубинными и поверхностными каналами. Проводится их аналогия с возможным взаимодействием подземных и поверхностных вод в процессе развития водного/селевого потока в рамках функционирования единой 3D-системы трещиноватости горного массива,

являющейся транспортной системой для транзита водных масс, формирующихся из разных источников (в т.ч. атмосферных осадков).

Обсуждение проведено в рамках ряда гидродинамических моделей с учетом нелинейных волновых гидродинамических процессов, в частности, – солитонной модели уравнения Кортевега де Фриза и его модификаций. Дальность распространения и скорость селя в значительной степени определяются параметрами, характеризующими его солитонную природу. Описаны гидравлические схемы, по которым может формироваться выброс глубинных вод, оказывающий принципиальное влияние на формирование и распространение поверхностных водных потоков. Ключевой параметр этих явлений – давление в каналах водных систем, необходимое либо для внезапного водного выброса на поверхность (сценарий 1) и/или либо для другого случая (сценарий 2), когда подпитка поверхностных вод глубинными водами происходит непрерывно. Первый случай соответствует формированию солитонных режимов распространения поверхностных потоков; В рамках предложенной модели воздействие селя происходит не однократно, а многократно по количеству родившихся солитонов. Второй случай соответствует самоизливу в условиях, когда из-за увеличения эффективной нелинейности системы при развитии нелинейного волнового процесса происходит его усиление.

Если говорить о сопоставлении данных двух моделей с реально происходящими природными событиями, то первый случай, по-видимому, может быть ассоциирован с внезапным катастрофическим наводнением в г. Крымск (июль 2012г.), а второй – с длительными по времени и по охвату территории наводнениями в бассейне реки Амур (август-сентябрь 2013г.).

В концептуальном аспекте речь идет о контроле развития нелинейных динамических процессов и о возможностях управления этими явлениями по аналогии с управляющими системами для технически сложных и гидравлических нелинейных объектов с переменными/случайными параметрами, в т.ч. порогового типа. Динамические процессы в них являются пространственно распределенными в условиях реализации обратной связи (положительной и/или отрицательной) [176,177].

Данный подход может быть полезен при формулировании дополнительных принципов защиты от селевых потоков с учетом рассмотренных механизмов селеобразования на некоторых потенциально опасных территориях, где подземные водные горизонты близко находятся от поверхности земли с соответствующей морфологией горного ландшафта и сложившихся климатических условий в некотором временном интервале.

6.2. Особенности распространения нервного импульса[178, 179]

Введение

Влияние физики на прогресс в биологии очень существенно. Физические законы и методы исследования позволяют совершенствовать имеющиеся в биофизике методы исследования и развивать новые методы. В физике изучались близкие к распространению нервного импульса системы. Однако биологическая среда характеризуется большим разнообразием возможных режимов активности. Особенно интересно выяснение высокой эффективности переноса энергии и информации в биологических системах. Перенос энергии должен осуществляться нейтральными возбуждениями: солитонами, экситонами, фононами. В биологических системах солитоны соответствуют связанному состоянию внутримолекулярных возбуждений и локальной деформации цепи. Такие состояния возможны при условии, что их внутренняя энергия меньше суммы энергий составляющих элементов.

Развитие теории возбудимых сред связано со значительными трудностями, т.к. кроме случайного распределения параметров, необходимо принимать во внимание нелинейный характер среды. Поэтому не удивительно, что подходящий формализм до сих пор разработать не удалось. Однако сложность задачи окупается ее практической ценностью.

Нервные волокна служат каналами передачи информации от головного мозга к мышцам посредством распространения нервного импульса. Важнейшим свойством нервного импульса является его способность распространяться вдоль волокна без затухания и с постоянной скоростью. Если импульс, несущий некоторую информацию, подвергнется действию больших диссипативных сил, он придет к месту назначения ослабленным. Аналогично, импульс, испытавший значительную

дисперсию, придет к месту назначения столь размытым и искаженным, что информация будет потеряна. Однако если импульс распространяется в виде солитона, он может переносить информацию на большие расстояния без искажений и без заметной потери интенсивности. Нервный импульс – это единый электрохимический процесс распространения динамического возбуждения, состоящий из электрической составляющей – потенциала действия (солитонная составляющая), химических явлений (движение ионных потоков), структурных явлений (поведение ионных каналов). Однако в настоящее время нет общепринятой теории явлений, происходящих в нервных волокнах живых существ при передачи по ним информации. Как и в случае солитонов, для нервного импульса имеется набор разрешенных скоростей, стабильная форма, не зависящая от условий формирования [180]. Однако имеются существенные отличия. Солитоны представляют собой возбуждения, возникающие в динамической системе, а нервный импульс возникает и распространяется в активной среде и является диссипативным процессом. Тем не менее интересно приложить методы теории солитонов к этой области.

Исследования сложных биологических систем неизбежно связаны со значительными упрощениями, отражающими главные свойства рассматриваемых явлений. В связи с этим, солитоны будут описываться нами в квазиодномерных моделях.

Теория и полученные результаты

Выяснение механизмов распространения нервного импульса является одной из актуальнейших задач биофизики нервного импульса. Для координации действия различных органов человека необходима слаженная работа самой сложной системы организма человека-нервной системы. Ее основная функция-обеспечение прохождения электрического импульса по нервному волокну. Исследования в области физиологии показали, что прохождение нервного импульса по нейронным сетям имеет автоволновой характер. Это позволяет моделировать такие процессы в рамках солитонной теории, которая достаточно точно описывает форму, скорость распространения нервного импульса, неизменность во времени его параметров, локальность процесса.

Согласно электрической теории, по нервному волокну распространяется электрохимическая реакция, которая порождает бегущий импульс напряжения. Импульс может образоваться и распространяться только потому, что в нервном волокне существует нелинейный элемент, который подавляет малые отклонения от нормального состояния и усиливает большие. В данном случае уравнивается нелинейная зависимость проницаемости мембраны, по которой распространяется нервный импульс, от величины импульса и диффузия ионов через мембрану. В работе [181] показано, что такая нелинейность действительно может уравновесить диффузию, и в результате появится бегущая с постоянной скоростью и формой – уединенная волна, т.е. солитон. Солитонная составляющая нервного импульса-потенциал действия [182]. Ввиду того, что нервный импульс устойчив, распространяется без искажений и существенных потерь энергии [183], его движение моделируем как движение солитона Кортевега де Фриза. В этом случае он описывается нелинейным дифференциальным уравнением вида [150]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (6.8)$$

где второй член характеризует слабую (кубическую) дисперсию, а третий член – нелинейность. Граничные условия $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$; $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=L} = 0$ соответствуют волокну с электрически изолированными границами, расположенными в точках 0, L.

Решение этого уравнения имеет вид (глава 3.5)

$$u(t, x) = \frac{u_{\max}}{ch^2\left(\frac{x - v \cdot t}{\Delta}\right)}, \quad (6.9)$$

где u – потенциал действия, $u_{\max}$ – амплитуда потенциала действия, v – модуль его скорости, Δ – ширина, определяемая из соотношения

$$\Delta = \sqrt{12\beta / u_{\max}}. \quad (6.9a)$$

Как видно из решения (6.9), скорость распространения импульса растет с увеличением амплитуды, в свою очередь, из (6.9a) следует, что ширина солитона убывает с ростом амплитуды. Таким образом, с течением времени солитоны

выстраиваются в ряд по убывающей амплитуде и возрастающей ширине. При этом при столкновении не наблюдаются неупругие эффекты, т.е. после столкновения солитоны выходят без искажения.

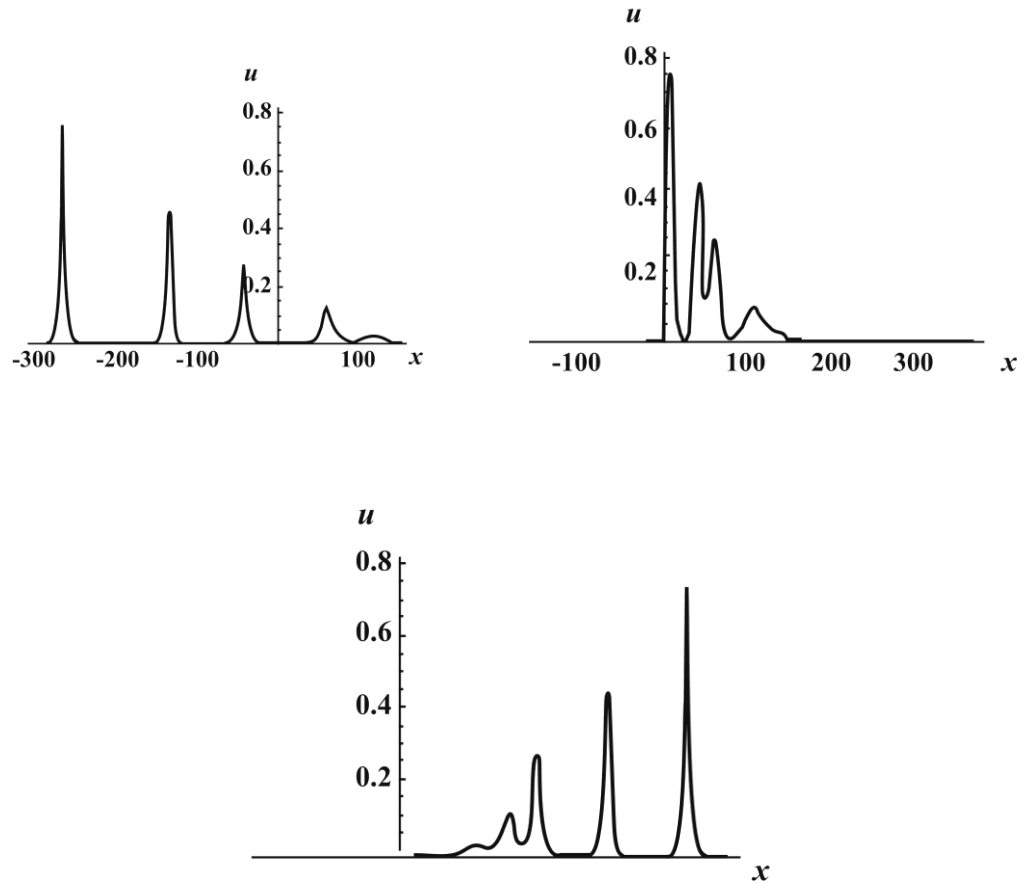


Рис.6.7.Самоорганизация солитонов с течением времени.

Нами проведен численный эксперимент по эволюции возникновения солитонов и закономерностям их движения. Рис.6.7

Как показал численный эксперимент, стабильная форма солитонов не зависит от выбора начальных условий. Нами были выбраны начальные возмущения как в виде

$$u(x, 0) = u_0 \exp\left(-\frac{x^2}{l^2}\right) \quad (6.10)$$

(l -линейный размер начального возмущения), так и в виде косинуса гиперболического. Со временем импульсы в обоих случаях принимали солитонный характер. Эти данные согласуются с [184]. Очевидно, начальные условия связаны с сигналом, полученным от головного мозга к проводящим путям и зависят от состояния органов или психического статуса человека.

Английскими физиологами А. Ходжкином и А. Хаксли [185] на основе многочисленных опытов была построена теория, в которой было установлено, что форма и скорость импульса на зависят от величины раздражения нерва. Если раздражение сильное, то выпускается подряд несколько импульсов. Если оно слабое, то импульс по нерву вообще не пойдет, минимальная сила раздражения называется пороговой. Каждый импульс переносит одну единицу информации и приемные устройства считывают, сколько таких “элементарных частиц информации” поступило и за какое время. Все это напоминает движение солитонов.

В уравнении Кортевега де Фриза степень нелинейности характеризуется безразмерным параметром $\sigma = l(u_0 / \beta)^{1/2}$, где l – линейный размер начального возмущения для типичного возмущения (6.9).

Численный эксперимент показал, что при $\sigma \leq \sigma_{\min}$ солитоны отсутствуют, но возникают синусоидальные осцилляции. Смотри, например, Рис. 3.2.

Начиная с некоторого значения σ возникают солитоны (пороговый характер). При дальнейшем увеличении σ число рождающихся солитонов растет, могут рождаться одновременно 2,3 и большее число солитонов (Рис.6.8).

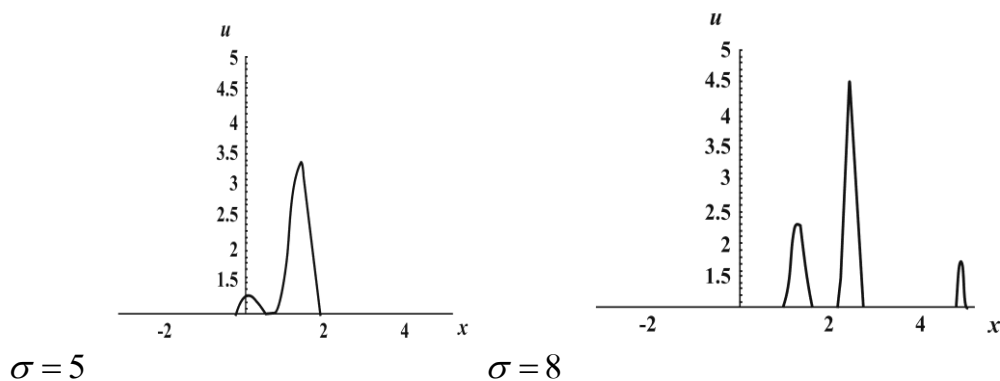


Рис. 6.8. Рождение различного числа импульсов для разных σ

Известно, что в живом организме нервные импульсы, движущиеся по аксону навстречу друг другу, сталкиваясь, аннигилируют, что обеспечивает однонаправленную передачу сигналов от рецепторов в центральные отделы нервной системы. Однако в работе [186] на основе численных экспериментов с уравнениями Ходжкина Хаксли предсказан новый эффект: при определенных значениях параметров возможно отражение сталкивающихся нервных импульсов, т.е. солитоноподобный режим. В работе [187] на основе численных экспериментов с системой уравнений в частных производных МакАллистера-Нобла выявлены солитоноподобные режимы взаимодействия нелинейных импульсов возбуждения, управляющих ритмикой сердечных сокращений - отражение сталкивающихся импульсов вместо их обычного гашения. Механизм отражения заключается в следующем: в некотором диапазоне параметров системы распространяющийся импульс представляет собой «дублет», который состоит из высокоамплитудного импульса-лидера и сопровождающей этот импульс низкоамплитудной (подпороговой) волны. При столкновении лидеры аннигилируют, столкнувшиеся низкоамплитудные волны, суммируясь, становятся надпороговыми, в результате в месте столкновения потенциал достигает надпорогового значения, что вызывает регенерацию «дублетов», которые разбегаются в разные стороны.

Нами на основе уравнения Кортевега де Фриза моделировано столкновение двух солитонов, которое происходит в аналогичном режиме (Рис.6.4).

Обнаруженные солитоноподобные явления могут оказаться полезными при расшифровке механизмов нарушения сердечного ритма. Именно с отражением импульсов возбуждения связывают происхождение некоторых сердечных аритмий.

Как известно, солитон Кортевега де Фриза под действием трения постепенно замедляет движение, уменьшая высоту и расплываясь. Время жизни обратно пропорционально силе трения. Аналогично при изменении сечения, при ветвлении нервных волокон или возникновении неоднородности прохождение нервного импульса может быть затруднено или даже полностью заблокировано. В уравнении это может быть учтено как наличие диссипации [184].

Нами исследована эволюция солитонов при наличии диссипации и показано, что время жизни солитона может изменяться, причем при увеличении коэффициента диссипации μ затухание происходит быстрее (Рис.3.3). В данном случае затухание амплитуды нервного импульса происходит при изменении сечения, ветвлении нервных волокон, возникновении неоднородности и других нарушениях в нервных волокнах.

Таким образом, в различных условиях могут быть реализованы различные режимы распространения нервных импульсов. Солитоноподобные решения описывают широкий круг явлений, которые сопровождают передачу нервных импульсов: работа сердца, автоколебания. Солитонная модель позволяет также описывать мышечные и кровеносные системы сердца [188]. Изменяя параметры солитонной модели, можно моделировать патологии нервных проводящих путей, сосудистой и мышечной системы сердца. Возможная патология в сосудистой системе изменяет спектральную картину солитонных волн и позволяет диагностировать различные заболевания нервных путей и сердечно-сосудистой системы. Солитонный подход открывает большие возможности в исследовании сложных процессов в живых организмах. Математическое моделирование предоставляет аналитические результаты и способ выявления и идентификации различных биологических процессов.

Выводы к главе 6

Рассмотрена модель формирования объема селя и проанализированы особенности гидродинамического механизма распространения водных потоков в сложных гидравлических схемах с глубинными и поверхностными каналами. Проводится их аналогия с возможным взаимодействием подземных и поверхностных вод в процессе развития водного/селевого потока в рамках функционирования единой 3D-системы трещиноватости горного массива, являющейся транспортной системой для транзита водных масс, формирующихся из разных источников (в т.ч. атмосферных осадков).

Обсуждение проведено в рамках ряда гидродинамических моделей с учетом нелинейных волновых гидродинамических процессов, в частности, – солитонной

модели уравнения Кортевега де Фриза и его модификаций. Описаны физические схемы, по которым может формироваться выброс глубинных вод, оказывающий принципиальное влияние на формирование и распространение поверхностных водных потоков. Ключевой параметр этих явлений – давление в каналах водных систем, необходимое либо для внезапного водного выброса на поверхность и/или либо для случая, когда подпитка поверхностных вод глубинными водами происходит непрерывно. Первый случай соответствует формированию солитонных режимов распространения поверхностных потоков; второй – самоизливу в условиях, когда из-за увеличения эффективной нелинейности системы при развитии нелинейного волнового процесса происходит его усиление. Если говорить о сопоставлении данных двух моделей с реально происходящими природными событиями, то первый случай может быть ассоциирован с катастрофическим наводнением в г. Крымск (июль 2012г.), а второй – наводнениями в бассейне реки Амур (август-сентябрь 2013г.).

Численное моделирование процесса селеобразования при наличии конкретных параметров для данной территории позволит оценить ожидаемую мощность селя, его разрушительную силу и прогнозировать необходимые защитные мероприятия.

В различных условиях могут быть реализованы различные режимы распространения нервных импульсов в организме. Солитоноподобные решения описывают широкий круг явлений, которые сопровождают передачу нервных импульсов: работа сердца, автоколебания, мышечные и кровеносные системы сердца. Изменяя параметры солитонной модели, можно моделировать патологии нервных проводящих путей, сосудистой и мышечной системы сердца, т.к. они изменяют спектральную картину солитонных волн, что позволяет диагностировать различные заболевания нервных путей и сердечно-сосудистой системы. Солитонный подход открывает большие возможности в исследовании сложных процессов в живых организмах. Математическое моделирование предоставляет аналитические результаты и способ выявления и идентификации различных биологических процессов.

**ЧАСТЬ III. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
ОСОБЕННОСТЕЙ ДИНАМИКИ ДИСЛОКАЦИЙ В
ПОЛУПРОВОДНИКАХ И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАПРЯЖЕНИЙ ПРИ
ВНЕШНЕМ НАГРУЖЕНИИ. ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПО
ПОЛУЧЕНИЮ ПОДЛОЖЕК ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУР
КРЕМНИЙ НА САПФИРЕ.**

**ГЛАВА 7. РЕЖИМЫ ФОРМИРОВАНИЯ ДИСЛОКАЦИОННЫХ
СТРУКТУР В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ.**

7.1. Особенности движения дислокаций в полупроводниках

Введение

Теория дислокаций является важной и существенной частью физики твердого тела. Гипотеза о дислокациях как дефектах кристаллической решетки, определяющих механические свойства кристаллов, экспериментально доказана [98]. Доказано также, что дислокации влияют на электрические, магнитные, тепловые и другие свойства твердых тел. Поэтому в настоящее время рассмотрение задач физики твердого тела, таких, как динамика дислокаций, их взаимодействие друг с другом, вопросы деформационного упрочнения, роль дислокаций в гетероструктурах и т.д. невозможно без изучения свойств дислокаций. Эти исследования актуальны также при изучении проблем нанофизики. Например, несоответствие параметров решеток в многослойных низкоразмерных структурах приводит к тому, что приграничные осажденные методом молекулярно-лучевой эпитаксии слои являются напряженными. Когда толщина эпитаксиального слоя увеличивается, энергия распределенного упругого поля достигает некоторой критической величины, при которой энергетически более предпочтительным является появление дислокаций несоответствия. При этом релаксация упругих напряжений с образованием дислокаций несоответствия в большинстве случаев приводит к искажению электрических и оптических характеристик приборов.

В связи с этим для отработки технологии роста большой интерес представляет исследование границы раздела в гетероструктурах на наличие дислокаций,

исследование возможности минимизации их количества, изучение их динамики и кинематики.

В качестве упрощенной модели дислокации нами используется модель Френкеля-Конторовой в виде одномерных цепочек шариков, связанных пружинками и помещенных в периодическую среду – периодическую потенциальную энергию атомного ряда, обусловленную наличием подложки. Напряжение Пайерлса определяется выражением [98]

$$\sigma_p = \frac{\pi W_p}{ab}$$

где W_p - энергия Пайерлса, $a = b/2$, a - постоянная решетки, b - модуль вектора Бюргерса. Для данного типа кристаллов значение σ_p уменьшается с ростом температуры и увеличением ширины дислокации. Энергетический барьер Пайерлса σ_p находится в пределах от $10^{-2} \mu$ (ковалентные кристаллы) до $10^{-4} \mu$ (плотнупакованные металлы). Эта модель позволяет анализировать и качественно описывать процесс скольжения дислокаций. Использование переменного потенциала решеточных смещений (потенциал Пайерлса) приводит к необходимости рассматривать на дислокационных линиях перегибы. Перегибы- это конфигурации на дислокационной линии, лежащие поперек барьера Пайерлса (одиночные перегибы). Кроме того, имеются парные перегибы: (Рис.7.1).

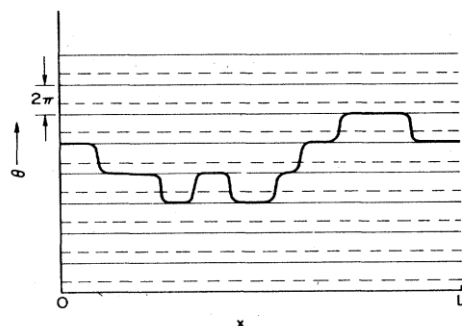


Рис.7.1.Конфигурации перегибов.(Тонкие сплошные линии – долины рельефа Пайерлса, пунктирные – барьеры Пайерлса)

Расчеты энергии в дислокационной теории часто проводят в приближении линейного натяжения дислокаций. Дислокация рассматривается как гибкая натянутая струна и вводится понятие линейного натяжения туго натянутой струны. Во многих случаях это приближение является применимым (если не принимать во внимание искажение в области ядра дислокации [98]). Однако, т.к. собственная энергия отрезка дислокационной линии зависит от его взаимодействия с остальной частью линии (конфигурации), то трудно определить эффективное линейное натяжение. Во многих случаях, аппроксимируя реальную дислокационную конфигурацию ломаной линией, получается значение энергии, весьма близкое к энергии реальной конфигурации. Всегда имеется некоторая неопределенность, связанная с энергией ядра, хотя в большинстве случаев упругая энергия составляет большую часть полной энергии, и приближение вполне оправдано. При учете барьеров Пайерлса при 0К дислокация лежит параллельно долине Пайерлса и находится в равновесии. Однако при конечных температурах равновесной конфигурации соответствует добавление некоторого количества случайно расположенных пар перегибов. Так как такие перегибы возникают при конечных температурах, они называются термическими перегибами. Во многих случаях, особенно для плотноупакованных металлов, предполагается, что энергия активации бокового перемещения перегиба настолько мала, что перегиб может перемещаться свободно вдоль дислокации под действием термической активации. Например, экспериментальные работы по внутреннему трению [91] показывают, что перегибы могут двигаться при очень низких напряжениях до весьма низких температур. Большинство оценок [98] дает для ширины перегибов $d \approx (5-10)b$, $\vec{b}$ - вектор Бюргерса. В алюминии при малых плотностях дислокаций (10^2-10^3) см⁻², когда взаимодействием между ними можно пренебречь, дислокации наблюдаются в виде прямых линий вдоль направлений с малыми индексами, указывая на влияние барьера Пайерлса. Так как в кубических кристаллах дислокации остаются подвижными вплоть до температур, близких к абсолютному нулю [98] предполагается, что подвижность дислокаций связана с движением перегибов. Такой процесс движения дислокаций называется процессом термической активации. Движение дислокаций посредством термической активации может реализовываться в

широком диапазоне экспериментальных условий, если энергия активации $\sim 1 \text{ эВ}$ [190]. При этом скорость движения дислокаций v связана с макроскопической скоростью относительных деформаций $\dot{\varepsilon}$ соотношением $\dot{\varepsilon} = \rho b v$, ρ – плотность движущихся дислокаций [98]. Например, в алюминии при 300К, $\dot{\varepsilon} = 10^{-4} \text{ с}^{-1}$, $\rho = 10^6 \text{ см/см}^3$, $\sigma = 10^{-5} \mu$ (μ – модуль сдвига), $v \approx 10^{-2} \text{ см/с}$.

Преодоление сил динамического торможения дислокаций требует приложения напряжения

$$\sigma = \frac{B v}{b} = B \frac{\dot{\varepsilon}}{\rho b^2}.$$

В некоторых случаях вклад σ в общее сопротивление кристалла пластический деформации может быть оценен по зависимости напряжения течения от скорости деформации. В частности, при деформации кристаллов с высокой скоростью деформаций ($\dot{\varepsilon} \geq 10^3 \text{ с}^{-1}$) можно положить, что все барьеры преодолеваются без термических флуктуаций.

Динамические эффекты могут наблюдаться только в чистых кристаллах с относительно высоким рельефом Пайерлса при скоростях дислокаций вблизи нижней границы скоростей, когда кинетическая энергия дислокаций сопоставима с энергией Пайерлса. При этом рельеф Пайерлса проявляется в радиационном торможении дислокаций [28].

Однако при очень низких температурах наблюдается аномально высокая скорость ползучести [106], которая может быть объяснена на основе квантово-механических моделей. Для узких и высоких барьеров наблюдается туннельный эффект, для широких и низких – процесс термической активации.

Скорость дислокаций в кристаллическом рельефе Пайерлса определяется временем флуктуационного зарождения перегибов на дислокации (солитонов) и их дальнейшего расширения. При высоких температурах зарождение перегибов осуществляется посредством термической активации. При низких температурах движение дислокаций приобретает квантовый характер и осуществляется туннелированием через барьеры Пайерлса. В переходной области участвуют оба

механизма: туннелирование с предварительной активацией [191]. В [191] рассчитана температурная зависимость вероятности образования солитонов в области перехода от термически активированного к туннельному механизму их зарождения. В [192] определен температурный интервал проявления квантовых эффектов. В [26] показано, что диссипативные процессы уменьшают вероятность квантового туннелирования. Показано также, что при достаточно высоких температурах квантовое туннелирование несущественно, и барьер преодолевается активационно. При низких температурах более вероятно туннелирование через барьер.

Типы конфигураций дислокаций

Дислокации могут быть разных типов. Они описываются разными моделями. Выше мы рассмотрели дислокации Френкеля-Конторовой. В настоящей главе рассмотрим краевые и винтовые дислокации [189]. Наиболее простой способ введения дислокаций в кристалл – деформация сдвига.

При деформации сдвига дислокация – это линейное несовершенство, образующее внутри кристалла границу зоны сдвига. Скольжение краевой дислокации всегда происходит по плоскости, в которой находятся линия дислокации и вектор сдвига. Винтовая дислокация может скользить в любой кристаллографической плоскости, которая содержит линию дислокации и вектор сдвига. В отличие от краевой дислокации, которая всегда перпендикулярна вектору сдвига, винтовая дислокация параллельна вектору сдвига. Линия дислокации должна замыкаться внутри кристалла или оканчиваться на его поверхности. Поэтому могут образовываться смешанные дислокации, а также криволинейные дислокации.

Мерой искаженности кристаллической решетки, обусловленной присутствием дислокации, является вектор Бюргерса.

Вектор Бюргерса $\vec{b}$ нормален к линии краевой дислокации и параллелен линии винтовой дислокации. Вектор Бюргерса смешанной дислокации разлагается на краевую и винтовую компоненты. Вектор Бюргерса и линия дислокации однозначно определяют возможную плоскость скольжения дислокации.

Дислокация – центр поля внутренних напряжений, убывающих в увеличении расстояния от дислокации. В ядре дислокации смещения атомов очень велики, и

теория упругости не работает. За пределами ядра дислокации деформации, поля напряжений, энергия дислокации описываются уравнениями теории упругости.

Движение дислокаций вызывает пластическую деформацию. Поэтому вводят понятие некоторой силы, действующей на дислокацию. В общем случае на дислокацию действуют силы разного происхождения: внешние силы, приложенные к поверхности кристалла, внутренние силы от действия поля напряжений вокруг соседних дислокаций, примесей и других несовершенств. Внешняя сила, действующая на единицу длины дислокации, равна произведению вектора Бюргерса на касательное напряжение в плоскости скольжения. Эта сила перпендикулярна линии дислокации и направлена к той части плоскости скольжения, где скольжение еще не происходило. Вокруг дислокации решетка деформирована, и поле напряжений является источником силы, действующей на соседнюю дислокацию. Как и в случае внешней силы, внутренние напряжения вокруг одной дислокации обуславливают существование силы, действующей на единицу длины другой дислокации и равной произведению вектора Бюргерса на составляющую касательного напряжения в направлении этого вектора.

Когда много одноименных дислокаций располагаются одна под другой, такую устойчивую конфигурацию называют дислокационной стенкой.

При медленном движении дислокации динамические напряжения и смещения достаточно хорошо описываются решениями для статических конфигураций. Однако при больших скоростях дислокаций необходимо учитывать динамические эффекты, как, например, сжатие контуров постоянного сдвигового напряжения в направлении движения дислокации, учет силы радиационного трения в случае равноускоренного движения, импульсного ускорения и колебательного движения дислокаций.

7.2. Инверсия отношений скоростей винтовых и 60^0 -ых дислокаций во внешних механических полях для кристаллов кремния с примесями и без примесей [193]

Нами исследовалась подвижность винтовых и 60^0 -ных дислокаций в примесных и беспримесных кристаллах кремния.

Эксперименты проводились на образцах размерами 20x15x0,5 мм при ориентации внешних граней (110), (114) и (221), соответственно. Нагружение осуществлялось сжатием противоположных поверхностей ($\bar{1}\bar{1}4$) в интервале температур 550⁰-700⁰ при напряжении до 10⁷ Н/м.

Наблюдения движения дислокаций проводились на установке визуализации рентгенографических изображений. Окончательная картина регистрировалась фотографически.

При описанной схеме нагружения дислокации возникают в системе скольжения $[[0\bar{1}1]]$ (111) в виде гексагональных полупетель с изломом (для этой системы фактор Шмида максимален и равен $m=0,45$). В процессе движения дислокаций точка излома движется внутрь кристалла вдоль направления, определяемого углом φ , который зависит от отношения скоростей винтовых и 60⁰-ных компонент дислокаций. С помощью разработанной нами методики [203], позволяющей из данных эксперимента определять отношение v_{60^0}/v_b , получены следующие результаты

$T(K)$	$\sigma(H/m^2)$	V_{60^0}/V_b
853	$7 \cdot 10^6$	0,8
973	$8 \cdot 10^6$	1,4

Таблица 2.

Как видно из таблицы 2, при изменении внешних параметров в определенной области температур и напряжений происходит инверсия скоростей винтовых и 60⁰-ных дислокаций. Эффект инверсии отношения скоростей дислокаций при изменении напряжения или температуры наблюдался также рядом авторов, при этом имела место зависимость эффекта от концентрации примесей [194].

Для интерпретации эффекта воспользуемся приближением линейного натяжения дислокаций.

Эквивалентом уравнения линейного натяжения туго натянутой струны в случае дислокации является уравнение [98]:

$$\Phi = \frac{W_c}{L} + \frac{\partial^2 \frac{W_c}{L}}{\partial \beta^2}, \quad (7.1)$$

где Φ – линейное натяжение, β – угол между линией дислокации и вектором

Бюргерса, W_c/L – собственная энергия дислокации на единицу длины

$$W_c = \frac{\mu}{4\pi} \left[(\vec{b} \vec{\xi})^2 + \frac{(\vec{b} \times \vec{\xi})^2}{1-\nu} \right] L \ln \frac{L}{e\rho_0}, \quad (7.2)$$

W_c – собственная энергия прямого отрезка дислокации произвольного типа, μ – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, $\vec{b}$ – вектор Бюргерса, $\vec{\xi}$ – единичный вектор, определяющий направление линии дислокации, L – длина дислокации, ρ_0 – параметр обрезания, устраняющий расходимость. Расходимость возникает в результате того, что линейная теория упругости не может описывать сильные искажения решетки в области ядра дислокации. Поэтому при расчетах ограничиваются областью, где применима линейная теория. Математически это соответствует введению параметра обрезания. Таким образом, результаты, основанные на аналогии с линейным натяжением, справедливы при $L \gg \rho_0$.

Заменяя для анизотропных кристаллов изотропные параметры μ и ν , соответственно, энергетическими параметрами K_b и K_{60° , $\mu \rightarrow K_b$, $(\mu/1-\nu) \rightarrow K_{60^\circ}$ из (7.1), (7.2) для 60° -ной и винтовой дислокаций получим

$$\frac{W_b}{L} = \frac{K_b}{4\pi} b^2 \xi^2 \ln \frac{L}{e\rho_0} \cos^2 \beta + \frac{K_{60^\circ}}{4\pi} b^2 \xi^2 \ln \frac{L}{e\rho_0} \sin^2 \beta, \quad (7.3)$$

$$\Phi_{60^\circ} = \frac{b^2 \xi^2}{16\pi} \ln \frac{L_{60^\circ}}{e\rho_0} (5K_b - K_{60^\circ}), \quad (7.4)$$

$$\Phi_b = \frac{b^2 \xi^2}{4\pi} \ln \frac{L_b}{e\rho_0} (2K_{60^\circ} - K_b). \quad (7.5)$$

Определим K_b и K_{60° для дислокаций, лежащих в определенных кристаллических направлениях кубических кристаллов.

Для лежащей вдоль направления $[\bar{1}01]$ 60° -ной дислокации с вектором Бюргерса $|\vec{b}| = \frac{a}{2}[\bar{1}10]$ можно положить [195]:

$$x = [0\bar{1}0], \quad y = \frac{1}{\sqrt{2}}[101], \quad z = \frac{1}{\sqrt{2}}[\bar{1}01]$$

При этом

$$K_b = \sqrt{c_{44}c_{55}}$$

$$K_{60^\circ} = \left(\sqrt{c_{11}c_{22}} + c_{12} \right) \left[\frac{c_{66}(\sqrt{c_{11}c_{22}} - c_{12})}{c_{22}(\sqrt{c_{11}c_{22}} + c_{12} + 2c_{66})} \right]^{1/2}$$

где c_{ij} –упругие постоянные,

$$c_{11} = c'_{11}, c_{12} = c_{13} = c'_{12}, c_{22} = c_{33} = c'_{11} + \frac{H}{2}, c_{23} = c'_{12} - \frac{H}{2}, c_{44} = c'_{44} - \frac{H}{2}, c_{55} = c_{66} = c'_{44}, H = 2c'_{44} + c'_{12} - c'_{11}$$

(значения c'_{ij} взяты из [196], где представлены температурные зависимости упругих постоянных). Выбирая, например, $T = 973K$, получим:

$$K_b = 6,1 \cdot 10^{10} \text{ Н / м}^2, \quad K_{60^\circ} = 7,9 \cdot 10^{10} \text{ Н / м}^2.$$

Предварительно рассмотрим дислокации в беспримесных кристаллах. В условиях равновесия силы линейного натяжения, которые стремятся сократить длину дислокации, уравниваются приложенным напряжением σ , т.е. справедливо соотношение:

$$b\sigma = \frac{\Phi}{L_{\text{дисл.}}} \quad (7.6)$$

Для 60° -ного и винтового отрезков дислокаций, с учетом (7.4), (7.5), это равенство принимает вид:

$$b\sigma = \frac{b^2 \xi^2}{16\pi} \ln \left\{ \frac{4\tau \left(v_b - \frac{v_{60^\circ}}{2} \right)}{\sqrt{3}e\rho} \right\} \left(5K_b - K_{60^\circ} \right) \frac{\sqrt{3}}{4\tau \left(v_b - \frac{v_{60^\circ}}{2} \right)}, \quad (7.7)$$

$$b\sigma = \frac{b^2 \xi^2}{16\pi} \ln \left\{ \frac{2v_{60^\circ} \tau}{\sqrt{3}e\rho} \right\} \left(2K_{60^\circ} - K_b \right) \frac{\sqrt{3}}{2v_{60^\circ} \tau}, \quad (7.8)$$

где v_{60^0} , v_b – скорости винтовой и 60^0 -ной компонент, соответственно, τ – время развития дислокации.

Из (7.7) и (7.8), используя условие $L \gg \rho$, после преобразований получим

$$\frac{v_{60^0}}{v_b} = \frac{8(2K_{60^0} - K_b)}{(7K_{60^0} + K_b)}, \quad (7.9)$$

т.е. отношение скоростей определяется упругими параметрами. При $K_{60^0} > K_b$ скорость 60^0 -ной компоненты больше скорости винтовой. Нами были подсчитаны энергетические факторы дислокаций K_b, K_{60^0} в области температур от 293 К до 1173 К. С уменьшением температуры K_b и K_{60^0} растут, причем во всем интервале температур $K_{60^0} > K_b$, а отношение v_{60^0}/v_b остается постоянным ($v_{60^0}/v_b \approx 1,25$).

Таким образом, в беспримесных кристаллах скорость 60^0 -ных дислокаций больше скорости винтовых, и соотношение скоростей сохраняется во всем температурном интервале. Следует, однако, отметить, что в реальных кристаллах кремния свойства дислокаций не могут быть описаны без учета их взаимодействия с примесями и собственными точечными дефектами, приводящего к образованию вокруг дислокаций атмосферы движущихся вместе с ней примесей и собственных точечных дефектов. Влияние примесной атмосферы наблюдалось в исходных образцах $n-Si$ уже с концентрацией фосфора $4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ в результате пластической деформации при 650^0 С [197].

Рассмотрим движение дислокаций в кристаллах с примесями. Как известно, в реальном кристалле при движении дислокаций на них действуют силы торможения, обусловленные динамическим взаимодействием ядра дислокации с точечными дефектами кристаллической решетки. Так как точечные дефекты являются центрами изотропного сокращения и расширения, они взаимодействуют только с составляющей всестороннего давления напряжений. Для прямой дислокации напряжение всестороннего давления создается только краевой составляющей. Поэтому краевая составляющая окружена атмосферой Коттрелла [198-200]. Наличие примесной атмосферы в нашем случае подтверждается следующими рассуждениями. Как

показано в [197], соби́рание а́томов приме́сей происхо́дит при усло́вии, что ско́рость дислока́ций

$$v_{\text{дисл.}} \leq \frac{aD}{b^2}$$

b -расстояние порядка межатомного, $a = A/kT$, A определяется из выражения энергии взаимодействия атома примеси с дислокацией: $U = \frac{A}{r} \sin \varphi$, D -коэффициент диффузии примеси. Подставляя значения соответствующих параметров, получим

$$v_{\text{дисл.}} < \frac{aD}{b^2},$$

то есть в наших экспериментах дислокация собирает примеси с образованием примесной атмосферы.

Сила торможения на единицу длины краевой дислокации, обусловленная примесной атмосферой Коттрелла точечных дефектов, определяется следующим образом [98]:

$$\left(\frac{F}{L} \right) = \frac{v c_0 \beta^2}{DkT} \ln \frac{DkT}{v\beta} \quad (7.10)$$

где c_0 –концентрация примесей, D –коэффициент диффузии, v -модуль скорости движения примесей,

$$\beta = \frac{\mu b_{60^\circ} (1 + \nu)}{3\pi(1 - \nu)} (v_s - v_a),$$

v_s, v_a -атомные объемы примесей и атомов матрицы.

Тогда условие равновесия при равномерном движении дислокаций может быть записано в виде

$$b\sigma = \frac{\Phi}{L} + \frac{v c_0 \beta^2}{DkT} \ln \frac{DkT}{v\beta}. \quad (7.11)$$

Осуществляя преобразования, аналогичные (7.7)-(7.8), получим:

$$V_{60^\circ}/V_b = \frac{8(2K_{60^\circ} - K_b) \left(b\sigma + \frac{v c_0 \beta^2}{DkT} \ln \frac{v\beta}{DkT} \right)}{K_{60^\circ} \left(7b\sigma + 8 \frac{v c_0 \beta^2}{DkT} \ln \frac{v\beta}{DkT} \right) + K_b \left(b\sigma - 4 \frac{v c_0 \beta^2}{DkT} \ln \frac{v\beta}{DkT} \right)}. \quad (7.12)$$

Предварительно оценим из уравнения (7.12) величину D/v . Используя данные описанного в начале параграфа эксперимента, а также параметры при данной температуре

$$\sigma = 7 \text{ МН/м}^2, \quad T = 853 \text{ К}, \quad V_{60^\circ}/V_b = 0.8$$

$$K_b = 6,1 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2, \quad K_{60^\circ} = 7,8 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2, \quad \beta = 10^{-31} \text{ Дж.м} \quad c_0 = 10^{26} \text{ 1/см}^3$$

находим, что $D/v \approx 10^{-11} \text{ м}$.

Найдем условие, при котором $V_{60^\circ}/V_b < 1$, т.е. происходит инверсия скоростей дислокаций. Условие инверсии на напряжение имеет вид:

$$\sigma \leq \frac{-4 \frac{vc_0\beta^2}{DkT} \left[\ln \frac{v\beta}{DkT} \right] (2K_{60^\circ} - K_b)}{9b(K_{60^\circ} - K_b)}. \quad (7.13)$$

Фиксируя температуру, при которой экспериментально наблюдается инверсия скорости, и задавая для данной температуры параметры уравнения при $T = 853 \text{ К}$, находим, что $V_{60^\circ}/V_b \leq 1$ при $\sigma \leq 9 \text{ МН/м}^2$.

Как видно из (7.13), при повышении температуры инверсное значение σ уменьшается, что согласуется с [194].

7.3. Исследование полей напряжений при радиально симметричном нагружении [201,202].

Задача о распределении напряжений в твердых телах при различных способах приложения внешней нагрузки представляет определенный интерес как с экспериментальной, так и с теоретической точек зрения. Для простых случаев одноосного напряженного состояния касательные напряжения определяются довольно просто на основании эксперимента. Однако даже в случае простого сжатия не всегда удается в чистом виде реализовать линейное напряженное состояние.

При двухосном напряженном состоянии утонение от растяжения компенсируется утолщением от сжатия, в результате чего деформирование происходит при постоянной толщине. Таким образом, переходя от линейного напряженного состояния к двухосному, можно управлять тензором напряжений.

Используя разработанную в [203] методику, в кристаллах кремния экспериментально определялись тангенциальные напряжения в трех плоскостях скольжения $\{111\}$, а также тензор напряжений во всех точках-источниках дислокаций, проведены сравнения теоретических и экспериментальных результатов.

Описание эксперимента.

Кристаллы кремния толщин 0.5 мм и диаметром 25 мм вырезались таким образом, чтобы большая поверхность соответствовала плоскости (111) , на которую алмазным индентором наносилась двумерная радиальная сетка источников дислокаций с угловым периодом 15° и радиальным периодом 1 мм .

Напряженное состояние в кристалле создавалось сосредоточенной силой порядка 11 Н ., приложенной в центре круглой пластины при 970 К . Рис.7.2. Время нагружения выбиралось таким образом, чтобы дислокации от соседних источников не перекрывались. Финальное распределение дислокаций изучалось методом рентгенодифракционной топографии и избирательным травлением.

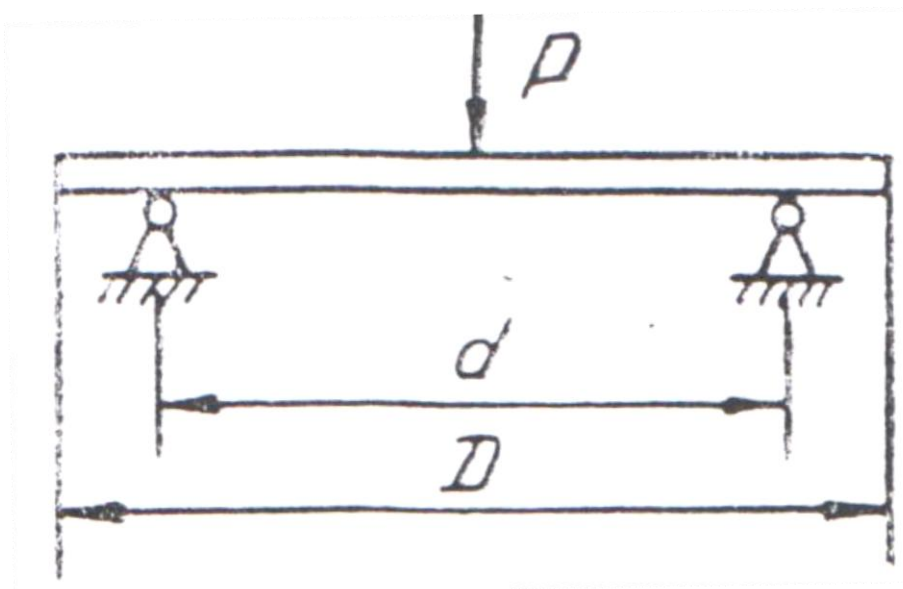


Рис.7.2.Схема нагружения пластины.

Для количественной оценки описанных явлений принималось, что движение боковых краев дислокаций в идентичных источниках одинаково для двух сторон кристалла. Кристаллы данного материала начинают пластическую деформацию, когда приведенное напряжение сдвига по плоскости скольжения в

направлении скольжения достигает определенного критического значения (закон Шмида). Фактор Шмида показывает, при каких его значениях возникает максимальное сдвиговое напряжение в направлении скольжения для данного материала.

Измеряя перемещение дислокационного фронта в трех плоскостях скольжения, зная время нагружения и используя соотношение

$$\sigma = \sigma_0 \left(\frac{V}{V_0} \right)^{1/m},$$

где $\sigma_0 = 10 \text{ МНм}^{-2}$, $V_0 = 0,5 \times 10^{-6} \text{ м/с}$, $m = 1,33$ – фактор Шмида, можно получить абсолютное значение тангенциального напряжения [194,204].

Функция перемещения при деформации под действием сосредоточенной силы, приложенной в центре, в полярной системе координат имеет вид [205]:

$$\omega = \frac{P}{8\pi D} \left[\frac{3-\sigma}{2(1+\sigma)} (a_r^2 - r^2) - r^2 \ln \frac{a_r}{r} \right], \quad (7.14)$$

где D -коэффициент жесткости образца, σ - коэффициент Пуассона, a_r - радиус образца, r - полярный радиус.

Используя хорошо известные соотношения между напряжениями, деформациями и перемещениями значения упругих констант с учетом кристаллической анизотропии и температурной зависимости [205], из (7.14) получим компоненты нормальных и касательных напряжений.

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= 10^6 [111,2 + 29 \ln r + 22,8 \cos^2 \varphi + 6,2 \sin^2 \varphi] \\ \sigma_{22} &= 10^6 [111,2 + 29 \ln r + 22,8 \sin^2 \varphi + 6,2 \cos^2 \varphi] \\ \sigma_{12} &= 10^6 * 8,35 * \sin^2 \varphi, \end{aligned} \quad (7.15)$$

где r , φ - полярные координаты. (Уравнения написаны для верхней поверхности кристалла).

Координатные оси выбраны так, что направлению $[1\bar{1}0]$ соответствует индекс 1. Как известно, скорость дислокаций в кристалле определяется величиний касательного напряжения в плоскости скольжения в направлении скольжения. Поэтому в уравнении (7.15) необходимо перейти к касательным напряжениям в кристаллографических направлениях. При выбранной ориентации кристалла плоскостями скольжения являются плоскости (111) , $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(11\bar{1})$. Далее из выражений для нормальных и

касательных напряжений, используя известные преобразования $\sigma_{ij} = T_{il} T_{jm} \sigma_{lm}$ [98] (T_{ij} - направляющие косинусы между x_i и x_j), получим касательные напряжения в плоскости скольжения (в направлении скольжения). В каждой плоскости скольжения реализуется скольжение в направлении, которому соответствует наибольшие касательные напряжения и реализованные направления скольжения различны в разных областях поверхности кристалла. Для трех плоскостей скольжения получаются 48 областей с различными направлениями вектора Бюргерса дислокации.

Вычислим тангенциальные напряжения для одной из областей, в которой реализуется система скольжения $A[011](11\bar{1})$, $B[011](1\bar{1}1)$, $C[101](\bar{1}11)$.

Соответствующая система уравнений имеет вид

$$\begin{aligned}\sigma_C &= -0.471\sigma_{12} - 0.272\sigma_{22}, \\ \sigma_B &= 0.408\sigma_{12} - 0.136\sigma_{22}, \\ \sigma_A &= 0.408\sigma_{11} - 0.136\sigma_{22}.\end{aligned}\tag{7.16}$$

Значения касательных напряжений, вычисленные на основании экспериментальных данных для $r = 3\text{ мм}$, $\varphi = 105^\circ$, имеют следующие значения

$$\sigma_C = 6.208 \text{ МНм}^{-2}, \sigma_B = 8.689 \text{ МНм}^{-2}, \sigma_A = -8.474 \text{ МНм}^{-2}.$$

Подставляя $\sigma_C, \sigma_B, \sigma_A$ и решая (7.16), для $\sigma_{12}, \sigma_{11}, \sigma_{22}$ получим $\sigma_{12} = 8.2 \text{ МНм}^{-2}$,

$$\sigma_{11} = -31 \text{ МНм}^{-2}, \sigma_{22} = -32 \text{ МНм}^{-2}.$$

Следовательно, в данной точке, реализуется напряженное состояние двухосного сжатия. Исследования показывают, что в общем случае, на поверхности кристалла реализуются различные варианты двухосных напряженно-деформированных состояний.

При выбранной ориентации кристалла скольжение осуществляется в трех плоскостях скольжения в направлениях наибольших касательных напряжений. Это позволило нам решить обратную задачу: от рассчитанных на основании экспериментальных данных значений касательных напряжений в трех кристаллографических плоскостях скольжения во всех точках радиальной сетки источников дислокаций перейти к нормальным и касательным напряжениям в

плоскости пластины и тем самым определить области двухосного сжатия и растяжения на поверхности кристалла. Отметим, что тензор напряжений отнесен к срединной плоскости кристалла (принято, что по толщине пластины распределение напряжений одинаково – мембранная теория).

Таким образом, касательное напряжение при данной схеме приложения внешней нагрузки распределяется неравномерно, и в различных областях пластины реализуются разные направления скольжения. Нами в сложном случае двухосного нагружения определены касательные напряжения в кристаллографических направлениях, установлены направления наибольших касательных напряжений, вдоль которых реализуется скольжение дислокации в различных областях кристалла, осуществлен переход от рассчитанных из эксперимента касательных напряжений к нормальным и касательным напряжениям в плоскостях скольжения, определен тип деформации в различных областях поверхности кристалла. Полученные результаты позволяют определять компоненты тензора напряжений в любых точках двумерной сетки на поверхности кристалла.

7.4. Управление структурой тензора напряжений деформированием тугоплавких металлов[112, 215-219, 224]

В современной полупроводниковой электронике и физических исследованиях широко используется гетероэпитаксиальное осаждение полупроводниковых пленок.

Стабильность свойств гетероструктур существенно зависит от дефектов и остаточных напряжений в пленках. Различие параметров кристаллических решеток материалов подложек и пленок обуславливает возникновение в пленках напряжений несоответствия, которые существенно влияют на эволюцию структуры и функциональные свойства пленок [206].

В результате рассогласования кристаллических решеток подложки и пленки, а также из-за различия их коэффициентов теплового расширения, вблизи гетерограницы в процессе роста пленки образуется значительное количество дефектов: микровойников и дислокаций [207].

Обычно подложка и пленка имеют различные кристаллические структуры, например, в гетероструктуре кремний на сапфире. У кремния - кубическая структура

с постоянной решетки $5.4301 \text{ \AA}$, температура плавления 1420°C , коэффициент теплового расширения $4.5 \cdot 10^{-6} \text{ град}^{-1}$ в пределах $400\text{-}600 \text{ C}$. Сапфир же имеет ромбоэдрическую структуру с постоянными решетки $4.75 \text{ \AA}$ и $12.97 \text{ \AA}$, температурой плавления 2040°C , коэффициентом теплового расширения $8.4 \cdot 10^{-6} \text{ град}^{-1}$ в пределах $25\text{-}800^\circ\text{C}$ [206,207].

Вследствие различий параметров решёток подложки и осаждаемого материала в приграничной области кремния создаются большие напряжения, а различие коэффициентов теплового расширения делает эти напряжения еще больше. Величина напряжения может достигать порядка 10^{10} дин/см^2 [208]. Релаксация напряжений происходит путём образования большого количества дефектов. Основными дефектами, характеризующими приграничную к интерфейсу область кремния, являются дефекты упаковки, двойники и дислокации [209-212].

В работе [213] авторы показали, что доминирующими дефектами в эпитаксиальном слое кремния на расстоянии до 500 нм от гетерограницы являются дефекты двойникования, а при больших расстояниях основной вид дефектов — дислокации.

Движущей силой для пластических деформаций в гетероэпитаксиальных слоях является различие величин напряжения, связанное с рассогласованием параметром решетки подложки и осаждаемого материала, и напряжения, необходимого для возникновения дислокаций несоответствия. Это различие было названо “избыточным напряжением”, отвечающим за отклонение системы от механического равновесия. Чем больше избыточное напряжение, тем более выгодно образование дислокаций.

Исследования показали, что существует связь между кристаллической структурой осаждаемого кремния и качеством сапфировых подложек [213].

Многочисленными исследованиями установлено, что основным методом получения сапфировых подложек высокого качества является высокотемпературная кристаллизация из расплава в контейнерах из тугоплавких металлов [214].

Определяющим признаком при выборе материала контейнера в процессах высокотемпературной кристаллизации из расплава является отсутствие его

смачивания и химическая нейтральность к расплаву. Общее правило выбора материала контейнера следующее: физические силы связи материала контейнера должны принципиально отличаться по своей природе от физических сил связи кристаллизуемого вещества. Согласно этому правилу, кристаллы диэлектриков должны выращиваться в металлических контейнерах и, наоборот, металлические кристаллы – в диэлектрических

Характерной особенностью тугоплавких металлов является их высокая точка плавления и сохранение значительного запаса прочности при высоких температурах. К этим металлам относятся вольфрам, тантал, молибден и ниобий. Рассматриваемые металлы имеют объёмно-центрированную кубическую кристаллическую решетку. Существующие технологии изготовления контейнеров из тугоплавких металлов приводят к хрупкому разрушению изделий при нагружении. Поэтому становится актуальной разработка методов, препятствующих хрупкому разрушению.

Одним из перспективных методов препятствующих хрупкому разрушению является увеличение прочности материала деформационным упрочнением.

Увеличение прочности посредством деформационного упрочнения связано с возможностью увеличения накопленной деформации. Кроме рассмотренных нами ранее способов накопления деформации посредством теплового градиента (см.гл. 4.2), введения в кристалл переменного механического поля (см.гл. 4.2), изменение тензора напряжений переходом от одноосного напряженного состояния к двухосному (см. гл.7.3), при котором утонение от растяжения компенсируется утолщением от сжатия, нами предложен дополнительный способ управления тензором напряжений.

На способность к деформированию материалов из тугоплавких металлов влияют постоянные и переменные параметры. К постоянным параметрам относятся вид кристаллической решетки, химический состав и т. д. К переменным параметрам относятся напряженно-деформированное состояние, скоростные и температурные условия деформирования.

Нами разработан новый способ деформирования молибдена при изготовления контейнеров для выращивания сапфировых подложек из расплава. В основу этого

способа положено сочетание силовой и термической интенсификации процесса пластического деформирования [215,216].

Сущность силовой интенсификации состоит в изменении характера приложения внешних сил с целью уменьшения напряжений, действующих в опасном сечении и ограничивающих допустимое деформирование. Это может быть достигнуто путем изменения схемы приложения внешних сил или изменением знака сил внешнего трения таким образом, чтобы силы трения из фактора, увеличивающего напряжения в опасном сечении заготовки, превратились в фактор, уменьшающий эти напряжения [215].

Сущность термической интенсификации состоит в том, что путем создания неоднородного температурного поля снижают напряжение в опасном сечении за счет уменьшения сопротивления деформированию. Это может быть достигнуто, например, путем дифференциального нагрева деформируемого материала [216]. Одним из возможных вариантов формоизменения листового молибдена является его деформирование в условиях двухслойного листового пакета, состоящего из внутреннего, молибденового, слоя и наружного - из листовой стали с высокими показателями технологической пластичности. На листовой молибден накладывается стальной лист двойной толщины и деформируется таким образом, чтобы молибден по всей толщине оказался в зоне напряжения сжатия (предполагается, что листовой пакет деформируется как целое). Таким образом исключается возможность возникновения растягивающих напряжений в молибдене, приводящих к хрупкому разрушению вследствие появления трещины на наружном слое молибденового листа. По действующему стандарту для молибдена предельная деформация на одноосное растяжение (2-5)%. Изменение указанным способом тензора напряжений позволило деформировать молибден до 80%.

При деформировании двухслойного листового пакета со стороны наружного слоя на листовой молибден действуют контактные напряжения, препятствующие росту окружных растягивающих напряжений и способствующие увеличению допустимых степеней деформаций. Очевидно, что величины контактных напряжений должны зависеть от механических свойств и толщины наружного слоя.

Количественная оценка этих напряжений, вследствие неопределенности полей напряжений в общем случае деформирования тонкостенных оболочек, является достаточно трудной задачей. Эти трудности обусловлены тем, что на процесс деформирования влияет ряд факторов: одни зависят от состояния исходного материала (анизотропия механических свойств), другие - от уровня совершенствования технологического процесса (трение), третьи связаны с самим процессом деформирования (изменение размеров пластической области, изменение толщины материала и деформационное упрочнение).

Существующие аналитические подходы по созданию научно обоснованных методов расчёта параметров деформирования тонкостенных оболочек при больших пластических деформациях построены на основе упрощающих предположений, основными из которых являются принятие плоской схемы распределения деформаций, проведение анализа методом деформационной теории пластичности или принятие идеально жёстко-пластической модели деформируемого материала. Аналитические решения, полученные на основе подобных подходов, являются приближенными и позволяют получить лишь ориентировочные представления о структуре и характере изменения тензора напряжения.

Описанное состояние объясняется тем, что одни уравнения пластического состояния устанавливают зависимости между напряжениями и координатой рассматриваемой материальной точки, другие – между напряжениями и приращениями (скоростями) деформаций, а третьи – между напряжением текучести и эквивалентой деформацией.

Нами уравнения пластического состояния приведены к единой структуре путём их представления в пространстве деформаций на плоскости в двумерной косоугольной системе координат. Возможность представления компонентов тензора напряжений на плоскости следует из условия постоянства объёма, согласно которому для несжимаемого материала три главные деформации взаимозависимы и имеют только две степени свободы, а также из принятого допущения о том, что деформирование происходит в условиях плоского напряженного состояния.

На основе вышеизложенного, система уравнений пластического состояния на плоскости деформаций преобразуется к простой пропорциональной зависимости между приращениями (скоростями) радиального напряжения и эквивалентной деформации:

$$d\sigma_\rho = \sigma_s d\varepsilon \quad (7.17)$$

Коэффициентом пропорциональности в (7.17) является переменное напряжение текучести материала, характеризующее деформационное упрочнение.

Из (7.17) и (4.15) следует:

$$\sigma_\rho = k \frac{\varepsilon^{n+1}}{n+1} + c, \quad (7.18)$$

где c - постоянная интегрирования.

Из характера деформирования следует, что в пластической области должно выполняться условие: $\varepsilon_\theta \leq 0$, $\sigma_\rho \sigma_\theta \leq 0$, то есть все элементы материала в результате деформации сжатия должны сокращаться в окружном направлении. Зависимости для компонент тензора напряжений имеют вид [217]:

$$\sigma_\rho = \sigma_s \frac{2}{\sqrt{3}} \cos(\varphi + \pi/6); \quad \sigma_\theta = -\sigma_s \frac{2}{\sqrt{3}} \sin \varphi \quad (7.19)$$

Зависимости (7.19) отображаются на плоскости деформаций в виде окружностей радиуса $\sigma_s/\sqrt{3}$, центры которых находятся соответственно на линиях $\varepsilon_\rho = 0$ и $\varepsilon_\theta = 0$, и проходят через начало координат, а деформационное упрочнение представляется увеличением их радиусов и перемещением их центров на определённую величину. Параметр φ можно интерпретировать двояко: при $\varphi = \text{const.}$ уравнения (7.18) и (7.19) характеризуют рост напряжений и накопление деформации в рассматриваемой материальной точке (переменные Лагранжа); при переменном φ эти же уравнения характеризуют распределение напряжений и деформаций в пластической области (переменные Эйлера).

При наибольших размерах пластической области реализуются следующие виды тензора деформаций:

при $\varphi=0$: $\varepsilon_\rho > 0$, а $\varepsilon_\theta < 0$ и $\varepsilon_z < 0$ и по модулю равны $\varepsilon_\rho/2$, то есть реализуется деформация линейного растяжения;

при $\varphi=\pi/6$: $\varepsilon_z = 0$, а $\varepsilon_\rho = -\varepsilon_\theta > 0$, то есть реализуется чистый сдвиг;

при $\varphi=\pi/3$: $\varepsilon_\theta < 0$, а $\varepsilon_\rho > 0$ и $\varepsilon_z > 0$ и по модулю равны $\varepsilon_\theta/2$, то есть реализуется деформация линейного сжатия.

Следовательно, в общем случае при деформировании пластическая область отображается на плоскости деформации в виде двух характерных секторов с центральными углами, равными $\pi/6$, на границах которых меняется вид тензоров деформаций и напряжений.

Из (7.17) и (7.19) при $\varphi=0$ (линейное растяжение) с учётом принятого закона деформационного упрочнения (4.15) следует зависимость для параметра упрочнения, совпадающая с результатами работ [220, 221]:

$$\frac{1}{\sigma_s} \frac{d\sigma_\rho}{d\varepsilon} = \frac{n k \varepsilon^{n-1}}{\sigma_s} = \frac{n}{\varepsilon} = 1 \quad (7.20)$$

Согласно (7.20) эквивалентная деформация при $\varphi=0$ по модулю равна ε_ρ и не может превышать величину n , определяемую испытанием деформируемого материала на одноосное растяжение.

Допущение о пропорциональном изменении главных деформаций позволяет проинтегрировать (7.17). Принимая граничное условие, по которому $c=0$ (на внешнем контуре $\varphi = \pi/3$ отсутствуют напряжения), подставим $\pi/3$ в (7.19) (σ_ρ) получим $c=0$. Тогда, приравнявая (7.18) и (7.19), получаем:

$$\varepsilon^n = (1+n) \frac{2}{\sqrt{3}} \cos(\varphi + \pi/6) \quad (7.21)$$

Для этого случая главные компоненты тензора деформаций имеют вид [217].:

$$\begin{aligned} \varepsilon_\rho &= \frac{1+n}{2} \left(1 + \cos 2\varphi - \frac{\sqrt{3}}{3} \sin 2\varphi \right); \\ \varepsilon_\theta &= -\frac{1+n}{2} \left(\cos 2\varphi + \frac{\sqrt{3}}{3} \sin 2\varphi \right); \\ \varepsilon_z &= -\frac{1+n}{2} \left(1 - \frac{2\sqrt{3}}{3} \sin 2\varphi \right); \end{aligned} \quad (7.22)$$

Таким образом, зависимости (7.19), (7.21) и (7.22), являясь аналитическим решением задачи в параметрической форме, полностью определяют структуру тензора напряжений и деформаций.

Для количественной оценки характера изменения тензоров напряжения и деформации, ниже нами рассматривается наиболее простой случай – пластический изгиб моментом двухслойного листового пакета [222, 223].

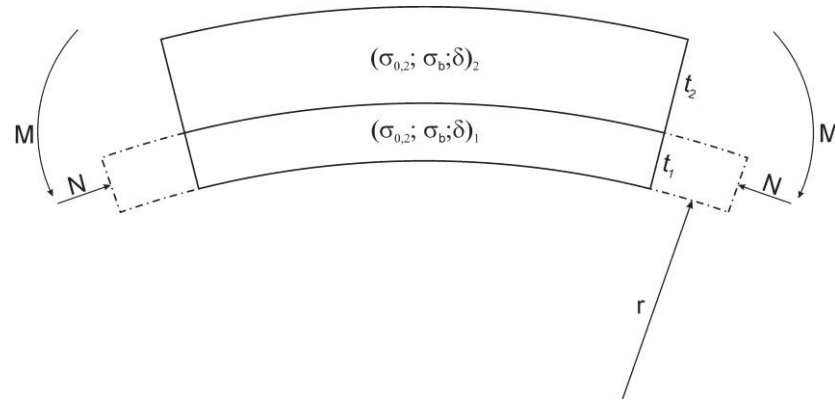


Рис 7.3. Схема изгиба двухслойного листового пакета ($\sigma_{0,2}$, σ_b , δ – механические характеристики слоев, N – расчетная величина окружного усилия на торцы внутреннего слоя, M – момент изгиба, t_1, t_2 – соответственно, толщины слоев, n_2 – показатель степени в (4.15) для второго слоя)

Анализ напряженного состояния проведен без учета влияния поперечных сил на поле напряжений, а деформационное упрочнение учтено степенной зависимостью напряжения текучести от эквивалентной деформации [219].

На основе общеизвестных уравнений изгиба широкой полосы получена аналитическая зависимость для радиуса нейтральной поверхности $\rho_n(\sigma_k)$ (индексы 1 и 2, соответственно, относятся к внутреннему и наружному слоям).

$$\rho_n(\sigma_k) = \left\{ R \exp \frac{K_2}{(1+n_2)K_1} \left[\ln \left(1 + \frac{t_2}{R} \right) \right]^{1+n_2} \right\}^{1/2} \quad (7.23)$$

где R – внешний радиус наружного слоя, K_1, K_2 – коэффициенты пропорциональности в формуле (4.15) для первого и второго слоев.

Величину относительного смещения радиуса нейтральной поверхности $\Delta \rho_n / \rho_n$ ($\Delta \rho_n = \rho_n(\sigma_k) - \rho_n$) в сторону волокон, находящихся в сжатом состоянии, можно оценить из зависимости:

$$\frac{\Delta \rho_n}{\rho_n} = \left\{ \exp \frac{e^{n_2} n_1^{n_1}}{(1+n_2) e^{n_1} n_2^{n_2}} \left[\ln \left(1 + \frac{t_2}{R} \right) \right]^{1+n_2} \right\}^{1/2} - 1 \quad (7.24)$$

На рис. 7.4 представлен трехмерный график зависимости относительного смещения радиуса нейтральной поверхности от соответствующих показателей упрочнения слоев n_1 и n_2 при заданном относительном радиусе изгиба $h(t_2) \approx 0,405$, ($r = 1$ мм, $t_1 = 0,6$ мм, $t_2 = 0,8$ мм).

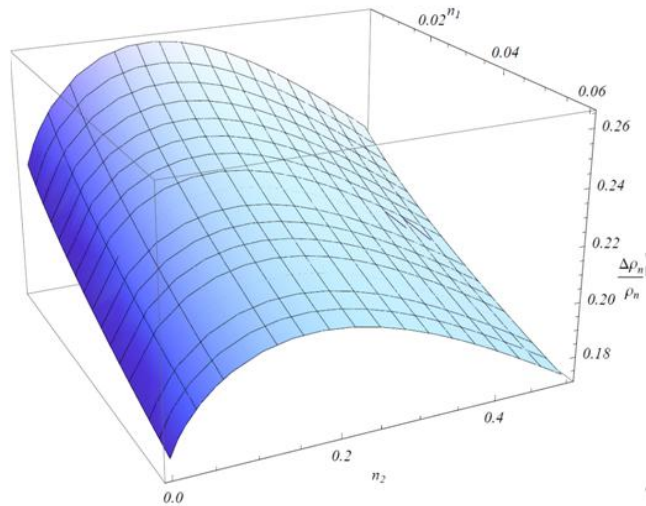


Рис 7.4. Изменение радиуса нейтральной поверхности в зависимости от параметров n_1 и n_2

Из анализа зависимости (7.24) следует, что она имеет экстремум, не зависящий от показателя n_1 . Приравнявая результат дифференцирования (7.24) нулю, получим

$$(1+n_2) \ln(n_2) - (1+n_2) h(t_2) + 1 = 0, \quad (7.25)$$

где введено обозначение $\ln(1+t_2/R) = h(t_2)$.

При заданном $h(t_2)$, определяется то значение показателя n_2 , при котором зависимость (7.25) принимает экстремальное значение. Численные расчеты показывают, что для этого случая $n_2 \approx 0,178$.

Из полученных результатов следует, что для наружного слоя наиболее целесообразно использование стали толщиной 0,8 мм с пределом прочности $\sigma_b \approx 690$ МПа относительной деформацией $\delta \approx 0,18$, что достаточно точно соответствует расчетным параметрам.

Очевидно, что относительные величины наибольших радиальных сжимающих напряжений и смещение радиуса нейтральной поверхности, в реальных условиях изгиба вследствие относительного проскальзывания слоев, будут значительно меньше, чем величины, рассчитанные по зависимостям (7.24) и (7.25). По этой причине допустимая величина относительного радиуса изгиба несколько увеличится.

Полученные результаты позволяют оценить влияние силовых параметров и в определенной степени управлять тензором напряжений.

Таким образом, проведен анализ изгиба двухслойного листового пакета в условиях плоской деформации с учетом деформационного упрочнения при отсутствии относительного проскальзывания.

Получены аналитические зависимости для предельных величин радиальных сжимающих напряжений, действующих на поверхности раздела слоев и для относительного смещения радиуса нейтральной поверхности внутреннего слоя. Показано, что эти зависимости имеют экстремумы, зависящие как от относительного радиуса изгиба, так и от параметров деформационного упрочнения наружного слоя. Количественной оценкой установлена возможность уменьшения относительного радиуса изгиба молибденового листа, и на основе этого предложен вариант выбора материала наружного слоя с требуемыми механическими свойствами.

На технологическую пластичность значительно влияют также температурно-скоростной фактор и схема напряженно-деформированного состояния.

На основе испытаний плоских образцов на одноосное растяжение нами определены параметры механических свойств листового молибдена и показано, что деформационные характеристики описываются степенной зависимостью. Установлена взаимосвязь между механическими свойствами листового молибдена и параметрами степенного закона деформационного упрочнения. Показано также, что для увеличения

допустимых степеней деформаций целесообразно применение дифференциального нагрева в определенном интервале температур.

Таким образом, согласно современным представлениям, пластичность зависит от условий деформирования, и ее следует рассматривать не как свойство какого-либо материала, а как его состояние. Установлено, что характеристики технологической пластичности тем лучше, чем большую роль в схеме напряженно-деформированного состояния играют сжимающие напряжения в данном процессе формообразования. При всестороннем неравномерном сжатии значительно улучшаются условия накопления деформаций и создается возможность для деформирования тугоплавких металлов (к ним относится молибден), которые по другим схемам деформирования испытывают хрупкое разрушение. Например, при одноосном напряженном состоянии листового молибдена относительная деформация удлинения, согласно действующим стандартам, не превышает (2-5)%. Однако нами экспериментально доказано, что при деформировании в условиях неравномерного двухосного сжатия при определенных температурно-скоростных режимах деформирования создается возможность деформирования листового молибдена до (70-80) % [218, 222, 223].

Используя решения осесимметричного деформирования и изгиба молибдена в условиях двухслойного листового пакета нами получено приближенное решение задачи деформирования при отсутствии осевой симметрии [225]. На основе этого решения разработана оптимальная конструкция и технология деформирования контейнеров прямоугольной формы, используемых при выращивании сапфировых подложек.

Предложенная конструкция контейнеров и технология их изготовления [215, 216] обеспечивают равномерную теплопроводность между расплавом и стенками контейнера, что исключает перенапряжение выращиваемых подложек, растрескивание кристаллов в угловых участках и образование микротрещин и дислокаций. В предложенном варианте обеспечено дублирование получаемых сапфировых подложек.

Выводы к главе 7.

Экспериментально получено, что в определенной области температур и напряжений в кристаллах кремния с примесями происходит инверсия скоростей винтовых и 60° -ных дислокаций.

В беспримесных кристаллах скорость 60° -ных дислокаций больше скорости винтовых, и соотношение скоростей сохраняется в температурном интервале 550° - 700° . В реальных кристаллах кремния с учетом взаимодействия дислокаций с примесями найдено условие инверсии скоростей дислокаций на напряжение для данной температуры. При повышении температуры инверсное значение напряжения уменьшается.

В кристаллах кремния и германия дислокации, возникшие от внутренних источников, представляют собой гексагональные петли. Две из этих компонент являются винтовыми, а четыре – шестидесятиградусными дислокациями. Благодаря разности скоростей винтовых и шестидесятиградусных компонент, при формировании петли устанавливается определенное соотношение длин этих компонент – определенная конфигурация петли в зависимости от внешнего напряжения и температуры кристалла. В начальных стадиях возникновения дислокационной петли, когда собственная упругая энергия дислокаций порядка энергии взаимодействия между компонентами, компоненты не являются прямыми линиями в строгих кристаллографических направлениях. При дальнейшем развитии процессов дислокация приобретает форму гексагональной петли.

Равновесная конфигурация петли устанавливается при размерах компонент, превышающих некоторые критические. При таких размерах собственная упругая энергия дислокаций намного больше энергии взаимодействия между компонентами и энергии изломов. Эти критические значения зависят от внешних условий (температуры и внешнего напряжения).

В кристаллах кремния при радиально симметричном нагружении скольжение дислокации реализуется в кристаллографических направлениях, вдоль которых действуют наибольшие касательные напряжения. Локальное тензометрирование для сложного случая двухосного нагружения фиксирует различные варианты двухосных

напряженно-деформированных состояний. Переход от одноосного напряженного состояния к двухосному позволяет управлять тензором напряжений. Разработанная методика определения тензора напряжений может быть использована при решении реальных проблем, возникающих при разработке технологий выращивания малодислокационных подложек для гетероструктур.

Предложенный способ изменения тензора напряжений существенно улучшает параметры сапфировых подложек, их однородность и обеспечивает минимальное количество дефектов, что гарантирует улучшенное качество гетерограниц при создании гетероструктур кремний на сапфире. Предложенный способ также создает возможность выращивания монокристаллов больших размеров, применяемых в нелинейной оптике, лазерах, акустооптических устройствах и т.д.

Заключение

Основные результаты диссертационной работы сводятся к следующим позициям и выводам.

1. В поле сильной электромагнитной волны в условиях размерного квантования возможно усиление звука, которое носит осцилляционный характер в зависимости от толщины пленки.

2. При определенных значениях напряженности электромагнитного поля среда становится прозрачной для звука (коэффициент поглощения равен нулю).

В одномерно квантованных средах в условиях электронного парамагнитного резонанса при определенных частотах возможно усиление звука.

3. В условиях, когда необходимо учитывать неупругость электрон-фононных взаимодействий, в размерно-квантованных средах в присутствии сильной электромагнитной волны имеют место следующие эффекты:

- из-за взаимодействия электронов с электромагнитной волной и звуком в области скоростей, удовлетворяющих резонансным условиям, наблюдается нелинейный эффект уменьшения коэффициента поглощения с увеличением интенсивности вводимого звука;
- при определенных условиях может происходить резонансное усиление звука;
- появляется зависимость коэффициента поглощения от частоты звука, не наблюдаемая в линейном приближении; зависимость от толщины пленки сильнее, чем в линейной теории.
- фононный спектр в пленках и в отсутствие размерного квантования фононов из-за электрон-фононного взаимодействия имеет квантовый характер.

4. При $\vec{q}_\rho = 2\vec{k}_F$, ($\vec{q}_\rho$ - волновой вектор фонона в плоскости пленки, $\vec{k}_F$ - волновой вектор электрона на поверхности Ферми), $Re \omega$ (ω - частота фонона) остается непрерывной, но первая производная $\frac{d\omega}{dq_\rho}$ в этой точке расходится - появляются коновские особенности скорости, причем вместо одной аномалии возникает целая система особых точек.

5. Затухание фононов испытывает скачки - гигантские квантовые осцилляции поглощения.

6. В случае двумерного свободного движения и одномерного квантования электронного и фононного энергетического спектра в электрон-фононной системе (оптические фононы) при выполнении определенных условий возникают новые квазичастицы, которые являются связанными состояниями электрона и оптического фонона.

7. В полупроводниковой одномерной среде (квантовая проволока) со слабой дисперсией и слабой нелинейностью в присутствии продольной звуковой и электромагнитной волны при определенных условиях возможно образование звукового солитона Кортевега де Фриза. Численное моделирование эволюции уравнения для разных параметров нелинейности, дисперсии, диссипации и для разных начальных возмущений демонстрирует основные свойства звукового солитона в твердом теле: при увеличении коэффициента нелинейности при одинаковом начальном импульсе число рождающихся солитонов растет, начиная со значения коэффициента нелинейности $\sigma \leq \sqrt{12}$ решения являются несолитонными.

8. При учете диссипации топологический солитон замедляет свое движение, затем, остановившись, он может жить практически очень долго. Солитон Кортевега де Фриза, замедляясь, одновременно уменьшает свою высоту и расплывается. При увеличении коэффициента диссипации затухание происходит быстрее. Время жизни солитона обратно пропорционально коэффициенту диссипации. При столкновении солитонов Кортевега де Фриза не наблюдаются неупругие эффекты, т.е. после столкновения солитоны выходят без искажения. При столкновении солитона и антисолитона синус Гордона при малом затухании они проходят друг сквозь друга, при увеличении коэффициента затухания они образуют бризер, который со временем затухает. Если скорость солитона синус Гордона равна нулю, то его размер зависит от характеристик решетки. При приближении скорости к скорости звука он разрушается, и его энергия излучается в виде фононов.

Как уравнение Кортевега де Фриза, так и уравнение синус Гордона имеют многосолитонные решения. В обоих случаях мы имеем неравновесные, нелинейные системы, в которых происходит самоорганизация – возникновение новых упорядоченных структур по бифуркационному сценарию. О самоорганизации

системы решений уравнений Кортевега де Фриза и синус Гордона говорит также пороговый механизм образования новых, упорядоченных, структур.

9. Под действием сильных звуковых волн в тонких полупроводниковых пленках могут возникать напряжения и деформации, превышающие допустимые пределы для данного материала и толщины пленки.

Значения предельных амплитуд обратно пропорциональны толщине пленки, модулю продольной упругости, который, в конечном счете, определяет величину напряжения при заданной деформации. Кроме того, предельное значение амплитуды прямо пропорционально напряжению предельного состояния.

10. В алюминии при комнатной температуре дислокация в рельефе Пайерлса движется неравномерно, замедляясь перед барьером Пайерлса и ускоряясь после преодоления барьера. В окрестности дислокации реализуется область микропластичности. Внешнее переменное упругое поле изменяет длину свободного пробега дислокации, причем в зависимости от частоты можно регулировать длину свободного пробега. Закрепление дислокации после прохождения некоторого расстояния говорит об упрочнении. При наличии внешнего упругого поля градиент роста кривой упрочнения уменьшается, а значит уменьшается предел текучести. Различаются три области, в которых действуют различные механизмы деформации и упрочнения, каждому участку этих областей соответствует различная зависимость коэффициента упрочнения от координаты. В каждой стадии дислокационная структура меняется. Наличие резонансной внешней звуковой частоты уменьшает коэффициент упрочнения. Упрочнение в данном случае обусловлено рассеянием энергии при движении дислокации в рельефе Пайерлса. При резонансной частоте уменьшается сопротивление деформированию, укорачивается стадия упрочнения и удлиняется стадия разупрочнения.

11. В алюминии при низких температурах с учетом барьера Пайерлса дислокация Френкеля-Конторовой движется посредством туннелирования перегибов. Действие высокого барьера Пайерлса аналогично действию низких температур или, иначе, при понижении температуры барьер Пайерлса уменьшается. На макроуровне

туннелированию перегибов дислокаций соответствует разупрочнение кристалла. Истинные значения напряжений, при которых происходит резкое разупрочнение, меньше предела прочности алюминия, следовательно, в этом случае разрыва (разрушения) кристалла не происходит. Резкое уменьшение напряжения при почти постоянной деформации, имеющее периодический характер, объясняется туннелированием перегибов через потенциалы Пайерлса. Процесс туннелирования является нестационарным процессом. Полученный результат объясняет аномальное уменьшение напряжения пластического течения и рост накопленной деформации в алюминии при низких температурах.

12. Многосолитонная цепочка по-разному воздействует на движение дислокаций несоответствия при их скольжении в одном направлении при разных скоростях совместного движения на границе пленка – подложка гетероперехода.

При больших скоростях скольжения дислокация несоответствия замораживается полем дислокационной стенки. При малых скоростях скольжения дислокация выталкивается из занимаемой позиции. Эффект обусловлен сжатием упругого поля дислокационной цепочки в направлении скольжения при увеличении скорости. Наличие в подложке гетероструктуры многосолитонной цепочки приводит к тому, что на границе пленка-подложка дислокации несоответствия регулируемо выталкиваются из рабочей области гетероструктур полем цепочки, что увеличивает стабильность свойств таких структур и их функциональные качества.

13. С течением времени изменяется поле смещений дислокации, находящейся под воздействием соседней дислокации при их совместном движении, то есть при малых скоростях взаимодействие между дислокациями существенно. При увеличении скорости взаимодействие ослабляется. Когда скорость дислокации, находящейся в поле соседней дислокации, стремится к скорости звука, воздействие стремится к нулю, вследствие чего поле смещений данной дислокации почти не искажается. Поле сдвиговых напряжений при увеличении скорости сжимается по направлению скольжения и, начиная с некоторого значения, меняет знак.

14. При низких барьерах Пайерлса движение дислокаций поступательное. В кристаллах с высоким барьером дислокация совершает колебательное движение в направлении скольжения. Происходит искажение хвостовых областей дислокаций. Ширина дислокации периодически меняется, оставаясь все время меньше, чем в кристаллах с низким барьером. При учете силы трения для этого случая движение дислокаций замедляется, амплитуда колебаний в направлении скольжения значительно уменьшается.

15. Формирование и распространение селя достаточно точно описывается в рамках солитонной модели уравнения Кортевега де Фриза и его модификаций. Ключевой параметр нелинейных волновых гидродинамических процессов, сопровождающих селевые явления – давление в каналах водных систем, необходимое для внезапного водного выброса на поверхность, соответствует формированию солитонных режимов распространения поверхностных потоков. Дальность распространения и скорость селя в значительной степени определяются параметрами, характеризующими его солитонную природу.

Численное моделирование позволяет контролировать развитие нелинейных динамических процессов и создает возможность управления этими явлениями. Данный подход полезен при обеспечении защиты от селевых потоков с учетом механизмов селеобразования на некоторых потенциально опасных территориях, где подземные водные горизонты находятся близко от поверхности земли.

16. Солитоноподобные решения описывают широкий круг явлений, которые сопровождают передачу нервных импульсов: работа сердца, мышечные и кровеносные системы сердца. Изменяя параметры солитонной модели, можно моделировать патологии нервных проводящих путей, сосудистой и мышечной системы сердца. Возможная патология в сосудистой системе изменяет спектральную картину солитонных волн и позволяет диагностировать различные заболевания нервных путей и сердечно-сосудистой системы. Солитонный подход открывает большие возможности в исследовании сложных процессов в живых организмах. Математическое моделирование предоставляет аналитические результаты и способ выявления и идентификации различных биологических процессов.

17. В беспримесных кристаллах кремния скорость 60^0 -ных дислокаций больше скорости винтовых, и соотношение скоростей сохраняется во всем температурном интервале. В кристаллах кремния с примесями при данном напряжении в определенном интервале температур и при данной температуре в определенном интервале напряжений возникает инверсия отношений скоростей винтовых и 60^0 -ых дислокаций. При повышении температуры инверсное значение напряжения уменьшается.

18. При изгибе тонкой пластины под действием вертикальной сосредоточенной силы, приложенной в центре пластины, реализуется определенное распределение напряжений на поверхности кристалла. Локальное тензометрирование для сложного случая двухосного нагружения фиксирует различные варианты двухосных напряженно-деформированных состояний. Для двухосного сжатия и растяжения скольжение дислокаций происходит вдоль направления наибольших касательных напряжений. Переход от одноосного напряженного состояния к двухосному позволяет управлять тензором напряжений.

19. Пластичность зависит от условий деформирования, и ее следует рассматривать не как свойство какого-либо материала, а как его состояние. Характеристики технологической пластичности тем лучше, чем большую роль в схеме напряженно-деформированного состояния играют сжимающие напряжения в данном процессе формообразования. При всестороннем неравномерном сжатии создается возможность для деформирования тугоплавких металлов (к ним относится молибден), которые по другим схемам деформирования испытывают хрупкое разрушение. Аналитические зависимости для компонентов тензоров напряжений и деформаций, полученные на основе разработанной модели деформирования листового молибдена в условиях двухслойного пакета, позволяют управлять их значениями в зависимости от поставленной задачи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники. М.: Логос, 2006, 496 с.
2. Квасников И.А. Введение в теорию электропроводимости и сверхпроводимости. М.: Книжный дом «Либроком», 2010, 216с.
3. Климов В.В. Наноплазмоника. М.: Физмалит, 2009, 480с.
4. Воронов В.К., Подоплелов А.В., Сагдеев Р.З. Физика на переломе тысячелетий: Физические основы нанотехнологий. М.: Книжный дом «Либроком», 201, 432с.
5. Головин Ю.И. Основы нанотехнологий. М.: Машиностроение, 2012, 656 с.
6. Аракелян С.М., Кучерик А.О., Прокошев В.Г., Рау В.Г., Сергеев А.Г. Введение в фемтонанофотонику: фундаментальные основы и лазерные методы управляемого получения и диагностики наноструктурированных материалов. Под общ.ред. С.М. Аракеляна. М.: Логос, 2015, 744с.
7. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. М.: Физматлит, 2005, 416 с.
8. Суздаев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: КомКнига, 2006, 592 с.
9. Парфенов В.В. Квантовые размерные структуры в электронике: оптоэлектроника. Казань, 2007, 16с.
10. Гуляев Ю.В. Пустовойт В.И. Усиление поверхностных волн в полупроводниках. ЖЭТФ, **47**, 2251-2253 (1964).
11. Coldren L.A. Kino G.S., Monolithic acoustic surface – wave amplifier. Appl.Phys.Letters, **18**, 317-319 (1971).
12. Тавгер Б.А. Демиховский В.Я.. Квантовые размерные эффекты в полупроводниковых и полуметаллических пленках. УФН, **96**, 61-86 (1961).
13. Алферов Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур. ФТП, **32**, 1, 3-18 (1997).
14. Fewster P.F. X –ray diffraction from low –dimensional structures. Semiconductor Science Technology, **8**, 1915-1934 (1993).

15. Konig U. Future application of heterostructures. *Physica Scripta*, **68**, 90-101 (1996).
16. Мокеров В.Г., Федоров Ю.В., Гук А.В. и др. Нанoeлектронные СВЧ транзисторы на основе гетероструктур, соединений A_3B_5 с двумерным электронным газом. *Зарубежная радиоэлектроника*, **8**, 40-61 (1998).
17. Geilikman B.T. The adiabatic approximation and Frohlich model in the theory of metals. *Journal of Low Temperature Physics*, **4**, 189-208 (1971).
18. Гуревич В.Л., Скобов В.Г., Фирсов Ю.А. Гигантские квантовые осцилляции поглощения звука металлами в магнитном поле. *ЖЭТФ*, **40**, 786-791 (1961).
19. Балкарей Ю.И., Эпштейн Э.М. Влияние сильной электромагнитной волны на распространение ультразвука в квантующем магнитном поле. *ЖЭТФ*, **63**, 660-666 (1972).
20. Jacobson E.H., Shiren N.S., Tucker E.B., Effects of 9.2 – kMs/sec Ultrasonics on Electron Spin Resonances in Quartz. *Phys.Rev.Letters*, **3**, 81 (1959).
21. Инфельд Э., Роуландс Дж. Нелинейные волны, солитоны и хаос./пер. с англ. под ред. Е.А. Кузнецова (2-е изд.). М.: Физматлит, 2006, 480с.
22. Скотт Э. Нелинейная наука. Рождение и развитие когерентных структур/пер. с англ. И.А.Макарова под ред. проф. А.Л.Фрадкова. М: Физматлит, 2007, 550с.
23. Богоявленский О.И. Опрокидывающиеся солитоны. Нелинейные интегрируемые уравнения. М.: Наука. Гл.ред.физ.-мат.лит., 1991, 320с.
24. Гликман Б.Ф. Математические модели пневмогидравлических систем. М.: Наука, 1986, 368с.
25. Трифонова Т.А., Аракелян М.М., Аракелян С.М. Взаимосвязанность поверхностных и подземных вод в единой системе речного водосборного бассейна; проявление в катастрофических явлениях в условиях интенсивных ливней в высокогорных областях с резкорасчлененным горным рельефом (на примере модели селеобразования). *Научно-теоретический журнал «Успехи современного естествознания»*, № 1, 53-67 (2013).
26. Петухов Б.В. О режимах движения дислокаций, контролируемых подвижностью солитонов. *ФТТ*, **25**, 6, 1822 – 1829 (1983).

27. Петухов Б.В. Квантовая теория активационного движения дислокаций в рельефе Пайерлса. Физика низких температур, **12**, 7, 749-755 (1986).
28. Альшиц В. И., Инденбом В. Л. Динамическое торможение дислокаций. УФН, **115**, 1, 3-39 (1975).
29. Proctor W.G., Tani W.H. Saturation of nuclear electric quadrupole energy levels by ultrasonic excitation. Phys.Rev. **98**, 1854 (1955).
30. Нагибаров В.Р., Самарцев В.В., Соловаров Н.К. Акустический парамагнитный резонанс. ЖЭТФ, **61**, 4, 1636-1646 (1971).
31. Хабибуллин Б.М., Харахашьян Э.Г. Парамагнитный резонанс на электронах проводимости в металлах. УФН, **111**, 483-505 (1973).
32. Overhauser A.W. Paramagnetic Relaxation in Metals. Phys.Rev, **89**, 689-700 (1953).
33. Elliott R.I. Theory of the effect of spin-orbit coupling on magnetic resonance in some semiconductors. Phys.Rev., **96**, 266-279 (1954).
34. Yafet Y. Calculation of the g factor of metallic sodium. Phys.Rev., **85**, 478-478 (1952).
35. Yafet Y. Factors and spin-lattice relaxation of conduction electrons. Phys. State Sol., **14**, 1-98 (1963).
36. Ген М.Я., Петин В.И. Электронный парамагнитный резонанс в амелкодисперсном литии. ЖЭТФ, **48**, 29-33 (1965).
37. Харахашьян Э.Г. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, КГУ, Казань, 1968.
38. Feher G., Kip A.F. Electron spin resonance absorption in metals. 1. Experimental Phys.Rev., **98**, 337-348 (1955).
39. Алексеева Т.О., Харахашьян Э.Г., Черкасов Ф.Г. Некоторые вопросы магнитной радиоспектроскопии и квантовой акустики. Казань, 1968, 43с.
40. Asayata K., Oda Y. Size Dependence of the Electron Spin Relaxation in Metallic Lithium. J. Phys.Soc.Japan, **22**, 3, 937 (1967).
41. Hultdt L., Staffin T. Infrared Absorption of Photo Generated free Carriers in Germanium. Phys.Rev.Lett., **1**, 236-237 (1958).

42. Тавгер Б.А., Демиховский В.Я. О некоторых эффектах, обусловленных дискретностью энергетического спектра электрона в тонких пленках. ФТТ, **5**, 2, 644-648(1963).
43. Johnson E.I., Larsen D.M. Polaron Induced Anomalies in the Interband Magnetoabsorption of InSb. Phys.Rev. Lett., **16**, 655-669 (1966).
44. Liang W.Y., Yoffe A.D. Transmission Spectra of ZnO Single Crystals.PhysRev.Lett.,**20**, 59-62 (1968).
45. Ron A., Hornig D.F. Overtone Frequency and Double Excitation in the Hydrogen Chloride Crystal.J.Chem. Phys., **39**, 1129-1130 (1963).
46. Wortic M. Bound States of Two Spin Waves in the Heisenberg Ferromagnet.Phys.Rev., **132**, 85-97 (1963).
47. Ruvalds I., Zawadowsky A. Two phonon resonance and hybridization of the resonance with single phonon states. Phys.Rev., **B.2**, 1172-1175 (1970).
48. Агранович В.М. Теория биэкситонов в молекулярных кристаллах для инфракрасной области спектра. ФТТ, **12**,2, 562-570 (1970).
49. Левинсон И.Б., Рашба Э.И. Пороговые явления и связанные состояния в поляронной проблеме. УФН, **111**, 683-718 (1973).
50. Левинсон И.Б., Рашба Э.И. Связанные состояния электрона и фонона в сильном магнитном поле, обусловленные нелинейным электрон-фононным взаимодействием. ЖЭТФ, **62**,1502-1512 (1972).
51. Мельников В.И. Связанные состояния электрона и фонона в одномерной системе. ЖЭТФ,**72**, 2345-2349 (1977).
52. Питаевский Л.П. Слабосвязанные состояния возбуждений в кристалле. ЖЭТФ, **70**,738-749 (1976).
53. Борн М., Хуань Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: ИЛ, (1958), 488с.
54. Бровман Е.Г., Каган Ю.М. Фононы в непереходных металлах.УФН,**112**, 369-426 (1974).
55. Мигдал А.Б. Взаимодействие электронов с колебаниями решетки в нормальном металле.ЖЭТФ, **34**, 1438-1446 (1958).

56. Kohn W. Image of the Fermi Surface in the Vibration Spectrum of a Metal. *Phys. Rev. Lett.*, **3**, 393-394 (1959).
57. Brockhouse B.N., Rao K.R., Woods A.D. Image of the Fermi Surface in the Lattice Vibrations of Lead. *Phys. Rev. Lett.*, **7**, 93-95 (1961).
58. Афанасьев А.М., Каган Ю. Об особенностях в законе дисперсии фононов, связанных с электрон-фононным взаимодействием. *ЖЭТФ*, **43**, 1456-1463 (1962).
59. Тавгер Б.А., Демиховский В.Л. Взаимодействие электронов с фононами в тонких полупроводниковых пленках при низких температурах. *Радиотехника и электроника*, **12**, 9, 1631-1635 (1967).
60. Романов Ю.А., Ерухимов М.Ш. Спектр фононов в тонких пленках. *ФТТ*, **11**, 2258-2262 (1969).
61. Гальперин Ю.М., Гуревич В.Л., Козуб В.И. Нелинейные эффекты при распространении высокочастотного звука в нормальных проводниках. *УФН*, **128**, 1, 106-132 (1979).
62. Иванов С.Н., Мансфельд Г.Д., Хазанов Е.Н. Поглощение ультразвука решеткой антимонида индия при 77°K. *ФТТ*, **15**, 317-318 (1973).
63. Hutson A.R. Acousto-Electric Explanation of Non-Ohmic Behavior in Piezoelectric Semiconductors and Bismuth. *Phys. Rev. Lett.*, **9**, 296-298 (1962).
64. Гальперин Ю.М., Дричко И.Л., Лайтман Б.Д. Нелинейные эффекты при усилении звука в n-InSb в сильном магнитном поле. *ФТТ*, **12**, 5, 1437-1442 (1969).
65. Аракелян М.М. Электронное поглощение ультразвука в поле сильной электромагнитной волны в условиях размерного квантования. *ФТП*, **8**, 594-598 (1974).
66. Гантмахер В.Ф., Долгополов В.Т. Возбуждение стоячих звуковых волн электромагнитным методом. *Письма в редакцию ЖЭТФ*, **5**, 1, 17-20 (1967).
67. Аракелян М.М. Усиление звука в условиях парамагнитного резонанса в размерно квантованных средах. *ФТТ*, **21**, 3038-3042 (1979).

68. Аракелян М.М., Сардарян В.С. Особенности распространения звука в одномерно квантованных средах в условиях электронного парамагнитного резонанса. Изв. АН Арм.ССР, Физика, **12**, 22-27 (1977).
69. Магнитная квантовая акустика. М.: Наука . 1977, 197 с.
70. Erukhimov M.Sh, Tavger B.A. Quantum longitudinal galvano magnetic phenomena in thin semiconductor and semimetal films. Soviet Physics JETP, **26**,3, 560-565 (1968).
71. Dyson F. Electron Spin Resonance Absorption in Metals. II. Theory of Electron Diffusion and the Skin Effect. Phys.Rev.**98**, 349-359 (1955).
72. Кравченко Э.Л., Орлов В.Г., Шлыков М.П. Магнитные свойства кислородных соединений висмута (111). Успехи химии, **75**, 1,86-104, (2006).
73. Зильберман А.Е. Электрон в слабом периодическом электрическом и однородном магнитном поле. ЖЭТФ,**23**, 1,49-54 (1952).
74. Горячих С.И., Хабибуллин Б.М. Парамагнитное поглощение ультразвука электронами проводимости в квантующем магнитном поле. ФТТ, **17**, 263-268 (1975).
75. Аракелян М.М. Non-linear Ultrasound Absorbtion in an Electromagnetic Wave Field under Quantum Size Effect Conditions. Phys.stat.sol.(b), **89**,37-43(1978).
76. Зильберман П.Е., ФТТ, **12**, 2839 (1970).
77. Gal'perin Yu. M., Kagan V. D. NonlinearEffects Associated with the Propagation of Short Wavelength Sound in Conductors ЖЭТФ, **59**, 1657-1666 (1970).
78. Коган В.Г., Кресин В.З. Поглощение света в тонких пленках при наличии квантового размерного эффекта. ФТТ, **11**, 3230-3235 (1969).
79. Слэтер Дж. Диэлектрики, полупроводники, металлы.М. Мир, 1969, 648 с.
80. Аракелян М.М., Аванесян А.С. О фононном спектре в условиях одномерного квантования,ФТТ,**18**, 11, 3363-3366 (1976).
81. Бровман Е.Г., Каган Ю. О фононном спектре металлов. ЖЭТФ, **52**, 557-574 (1967).
82. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах. М. Мир, 1965, 383с.

83. Королюк А.П. Исследование коэффициента поглощения звука в висмуте. ЖЭТФ, **51**, 697-706(1966).
84. Карлсон Д., Зегмюллер А. Journ. dephys, 33, Suppk. **C4**, 81 (1971).
85. Sardaryan V.S., Arakelyan M.M. Bound States of Electrons and Optical Phonons under Conditions of One-Dimensional Quantizing. Phys.stat.sol.(b), **85**, 459-463 (1978).
86. Сборник задач по теоретической физике. М. Высшая школа, 1972, 336 с.
87. Альфаро В., де Редже Т. Потенциальное рассеяние. М. Мир, 1966, 274 с.
88. Уиттекер Е.Т., Ватсон Дж. Курс современного анализа. Физматгиз, 1963, 515с.
89. Аракелян М.М., Гукасян Г. М., Довлатян Т.Г.. Солитонные решения в полупроводниковой дисперсной среде и моделирование их эволюции. Известия НАН Армении, Физика, **36**,4, 195-202(2001).
90. Аракелян М.М. , Гукасян Г.М. Эволюция солитонов в двумерно квантованном полупроводнике. Полупроводниковая микроэлектроника. Материалы 3 национальной конференции. Севан.103-107 (2001).
91. Солитоны в действии. Под редакцией Лонгрена К., Скотта Э.. М. Мир. 1981, 310с.
92. Чугаевский Ю.В. Элементы теории нелинейных и быстропеременных волновых процессов. Кишинев: Штиинца. 1974, 183 с.
93. Алферов Ж.И., Васильев А.И., Иванов С.В., Копьев П.С., Леденцов Н.Н., Луценко М.Э, Мельцер Б.Я., Устинов В.М.. Снижение пороговой плотности тока в GaAs-AlGaAs ДГС РО квантоворазмерных лазерах ($J_n=52 \text{ А}\cdot\text{см}^{-2}$, $T=300 \text{ К}$) при ограничении квантовой ямы короткопериодной сверхрешеткой с переменным шагом. Письма в ЖТФ, **14**, 1807-1810 (1988).
94. Басс Ф.Г., Гуревич Ю.Г. Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М.: Наука, 1975, 399 с.
95. Мартинсон Л.К., Малов Ю.И. Дифференциальные уравнения математической физики: Учеб.для вузов. 2-е изд. Под ред. Зарубина В.С., Крищенко А.П.. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002, 368 с.

96. Аракелян М.М., Сардарян В.С. Солитоны в размерно квантованных полупроводниках в присутствии сильной световой волны. Тезисы докладов XI Всесоюзной конференции по когерентной и нелинейной оптике. 336-337 (1982).
97. Блох М.Д., Магарилл Л.И., Энтин М.В. Теория явлений переноса в сильном электрическом поле для кристаллов без центра инверсии. ФТП, **12**, 249-257 (1978).
98. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972, 599 с.
99. Додд Р., Эйлбек Дж., Гиббон Дж., Моррис Х. Солитоны и нелинейные волновые уравнения. Пер. с англ. М.: Мир, 1988, 694с. Карпман В.И. Нелинейные волны в диспергирующих средах. М.: Наука.1973, 175 с.
100. Аракелян М.М. Некоторые особенности взаимодействия топологических солитонов. Материалы Международной конференции, посвященной 40-летию основания АрГУ, 42-45(2009).
101. Сардарян В.С. , Аракелян М.М. К теории распространения электромагнитных и звуковых волн в условиях размерного квантования. Известия АН Арм.ССР, Физика,**10**, 275-282 (1975).
102. Аракелян М.М., Петросян А.М. Особенности распространения и взаимодействия топологических солитонов. Сборник трудов международной второй научной конференции Горисского государственного университета, 4-10(2011).
103. Эстрин Ю.З., Исаев Н.В., Григорова Т.В., Пустовалов В.В., Фоменко В.С., Шумилин С.Э., Брауде И.С., Малыгин С.В., Решетняк М.В., Янечек М. Низкотемпературная пластическая деформация ультрамелкозернистого алюминия. Физика низких температур, **34**, 8, 842–851 (2008).
104. Малыгин Г.А. Пластичность и прочность микро-и нанокристаллических материалов. ФТТ,**49**, 6, 961-982 (2007).
105. Малыгин Г.А. Влияние рельефа Пайерлса на размерные эффекты при пластической деформации микро и нанокристаллов ОЦК металлов. ФТТ, **54**, 6, 1141-1148 (2012).

106. Melik-Shahnazarow W. A., Mirzoewa I. I. Naskidashwili I.A. Tunneling of the dislocation kink in aluminium. *Pis'ma v JETF*, **43**, 5, 247-249 (1986).
107. Gleiter H. Nanostructured materials: basic concepts and microstructure *Acta Materialia*. **48**, 1, 1-29 (2000).
108. Аракелян М.М. Предельное состояние тонких полупроводниковых пленок в поле сильных звуковых волн . Ереван. Вестник Инженерной Академии Армении, **13**, N4, с. 494-496 (2016).
109. Arakelyan M.M. Characteristic properties the motion of dislocations during the deformation of single crystals. *International Scientific journal "Materials Science" "Non-equilibrium Phase Transformations"*, is.4, p.11-13 (2017).
110. Hosford W.F., Caddell R.M. *Metal Forming. Mechanics and metallurgy*. USA. Cambridge, 2007, 330 p.
111. Аракелян М.М. , Гукасян Г. М. Солитонная модель движения дислокаций в полупроводниках с учетом диссипации. Полупроводниковая микроэлектроника. Материалы четвертой национальной конференции, Севан. 74-77 (2003).
112. Nazaryan E.A., Arakelyan M.M. Development of analytical models for forming axisymmetric drawing. *Machines, Technologies, Materials. International virtual journal*. ISSN-0226, Year VII, issue 12 (2013).
113. Аракелян М.М. Анализ явления деформационного упрочнения монокристаллов. Труды IV международной конференции «Актуальные проблемы механики сплошной среды», 21-26 сентября 2015, Цахкадзор, Армения, 52-57(2015).
114. Arakelyan M.M. An Analysis of the Phenomenon of Strain Hardening of Single Crystals. *International Journal of Emerging Technology and Advanced Engineering*. **5**, 11, 280-285 (2015).
115. Никитенко В.И., Фарбер Б.Я., Иунин Ю.Л. О возможности экспериментального изучения кинетики формирования и подвижности перегибов на дислокационной линии. *Письма в ЖЭТФ*, **41**, 3, 103-105 (1985).
116. Fogel M.B., Trullinger S.E., Bishop A.R., Krumhans J.A. Dynamics of sine-Gordon solitons in the presence of perturbations. *Phys.Rev.*, **15**, 3, 1578-1592 (1977).

117. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. М.: Высшая школа, 1983, 144с.
118. Arakelyan M.M., Avetyan K.T., Nazaryan E.A. Features of propagation and interaction of one-dimensional topological solitons in crystals. Days on diffraction'2007. St.Peterburg.Russia.Proceedings of the International Conference DD'07, 10-13(2007).
119. Авакян Р.М., Аракелян М.М., Назарян Э.А., Чубарян Э.В. Особенности взаимодействия и движения дислокаций в условиях холодной пластической деформации. Труды VI Международной конференции «Проблемы динамики взаимодействия деформируемых сред». Горис-Степанакерт, 7-12 (2008).
120. Аракелян М.М. Квантовые эффекты при движении дислокаций в алюминии. Сборник научных трудов по материалам Международной научно-практической конференции «Наука, образование, общество: проблемы и перспективы развития», Тамбов, 10-13(2014).
121. Аракелян М.М. Анализ и моделирование процесса движения дислокаций в монокристаллах алюминия. Известия НАН Армении, Физика, **50**, 1, 126-133 (2015).
122. Аракелян М.М. Особенности движения дислокаций в алюминии с учетом рельефа Пайерлса в присутствии ультразвука. Физика твердого тела, **59**, вып.11, 2218-2222(2017).
123. Ларкин А.И., Овчинников Ю.И. Квантовое туннелирование с диссипацией. Письма в ЖЭТФ, **37**, 7, 322-325 (1983).
124. Судзуки Т, Есинага Х., Такеути Ц. Динамика дислокаций и пластичность. М.: Атомиздат, 1972, 294 с.
125. Deterre Ph., Penguin P., Vanoni F. Appl. Phys., **14**, 807 (1979).
126. Петухов Б.В., Покровский В.Л. Квантовое и классическое движение дислокаций в потенциальном рельефе Пайерлса. ЖЭТФ, **63**, 2, 634-647 (1972).
127. Блохинцев Д.И.. Основы квантовой механики. М.: Высшая школа, 1961, 512 с.
128. Колмогоров В.Л. Механика обработки металлов давлением. Москва «Металлургия», 2001, 688 с.
129. Андреев А.Ф. Диффузия в квантовых кристаллах. УФН, **118**, 251-271 (1976).

130. Браун О.М., Кившарь Ю.Ц. Модель Френкеля—Конторовой. Концепции, методы и приложения. Пер.с англ.под ред. Савина А.В. М.: Физматлит, 2008, 536 с.
131. Пустовалов В.В., Исаев Н.В., Григорова Т.В., Фоменко В.С., Шумилин С.Э., Брауде И.С., Малыхин С.В., Решетняк М.В., Янечек М. Низкотемпературная пластическая деформация ультра мелкозернистого алюминия. Физика низких температур, **34**, 842-851 (2008).
132. Parkhomenko T.A., Pustovalow V.V. The Low-Temperature Yield Stress Anomaly in Metals and Alloys. Phys.stat.Sol.(a), **74**, 1,11-42 (1982).
133. Пустовалов В.В.Влияние сверхпроводящего перехода на низкотемпературную скачкообразную деформацию металлов и сплавов. Физика низких температур. **26**, 6, 515-535(2000).
134. Arakelyan M.M. Removal of misfit dislocations layers in heterostructures. Proceedings of spie Photonics and Micro-and Nano-structured Materials 8414, 0277-786x.(2012).
135. Аракелян М.М. Многосолитонный метод удаления дислокаций несоответствия из функциональной области гетероструктур. Известия НАН Армении, Физика. **51**,4, 508-515 (2016).
136. Tkhorik, Ju. A. Hazan, L.S. Plastic deformation and misfit dislocations in the heteroepitaxial systems, Kiev: Naukova dumka, 1983, 304с.
137. Ovidko I.A., Shejnerman A.G. Misfit dislocation in thin films on plastically deformed substrates . Fizika tverdogo tela, **44**, 7, 1243-1248 (2002).
138. Obayashi Y., Shintani K. Critical thickness of a heteroepitaxial film on a twist-bonded compliant substrate. J.Appl.Phys., **88**,1, 105-114 (2000).
139. Matthews I.W., Blakeslee A.E., Defects in epitaxial multiplayers. J.Cryst.Growth, **32**,2 , 265-273 (1976).
140. Gutkin M.Ju., Obid'ko I.A. Defect structures on internal interfaces in nanocrystalline and polycrystalline films.Materials Physics and Mechanics, **8**, 108-148 (2009).

141. Zhang X.G., Rodriguez A. Wang X., Li P, Jain F.C., Ayers J.E. Complete removal of threading dislocations from mismatched layers by patterned heteroepitaxial processing. *Applied Physics Letters*, **77**, 16, 2524-2526 (2000).
142. Ovid'ko I.A. Misfit dislocation walls in solid films. *J.Phys.:Condens. Matter*, **11**, 6521-6527 (1999).
143. Fedorenko A.I., Vincent R. The epitaxial growth of cobalt on copper. *Phil. Mag.*, **24**, 187, 55-62 (1971).
144. Yagi K., Takaynagi K., Kobayashi K., Nonio G. In situ observation of formation of misfit dislocations in pseudomorphic monolayer overgrowth of metals and non-metals. *J.Cryst.Growth*, **9**, 1, 84-97 (1971).
145. Багдасаров Х.С., Горянов Л.А. Тепло и массаперенос при выращивании монокристаллов направленной кристаллизацией. М.: Физматлит, 2007, 180 с.
146. Новокшенов В.Ю. Введение в теорию солитонов. Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002, 96 с.
147. Trifonova T.A., Arakelian M.M., Arakelian S.M. New approach to mudflow formation as a 3D-process of interaction for surface and subterranean water in the frames of unified the river litho- water collection basin. *Geophysical Research. Geophysical Research Abstracts* . 15, EGU 2013-2902, 2013. European Geosciences Union General Assembly 2013, Vienna, Austria, 2013.
148. Arakelian M.M., Trifonova T.A., Arakelian S.M. Surface and subterranean water interaction in catastrophic flood and mudflow for a river mountain basin: basic principles for risk assessment. IGU Kyoto Regional Conference (KRC), Abstracts, CS18-12, Kyoto, Japan, 2013. http://oguchaylab.csis.u-tokyo.ac.jp/IGU2013/html/igu_2013_program4.html
149. Matthias Jakob, Oldrich Hungr. Debris-flow. Hazards and Related Phenomena Springer, 2005, 745p.
150. Ньюэлл А. Солитоны в физике и математике. М.: Мир, 1987, 328 с.
151. Трифонова Т.А. Речной водосборный бассейн как самоорганизующаяся природная геосистема. *Известия РАН*, №1, 28-36 (2008).

152. Рац М.В., Чернышев С.Н. Трещиноватость и свойства трещиноватых горных пород. Недра, М.:1970, 160 с.
153. Чернышев С.Н. Трещины горных пород. М.: Наука, 1983, 239 с.
154. Селевые потоки: катастрофы, риск, прогноз, защита. Труды Второй конференции, посвященной 100-летию со дня рождения Флейшмана С.М.. Ответственный редактор Черноморец С.С.. М.: Географический факультет МГУ (2012).
155. Trifonova T.A., Arakelian M.M., Arakelian S.M. New approach to mudflow formation as a 3D-process of interaction for surface water and groundwater due to base alimentation in the river basin . EGU General Assembly 2013 .Geophysical Research. Abstracts.**15**, EGU2013-2902(2013).
156. Перов В.Ф. Селеведение. Учебное пособие. М.: Географический факультет МГУ, 272 (2012).
157. Черноморец С.С. Селевые очаги до и после катастрофы. М.: Научный мир, 2005, 184с.
158. Виноградов Ю.Б. Транспортный и транспортно-сдвиговый селевые процессы. В сб.: Селевые потоки. № 4. М.: Гидрометеиздат, 3-19 (1980).
159. Виноградов Ю.Б. Классификация селевых явлений. В сб.: Селевые потоки, № 4, 46-51 (1980).
160. Трифонова Т.А. Формирование почвенного покрова гор: геосистемный аспект. Почвоведение. №2, 174-181 (1999).
161. Трифонова Т.А. Динамика горных бассейновых геосистем на основе распознавания их графических образов по космофотоснимкам. Изв. РАН., Сер.геогр. № 2. 91–98 (1999).
162. Керженцев А.С., Майснер Р., Демидов В.В. Моделирование эрозионных процессов на территории малого водосборного бассейна. М.: Наука. 2006, 224 с.
163. Трифонова Т.А. Горное речное русло: энергетическая модель развития. М.: Докл. РАН., **337**,3, 334-338 (1994).
164. Хортон Р.Е. Эрозионное развитие рек и водосборных бассейнов., пер. с англ. М.: ИЛ, 1948, 158с.

165. Strahler A.N. Quantitative geomorphology of drainage basins and channel networks. In: Hand book of Applied Hydrology, V.T. Chow (ed.). McGraw-Hill: NY; 4.40-4.70 (1964).
166. Исаченко А.Г. Ландшафтоведение и физико-географическое районирование. М.: Высшая школа, 1991, 366 с.
167. Трифонова Т.А. Энергетическая модель развития горного русла. М.: Геоморфология. №4, 13-22 (1995).
168. Davies T. R. H.. Large debris flows: A macro-viscous phenomenon. *Acta Mechanica*. **63**, Issue 1-4, 161-178 (1986).
169. Зекцер И.С., Подземные воды как компонент окружающей среды. М.: Научный мир . 2001. 328 с.
170. Пиннекер Е.В. Основы гидрогеологии. Общая гидрогеология. Новосибирск: Наука, 1980, 225 с.
171. Welch L.A., Allen D.M., Hydraulic conductivity characteristics in mountains and implications for conceptualizing bedrock ground water flow. *Hydrogeology Journal*. 15 March 2014; doi 10.1007/s10040-014-1121-5.
172. Кулаков А.В., Румянцев А.А. Введение в физику нелинейных процессов .М.: Наука, 1988, 160 с.
173. Lecture 11 by Gennady El. Perturbed KdV equation: effects of variable environment and damping [Электронный ресурс] Loughborough University Leicestershire, UK [Официальный сайт]. URL: <http://homepages.lboro.ac.uk/~mage2/NLW-L11.pdf>.
174. Котляков В.М., Денисов Л.В., Долгов С.В. и др. Наводнение 6-7 июля 2012 года в городе Крымске. Изв. РАН, сер. географическая, №6, 80-88 (2012).
175. Trifinova T.A., Tulenev N.U., Trifonov D.V., Arakelian S.M., Arakelian M.M. Catastrophic floods and debris: trigger processes and manifestation in dynamics for a river basin (analysis and modeling for a Krimsk event on july 06-07, 2012). Proceedings 111 International Conference “Debris Flows: Disasters, Risk, Forecast, Protection” . Yuzhno-Sakhalinsk, September 22-26, 159-163 (2014).
176. Шашин В.М., Гидромеханика. М.: Высшая школа, 1990, 384 с.

177. Казаков Н.А. Лавинный фронт как уединенная волна – солитон. Материалы гляциологических исследований, вып. 100, 24 (2005).
178. Arakelyan M.M., Kanoyan H. The peculiarity of a nervous pulse propagation. European Journal of Biophysics, **1**, 1,1-5 (2013).
179. Arakelyan M.M. The Peculiarty of Nervous Pulse Propagation. An International Symposium on Solvation and Ionic Effects in Biomolecules: Theory to Experiment. Abstracts.35-36, May, Tsakhkadzor, Armenia (2010).
180. Маркин В.С., Пастушенко В.Ф., Чисмаджев Ю.А. Физика нервного импульса.УФН, **123**,2, 289–332 (1977).
181. Колмогоров А.Н., Петровский И.Г., Пискунов Н.С. Бюлл.МГУ, сер. А. **1**. в.6,1-26 (1937).
182. Волобуев А.Н., Жуков Б.Н., Овчинников Е.Л.и др. Нелинейное моделирование распространения потенциала действия. Биофизика, **36**, 546-551(1991).
183. Bressloff P. C. and Coombes S. Physics of the extended neuron . International Journal of Modern Physics. №11, 2343-2392(1997).
184. Фомин Ц.В., Беркинблит М.Б. Математические проблемы в биологии.М.: Физматлит.1973,200с.
185. Hodgkin A., Huxley J. A quantitative description of membrane current and its application to conduction an dexcitationin nerve. J. Physiol.(Lnd) **117**, 500-544 (1952).
186. Асланиди О.В., Морнев О.А. Могут ли сталкивающиеся нервные импульсы отражаться? Письма в ЖЭТФ, **65**, 7, 553-558 (1997).
187. Aslanidi O.V., Mornev O.A., Echo in excitable cardias Fi-bers.Mathematical Modelling Journal. **11**, 9, 3-22 (1999).
188. Aldonin G.M., Soliton Models of Processes in Biostructures.Journal of Radio Electronics, 5, November (2006).
189. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. М.: Металлургия, 1983, 232 с.

190. Wielke B., Thermally activated dislocation movement at plastic deformation. Czech.J.Phys. **B 31**,142-156 (1981).
191. Петухов Б.В. Модификация пайерлсовского механизма движения дислокаций случайным рельефом внутренних микронапряжений. Кристаллография.**42**, 2, 197-205 (1997).
192. Петухов Б.В., Покровский В.Л. Туннелирование дислокаций. Письма в ЖЭТФ, **15**, 1, 63-66 (1972).
193. Аракелян М.М, Анчаракян С.А., Аветян К.Т. Инверсия отношений скоростей винтовых и 60^0 -ных дислокаций во внешних магнитных полях для кристаллов кремния с примесями и без примесей. Межвузовский сборник научных трудов, Физика, в.1, 26-30 (1992).
194. George A., Champier G., Velocities of Screw and 60^0 Dislocations in Si. Phys.stat.sol. (a), **53**, 529-540 (1979).
195. Инденбом В.Л., Альшиц В.Н., Чернов В.Н. Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ. Ленинград: Наука, 1980.208 с.
196. Блистанов А.А.и др. Акустические кристаллы. Справочник. М.: Наука, 1982, 632 с.
197. Бондаренко И.Е. и др. Препринт ИФТТ АН СССР, Черноголовка, 1981.
198. Сорокин Л.М., Подрезов А.А., Старобогатов Р.О., Тимашева Т.П. Влияние примесной атмосферы около сидячей петли Франка на ее равновесную конфигурацию. ФТТ, **25**, 7, 2051-2056(1983).
199. Любов Б.Я. Диффузионные процессы в неоднородных твердых средах. М.: Наука,1981, 296с.
200. Бондаренко И.Е., Ерофеев Б.И., Никитенко В.И. и др.Влияние электрически активных примесей на подвижность индивидуальных дислокаций в германии. ЖЭТФ, **64**, 6, 2197-2209 (1973).
201. Avetian K.T., Ancharakian S.H., Arakelian M.M.Stress Distribution at Biaxial Stressed Conditions. Physika stat. sol.(a), **111**, K161-K166 (1989).

202. Анчаракян С. А., Назарян Э.А., Аветян К.Т., Аракелян М.М. Распределение полей напряжений при двухосной деформации. Известия АН Арм.ССР, Физика **42,2**, 87-92 (1989).
203. Аветян К.Т., Анчаракян С.А., Безирганян П.А., Аракелян М.М. Способ определения распределения механических напряжений в монокристаллах. А.С.СССР №1289201(1986).
204. Erofeev N.E., Nikitenko V.I., Ocvenzku V.B. Effect of impurities on the Individual Dislocation Mobility in Silicon. Phys.stat.sol. **35** , 79-88 (1969).
205. Прочность, устойчивость, колебания. Справочник в 3 томах. т.2: Машиностроение, 1968, 463 с.
206. Manasevit H.M., Simpson W.I. Single crystal silicon on a sapphire substrate. J. Appl. Phys, **35**, 1349-1351(1964).
207. Курносов А. И., Юдин В. В. Технология производства полупроводниковых приборов и интегральных микросхем. Высшая школа 1986, 368 с.
208. Twig M.E., Richmond E.D., Pellegrino J.G. Elimination of microtwins in silicon on sapphire by molecular beam epitaxy . Appl. Phys. Lett. **54** , 18, 1, 1766-1768 (1989).
209. Parker M. A., Sinclair R., Sigmon T. W. Lattice images of defect-free silicon on sapphire prepared by ion implantation . Appl. Phys. Lett. **47**, 6, 15, 626-628 (1985).
210. Tamura M., Nomura M. Observation of chemical-vapor-deposited silicon on sapphire by transmission electron microscopy . Appl. Phys. Lett. Vol. **11**, 6, 196-198 (1967).
211. Случинская И.А. Основы материаловедения и технологии полупроводников. М.: 2002. 376 с.
212. Twigg M.E., Richmond E.D., Pellegrino J.G. Spectroscopic ellipsometry studies of crystalline silicon implanted with carbon ions . J. Appl. Phys.. Vol. **67**, 8, 3706-3710(1990).
213. Инденбом В.Л., Никитенко В.И., Миусков В.Ф. Напряжения и дислокации в полупроводниках. М.: изд. АН СССР, 1962.
214. Багдасаров Х.С. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. М.: Физматлит, 2004, 160 с.

215. Назарян Э.А., Аракелян М.М. Способ изготовления контейнеров для выращивания монокристаллов. Патент 1502 А2 РА, МКИ 7 В21D 22/26.NAM 20040011, Заявл.26.01.2004, опубл.26.011.(2004).
216. Назарян Э.А., Аракелян М.М. Способ изготовления контейнеров для выращивания монокристаллов. Патент 1828 А2 РА, МКИ В21D 22/26.NAM 20050207, Заявл.18.11.2005, опубл.18.11(2005).
217. Назарян Э.А., Аракелян М.М. Напряжения и деформации листового молибдена в условиях плоского напряженного состояния с учетом деформационного упрочнения. Изв. НАН РА, Механика, 59, 4, 74-83 (2006)
218. Назарян Э.А., Аракелян М.М. Глубокая вытяжка контейнера из листового молибдена для выращивания монокристаллов.Заготовительные производства в машиностроении. 8, 25-27 (2006)
219. Назарян Э.А., Аракелян М.М. Аналитическая модель процесса осесимметричной вытяжки. Заготовительные производства в машиностроении, №12, Москва,23-27 (2013)
220. Marciniak Z., Duncan J.L., Hu S.J. Mechanics of Sheet Metal Forming. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2002, 228 p.
221. HillR. The Mathematical Theory Plasticity. Oxford: Classic Texts, 1998, 362 p.
222. Назарян Э.А., Аракелян М.М., Симонян А.С. Анализ процесса изгиба двухслойного листового пакета. М. Заготовительные производства в машиностроении, № 8, 19-23 (2014)
223. Nazaryan E.A., Arakelyan M.M., Simonyan A.S. Analysis of the process of bending the two-layer sheet package. International Virtual Journal for science, technics and inovations for the Industry. XI International Congress Machines. Technologies. Materials.**8**, 34-37 (2014)
224. Назарян Э.А, Аракелян М.М. О технологических свойствах листового молибдена. Известия НАН РА и ГИУА, Сер.ТН,т.LV1, N1,36- 39(2003).
225. Nazaryan E.A., Arakelyan M.M. Reseach in the Process of Deep Drawing of Sheet Molybdenum Containers for Growing Single Crystals. Proceedings IDDRG

International Deep Drawing Research Group 2006 Conference. June 19-21, Porto, Portugal, p.489-495 (2006).