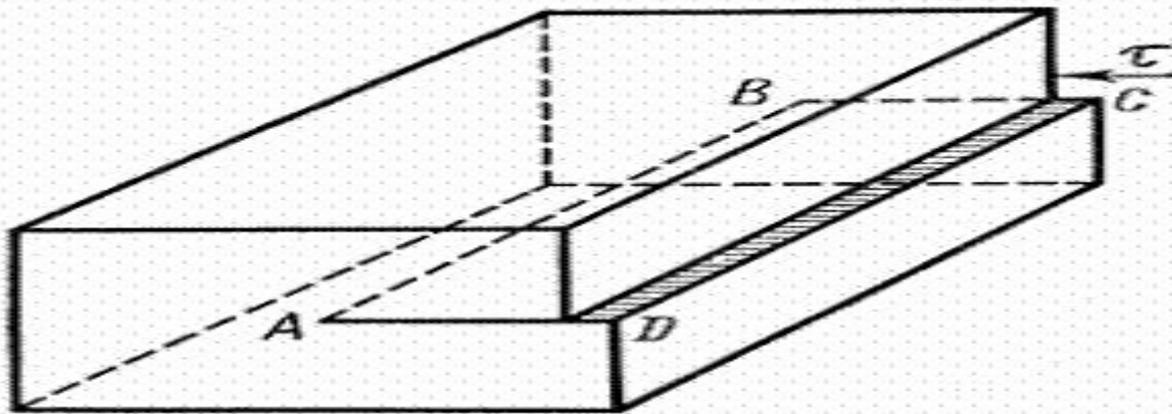
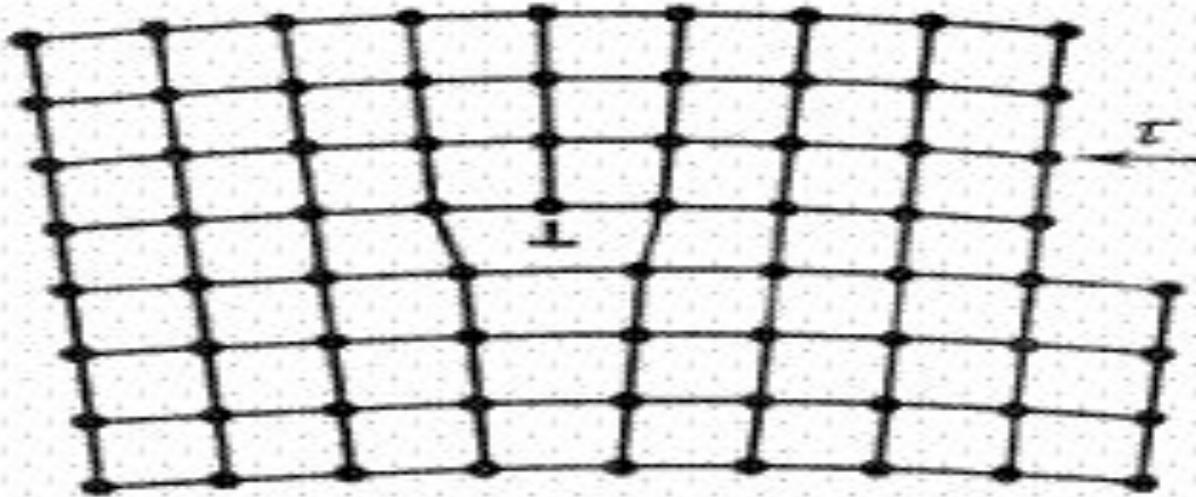


Вектор Бюргерса. Дислокации.

Линейный дефект — это нарушение правильности структуры вдоль линии (не обязательно прямой).

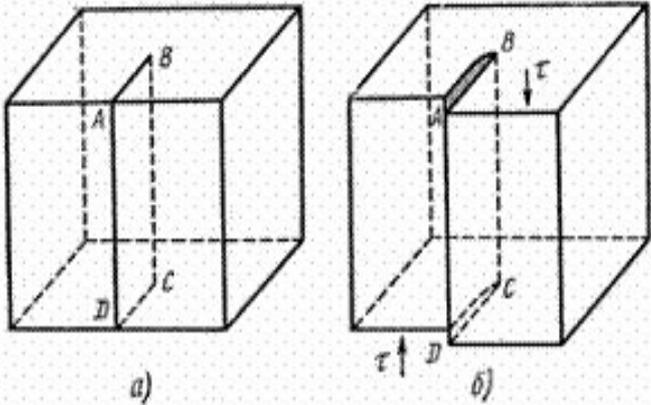
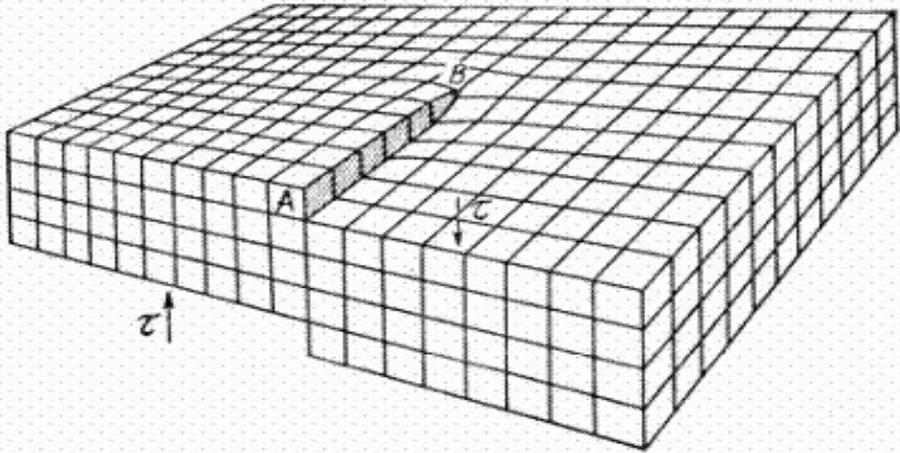
Дислокация — это граница области незавершенного сдвига или нарушение правильности структуры вдоль некоторой линии, которая не может оборваться внутри кристалла.

Это количественная характеристика, описывающая искажения кристаллической решетки вокруг дислокации. Если в идеальном кристалле провести замкнутый контур, а затем попытаться провести такой же контур вокруг области с дислокацией, то контур будет разорван. Вектор, который нужно провести для замыкания этого контура, и есть вектор Бюргерса дислокации. Он характеризует величину и направление сдвига атомных плоскостей, приводящего к образованию дислокации. В зависимости от угла φ между вектором Бюргерса и линией дислокации различают дислокации *винтовые* ($\varphi=0$), *краевые* ($\varphi=90^\circ$) и смешанные (произвольный угол φ). Смешанные дислокации могут быть *разложены* на краевую и винтовую компоненты. Образование краевой дислокации можно представить как результат удаления из кристалла одной кристаллической полуплоскости. Линия, отделяющая дефектную область кристалла от бездефектной, называется линией дислокации. Простейшая наглядная модель краевой дислокации — книга, у которой от одной из внутренних страниц оторвана часть. Тогда, если страницы книги уподобить атомным плоскостям, то край оторванной части страницы моделирует линию дислокации.



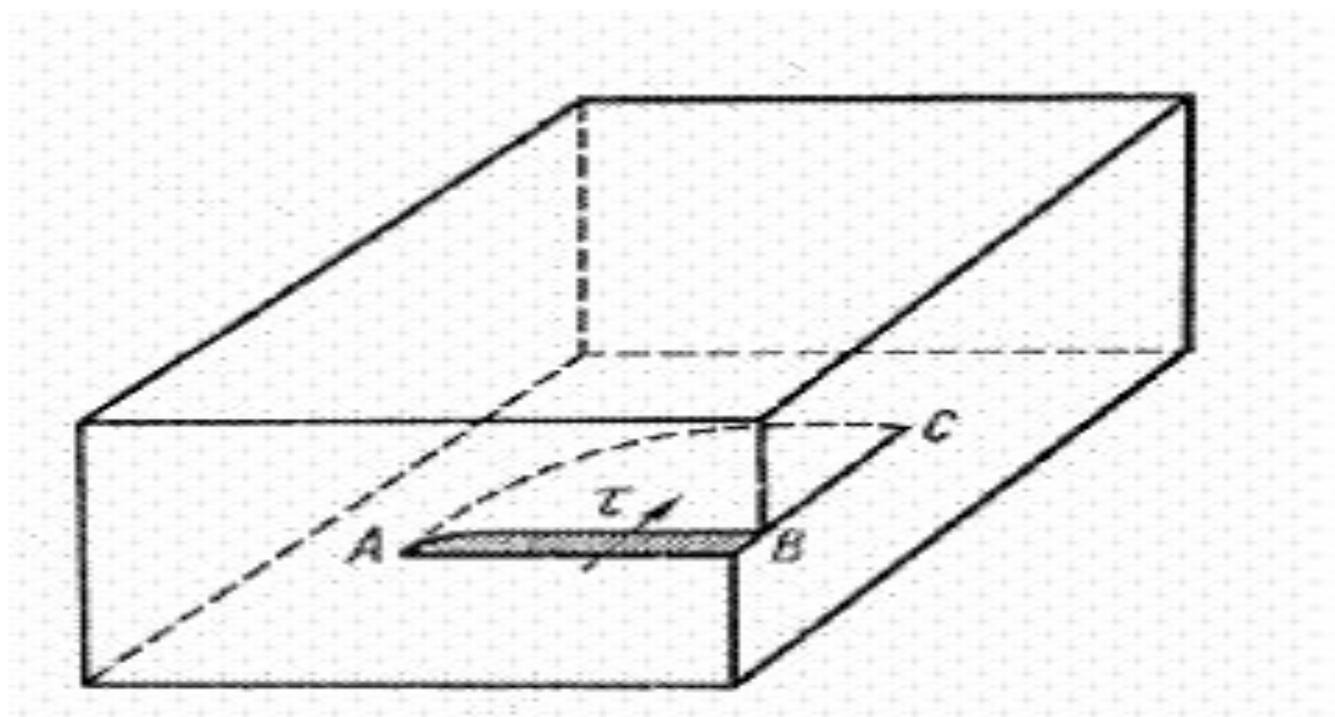
AB – линия краевой дислокации
CD – ступенька на поверхности
кристалла

Кристалл, содержащий винтовую дислокацию, состоит не из параллельных атомных плоскостей, а как бы из одной-единственной атомной плоскости, закрученной как винтовая лестница. Ось этого винта и есть линия винтовой дислокации. Выход винтовой дислокации на поверхность кристалла заканчивается незарастающей ступенькой. Если попробовать «залечить» винтовую дислокацию, добавив недостающую атомную плоскость, то ступенька только сдвинется на одно межплоскостное расстояние, но не ликвидируется.

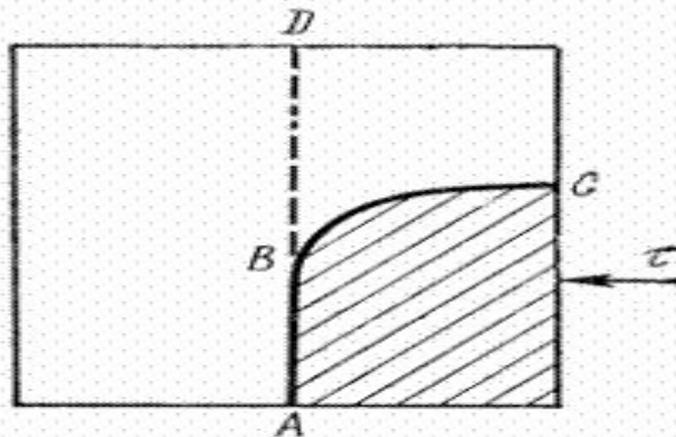


BC – линия винтовой дислокации
AB – ступенька на поверхности кристалла.

Смешанная дислокация:



. Линия дислокации не может кончаться внутри кристалла. Она должна либо выходить на поверхность кристалла, либо разветвляться на другие дислокации, либо образовывать внутри кристалла замкнутую петлю. Допустим, что ABC на рисунке есть граница области сдвига, т. е. краевая дислокация. Ясно, что сдвиг не может просто оборваться внутри кристалла: либо линия дислокации продолжается на всю длину кристалла, т. е. до точки D либо, если сдвиг локализован, как на рисунке, сдвинутая область ограничена линией BC, т. е. винтовой дислокацией. В общем случае ABC— это смешанная дислокация, которая внутри кристалла оборваться не может. Точно так же, если сдвиг происходит внутри кристалла, не выходя на поверхность, то линия, ограничивающая область сдвига, не может остаться незамкнутой.



Характерной особенностью дислокаций является их подвижность: под действием внешних сил дислокация может перемещаться по кристаллу.

Движение дислокации связано с пластической деформацией кристалла.

Пусть под действием внешней силы в кристалле произошел сдвиг и границей области сдвига является краевая дислокация. Для того чтобы этот сдвиг распространялся дальше и дислокация передвинулась в плоскости скольжения на одно межплоскостное расстояние, не нужен перенос массы и не нужно разрывать связи во всех атомных плоскостях, пересекающих плоскость скольжения. Достаточно, чтобы разорвалась связь по одной соседней плоскости, тогда дислокация переместится на одно междуатомное расстояние вправо. При этом лишняя атомная полуплоскость сама никуда не перемещается, а как бы передает «эстафету» соседней плоскости: целостность плоскости, которая была оборванной, восстанавливается, а соседняя плоскость становится оборванной. Сдвиг происходит не одновременно по всей плоскости скольжения, а зарождается в слабом месте и постепенно распространяется по плоскости, так что в каждый момент в энергетически невыгодном положении находится лишь относительно небольшое количество атомов около границы между сдвинутой и несдвинутой частями кристалла. Граница зоны сдвига, т. е. линия дислокации, перемещается в плоскости скольжения «по эстафете». Когда скользящая краевая дислокация пересекает весь кристалл и выходит на его поверхность, верхняя половина кристалла оказывается сдвинутой относительно нижней на одно межплоскостное расстояние, так что на боковой поверхности кристалла образуется ступенька, а на всем пути, где прошла дислокация, восстанавливается целостность решетки. Важно отметить, что скольжение дислокации и пластическая деформация кристалла произошли без переноса массы (консервативное движение). Плоскость, в которой движется краевая дислокация, — это плоскость скольжения, а направление вектора сдвига определяет направление скольжения.

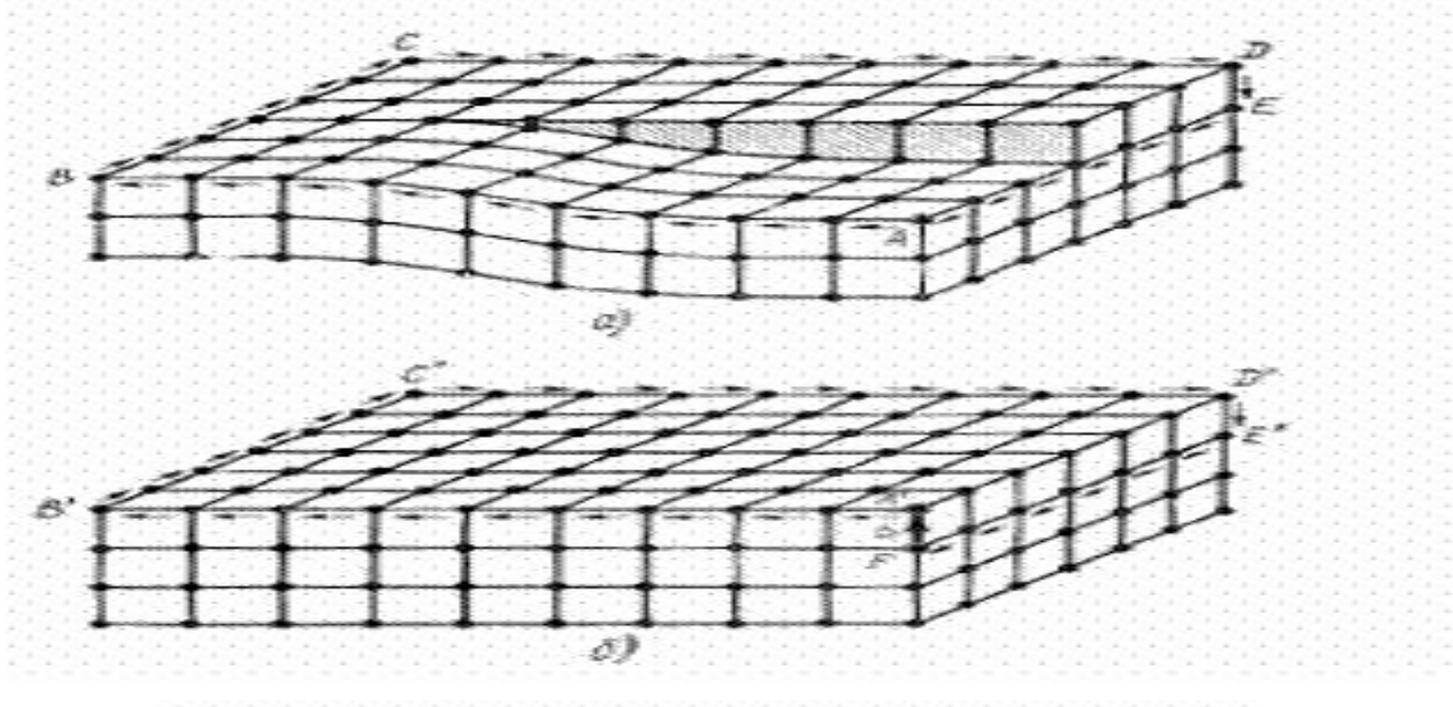
совпадающее с осью дислокации, а плоскостью скольжения может быть любая атомная плоскость, содержащая это направление. Иначе говоря, винтовая дислокация может двигаться по любой из плоскостей, принадлежащих к зоне, для которой осью служит направление скольжения. Скольжение винтовой дислокации также не связано с переносом массы, т. е. происходит консервативно.

Итак, краевая дислокация связана с определенной плоскостью скольжения, винтовая дислокация может переходить из одной плоскости скольжения в другую, перемещаясь по цилиндрической поверхности, осью которой является направление скольжения, параллельное линии дислокации.

На рисунке показана схема построения контура Бюргерса для винтовой дислокации.

а) – замкнутый контур в кристалле с дислокацией

б) – разомкнутый контур в совершенном кристалле



Вектор Бюргерса в \mathbf{b} есть ветвление вектора смещения или циркуляция тензора упругих смещений в решетке при обходе вокруг линии дислокации:

$$\mathbf{b} = \oint \mathbf{u}_L dL$$

Упругие смещения, вызванные дислокацией в решетке, рассчитывают методами теории упругости сплошной среды, исключив из рассмотрения область ядра дислокации. В поле упругих смещений решетки дислокации играют такую же роль, как вихревые линии в потоке жидкости или электрические токи в магнитном поле. В отсутствие вихрей движение жидкости носит потенциальный характер и циркуляция вектора скорости по замкнутому контуру равна нулю:

$$\oint \mathbf{v}_L dL = 0$$

Если же имеются вихри, то циркуляция вектора скорости по замкнутому контуру уже не равна нулю, а пропорциональна суммарной интенсивности вихрей, охваченных контуром. Циркуляция напряженности магнитного поля так же равна нулю лишь в отсутствие токов I , а если контур L охватывает токи, то интеграл $\oint I_L dL$

пропорционален сумме сил токов, протекающих через контур. Для кристаллической решетки роль потенциала играет вектор упругих смещений \mathbf{u} , циркуляция которого по замкнутому контуру оказывается не равной нулю, если этот контур охватывает дислокацию. Величина \mathbf{b} равна

$$\mathbf{b} = \oint \mathbf{u}_L dL$$

Понятие о *векторе Бюргерса* позволяет уяснить основное различие между дислокациями и такими линейными дефектами, как цепочки вакансий или междоузельных атомов. *Контур Бюргерса*, проведенный вокруг области, содержащей линейную цепочку точечных дефектов, не отличается от контура Бюргерса, проведенного во круг бездефектной области, а для цепочки точечных дефектов вектор Бюргерса равен *нулю*. Только для дислокаций $\mathbf{b} \neq 0$.

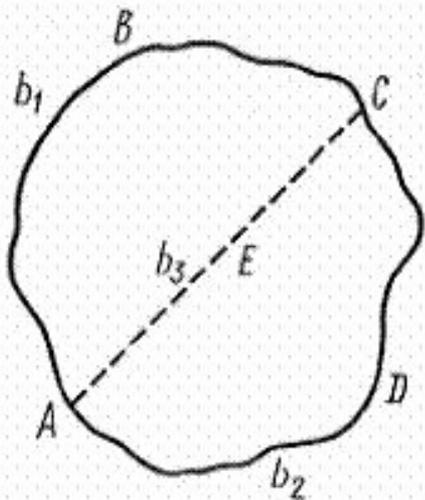
Вектор Бюргерса это всегда один из векторов трансляций решетки. По этому модуль и направление \mathbf{b} ограничены рядом дискретных значений, определяемых структурой решетки.

Величина и направление вектора не зависят от размеров контура Бюргерса и выбора точки начала контура, а полностью определяются видом дислокации. У краевой дислокации вектор Бюргерса равен межатомному расстоянию и перпендикулярен дислокационной линии, у винтовой дислокации — параллелен ей.

Вектор Бюргерса — наиболее инвариантная характеристика дислокации; он одинаков для всех участков линии дислокации и сохраняется при движении дислокации. Докажем это от противного. Пусть ABCDA — замкнутая линия дислокаций, не связанная с другими. Допустим, что векторы Бюргерса дислокаций \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 на участках ABC и CDA не равны друг другу. Тогда в этих двух областях скольжение должно идти по-разному и, следовательно, они должны были разделяться другой дислокацией, на пример AEC, со своим вектором Бюргерса \mathbf{b}_3 . Однако, поскольку ABCDA - замкнутая петля, не связанная с другими дислокациями, \mathbf{b}_3 т. е. $\mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_2$.

Вектор Бюргерса не может измениться также при консервативном движении дислокации, хотя ориентация ее может меняться. В общем случае дислокацию в решетке кристалла можно определить как произвольную пространственную кривую, вдоль которой вектор Бюргерса $\mathbf{b} = \text{const}$. Условие инвариантности \mathbf{b} вдоль линии дислокации означает, что дислокация не может оканчиваться внутри кристалла, а должна либо замыкаться сама на себя, образуя замкнутую петлю, либо выходить на свободную поверхность, либо разветвляться на другие дислокации, как указывалось выше.

Правило Франка: если считать все дислокации идущими в точку их разветвления — так называемый дислокационный узел, то сумма их векторов Бюргера в узле должна быть равна нулю (аналогично первому правилу Кирхгофа для ветвления токов); при этом знак \mathbf{b} определяется направлением обхода контуров, видимым из точки разветвления.



Мощностью дислокации называется величина

$$|\mathbf{b}| = na \sqrt{k^2 + l^2 + m^2}$$

Плотность дислокаций — это число линий дислокаций, пересекающих единичную площадку в кристалле.

Энергия изолированной дислокации в системе площади A с вектором Бюргера длины b равна:

$$E = \frac{vb^2(1 + \tau)}{4\pi} \ln \frac{A}{A_0}$$

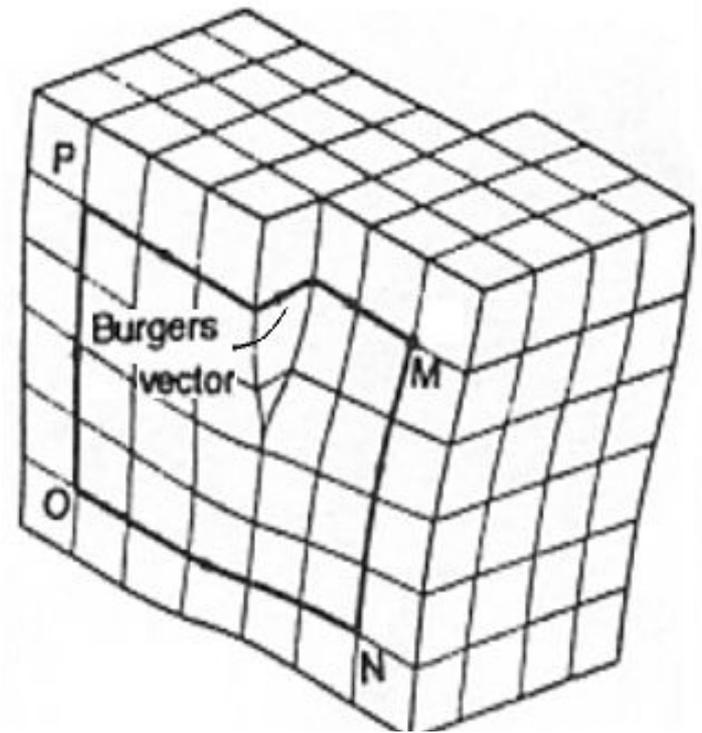
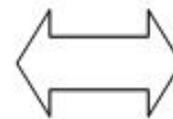
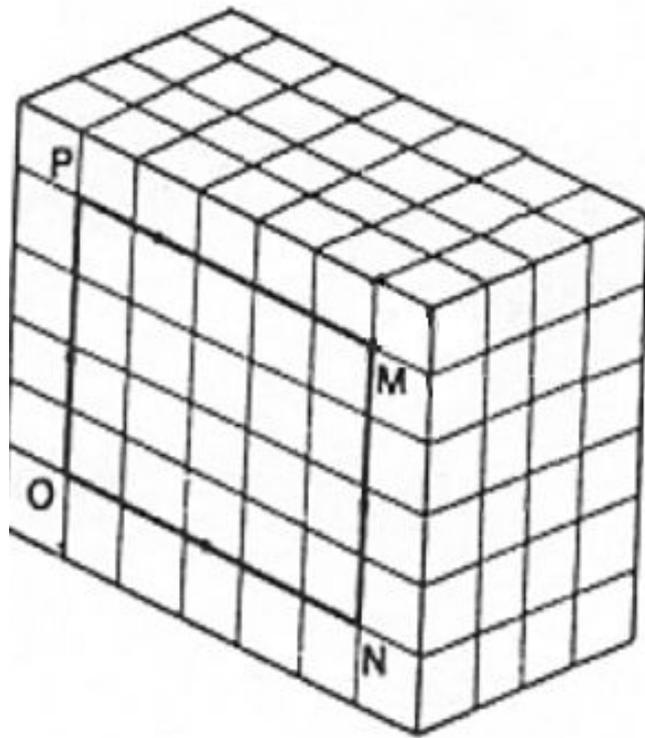
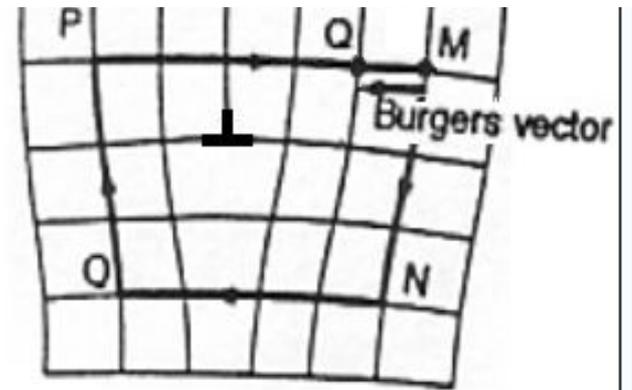
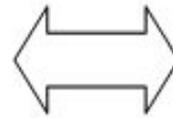
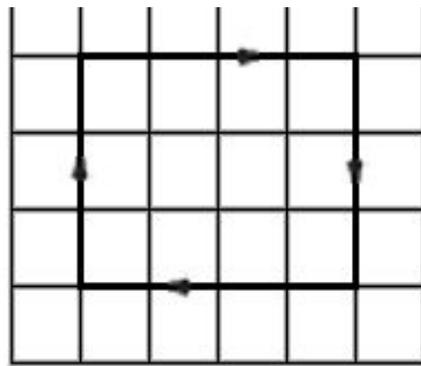
Здесь τ — коэффициент Пуассона, v — модуль жесткости, A_0 — площадь порядка $b \cdot b$.

Связанная с ней энтропия:

$$S = k_B \ln \frac{A}{A_0} + O(1)$$

Критическая температура, при которой появляются дислокации:

$$k_B T_c = \frac{vb^2(1 + \tau)}{4\pi}$$



2. Модель газа заряженных частиц с логарифмическим потенциалом.

$$H(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$$

$$U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = -2q_i q_j \ln \left| \frac{r_i - r_j}{r_0} \right| + 2\mu \quad r > r_0$$
$$= 0 \quad r < r_0$$

Возьмем потенциал μ достаточно большим, чтобы в системе было мало свободных зарядов (основная часть в виде диполей).

Средний квадрат расстояния между частицами в дипольной паре:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int_{r_0}^{\infty} dr r^3 \exp\{-2\beta q^2 \ln(r/r_0)\}}{\int_{r_0}^{\infty} dr r \exp\{-2\beta q^2 \ln(r/r_0)\}} = r_0^2 \frac{\beta q^2 - 1}{\beta q^2 - 2}$$

Здесь $\beta = 1/kT$

Вероятность нахождения пары в данном месте находится интегрированием

$$\exp\{-2\beta\mu - 2\beta q^2 \ln(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/r_0)\}$$

по заданной площадке (двойной интеграл). Таким образом, расстояние d между парами в среднем составляет:

$$\begin{aligned} \frac{1}{d^2} &\approx \frac{e^{-2\beta\mu}}{r_0^4} \int d^2\mathbf{r} \exp\{-2\beta q^2 \ln(r/r_0)\} + O(e^{-4\beta\mu}) \\ &= \frac{\pi}{r_0^2} e^{-2\beta\mu} \frac{1}{\beta q^2 - 1}. \end{aligned}$$

Тогда:

$$\langle (r/d)^2 \rangle \approx \frac{\pi e^{-2\beta\mu}}{\beta q^2 - 2} \ll 1 \quad \text{for} \quad \beta q^2 < 2.$$

Из этого условия находится критическая температура, при достижении которой начинается фазовый переход от дипольной плазмы к заряженной.

В окрестности
минимума:

3. Двумерная ху модель

Запишем гамильтониан этой системы:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j)$$

Суммирование только по ближайшим
соседям.

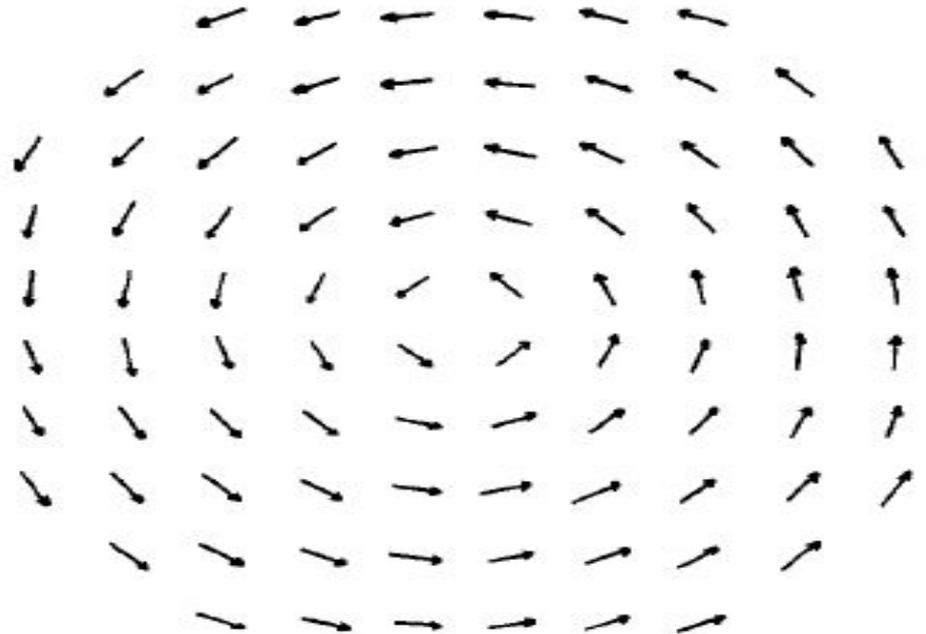
В окрестности
минимума:

$$H - E_0 \approx \frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2 = J \sum_r (\Delta\phi(r))^2$$

Из этого можно получить для системы
спинов:

$$H - E_0 \approx \pi J \ln \frac{R}{a}$$

(для примера можно
рассмотреть)



Положим

$$\phi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) + \bar{\phi}(\mathbf{r})$$

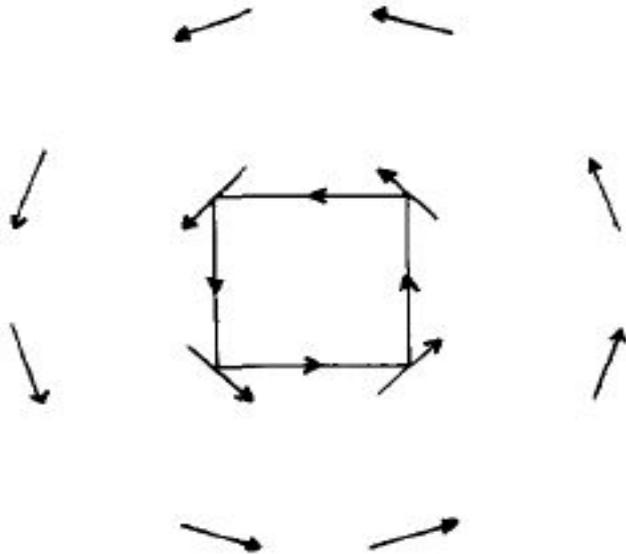
Здесь второе слагаемое – распределение углов в окрестности минимума, а второе – отклонение от него.

$$H - E_0 \approx J \sum_{\mathbf{r}} (\Delta\psi(\mathbf{r}))^2 + J \sum_{\mathbf{r}} (\Delta\bar{\phi}(\mathbf{r}))^2$$

$$\oint \Delta\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{and} \quad \oint \Delta\bar{\phi}(\mathbf{r}) = 2\pi q.$$

Абсолютному минимуму отвечает $q=0$ для любого контура.

Для удобства перейдем к непрерывным функциям. Для этого введем функцию на дуальной решетке – плотность вихрей



$$\rho(\mathbf{r}^*) = \sum_e q_e \delta_{\mathbf{r}^* \mathbf{r}_e^*}.$$

$$\nabla^2 \bar{\phi}(\mathbf{r}) = 2\pi \rho(\mathbf{r}).$$

И энергия запишется в виде:

$$H - E_0 = J \int d^2r (\nabla\psi)^2 - 4\pi^2 J \iint d^2r d^2r' \rho(r) g(r - r') \rho(r') \\ + 2\pi J \iint d^2r d^2r' \rho(r) \rho(r') \ln \frac{R}{r_0}$$

Функция $g(r)$ – это функция Грина оператора Лапласа для квадратной решетки.

Спин-спиновая корреляционная функция:

$$\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle = \langle \exp\{i(\phi_i - \phi_j)\} \rangle = \exp\left(-\frac{k_B T}{2J} g(r_i - r_j)\right)$$

where (Spitzer 1964)

$$g(r) \underset{|r| \gg a}{\approx} \frac{1}{2\pi} \ln \left| \frac{r}{r_0} \right|$$

and

$$\frac{r_0}{a} = \frac{e^{-\gamma}}{2\sqrt{2}} \quad (\gamma = \text{Euler's constant}).$$

$$\gamma = 0.5772\dots$$

Гамильтониан для системы $2n$ спинов при отсутствии внешнего поля можно приближенно записать как:

$$H_{2n}(r_1 \dots r_{2n}) = J \int d^2r (\nabla\psi(r))^2 - 2\pi J \sum_{i \neq j}^{2n} q_i q_j \log \left| \frac{r_i - r_j}{\tau} \right| + \mu \sum_i q_i^2$$

Здес

ь

$$2\mu q^2 = 4\pi J q^2 \log(\tau/r_0) \approx 2\pi^2 J q^2$$

Энергия вихря

:

$$E_v \Big|_{|r_i - r_j| \gg a} \approx -2\pi J \sum_{i \neq j} q_i q_j \ln \left| \frac{r_i - r_j}{r_0} \right|$$

Более

точно:

$$E_v = -2\pi J \sum_{i \neq j} q_i q_j \ln \left| \frac{r_i - r_j}{a} \right| - 2\pi J \sum_i q_i^2 \ln \frac{r_0}{a} \quad \text{for } |r_i - r_j| > a$$

$$= 0 \quad \text{otherwise.}$$

Ниже критической температуры вихри связаны в пары с нулевой суммой. Выше – свободно двигаются под возмущением любого слабого поля.

4. Двумерный кристалл.

u_{ij} – смещения от положения равновесия атомов двумерного кристалла.

Напряжение, связанное со смещением, равно:

$$\sigma_{ij} = 2\nu u_{ij} + \lambda \delta_{ij} u_{kk}$$

Тогда внутренняя энергия

будет:

$$U = \frac{1}{2} \int d^2r u_{ij} \sigma_{ij}$$

Далее выделим в смещениях дислокационную часть.

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}(\mathbf{r}) + \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r})$$

where

$$\oint \mathbf{v}(\mathbf{r}) d\mathbf{l} = 0 \quad \text{and} \quad \oint \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) d\mathbf{l} = \mathbf{b}$$

Здесь \mathbf{b} – вектор Бюргерса.

Для удобства будем считать, что его величина одна и та же для всех дислокаций и порядка a – периода решетки.

Введем функцию напряжений χ :

Функция η будет описывать распределение дислокаций.

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \epsilon_{ik} \epsilon_{jl} \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{r})}{\partial x_k \partial x_l}$$

$$\nabla^4 \chi(\mathbf{r}) = K \eta(\mathbf{r})$$

$$\epsilon_{12} = +1, \quad \epsilon_{21} = -1, \quad \epsilon_{ij} = 0 \text{ otherwise.}$$

$$K = \frac{4\nu(\nu + \lambda)}{2\nu + \lambda} = 2\nu(1 + \tau).$$

Причем:

$$\eta(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} \epsilon_{ij} b_j^{(\alpha)} \frac{\partial}{\partial x_i^{(\alpha)}} \delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}^{(\alpha)})$$

Где \mathbf{r} и \mathbf{b} – положение и вектор Бюргерса для α -й дислокации соответственно.

Энергия дислокаций:

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \int d^2\mathbf{r} \chi(\mathbf{r}) \eta(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2} K \int d^2\mathbf{r} d^2\mathbf{r}' \eta(\mathbf{r}) g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}') + O\left(\sum_{\alpha\beta} \mathbf{b}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{b}^{(\beta)} \ln \frac{R}{a}\right) \end{aligned}$$

Где $g(\mathbf{r})$ – функция Грина для уравнения на функцию распределения дислокаций

$$g(\mathbf{r}) \Big|_{|\mathbf{r}| \gg a} \approx \frac{1}{8\pi} r^2 \ln \left| \frac{\mathbf{r}}{r_0} \right|$$

Для дипольной пары дислокаций:

$$U_{\text{pair}}(\mathbf{r}) \Big|_{|\mathbf{r}| \gg a} \approx \frac{Kb^2}{4\pi} \left(\ln \left| \frac{\mathbf{r}}{a} \right| - \frac{1}{2} \cos 2\theta \right) + 2\mu$$

Здесь θ – это угол между \mathbf{b} и \mathbf{r} .

5. Двумерная бозе-жидкость

Мы предполагаем, что имеется двумерная бозе-жидкость, *основное состояние* которой содержит бозе-конденсат. Однако при $T \neq 0$

этот бозе-конденсат должен разрушаться флуктуациями фазы; задача состоит в описании этих флуктуаций, которые и определяют далекие корреляции при низких температурах.

Пусть N — число частиц в системе, S — ее объем (т. е. площадь, т. к. система двумерная),

$$\rho = \frac{N}{S} = \frac{1}{\bar{l}^2}$$

— средняя плотность (\bar{l} — среднее расстояние между частицами).

Энергия основного состояния, которое мы обозначим $|N\rangle$,

где N — полное число частиц, имеет при $N \gg 1$ вид

$$E_0(N) \approx N\varepsilon(N/S) = N\varepsilon(\rho),$$

где $\varepsilon(\rho)$ — удельная энергия (на одну частицу), имеющая предел при $N \rightarrow \infty$, который мы будем считать достаточно гладкой функцией от ρ .

В силу этого, изменение числа частиц на $\delta N \ll N$, чему соответствует изменение плотности

$$\delta \rho = \frac{\delta N}{S} = \frac{\delta N}{N} \rho,$$

приводит к состоянию с энергией, равной

$$E_0(N + \delta N) \approx E_0(N) + \mu \delta N - \frac{1}{2N\mathcal{H}} (\delta N)^2 + o\left(\left(\frac{\delta N}{N}\right)^2\right)$$

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N} = \rho \epsilon'(\rho) + \epsilon(\rho) \quad \frac{1}{\mathcal{H}} = N \frac{\partial \mu}{\partial N} = 2\rho \epsilon'(\rho) + \rho^2 \epsilon''(\rho)$$

где m — масса атомов; $\frac{1}{\mathcal{H}} = mc_{зв}^2$ есть некоторая энергия, по порядку величины равная энергии взаимодействия атомов.

Квантовый характер жидкости выражается неравенством $\xi \gg l$,

где через ξ обозначена характерная длина волны де-Бройля в основном состоянии

$$\xi = \hbar / mc_{зв} = \hbar \sqrt{\mathcal{H}/m}.$$

Разделим теперь всю систему на ячейки, имеющие макроскопические размеры a

а много больше, чем характерная длина волны Де-Бройля, но много меньше, чем характерный размер, на котором происходит уничтожение конденсата флуктуациями фазы. Для простоты будем считать их квадратными, а центры – узлы решетки. Пренебрежем частью гамильтониана, описывающей взаимодействие между ячейками. Тогда собственные состояния – произведения волновых функций, описывающих состояния ячеек. Такие произведения соответствуют всевозможным размещениям частиц по ячейкам, при которых в каждую ячейку попадает число частиц:

$$N_r = \bar{N}_a + \nu_r,$$

$$E(\dots, \nu_r, \dots) = E_0 + \sum_r \frac{1}{2\bar{N}_a \mathcal{H}} \nu_r^2 + o(\nu_r^2),$$

Пусть P – проектор на подпространство, натянутое на состояния

$$|\dots, \nu_r, \dots\rangle = \prod_r |\nu_r\rangle_r,$$

$$H_{\text{эфф}} = E_0 + \sum_r \frac{1}{2\bar{N}_a \mathcal{H}} \hat{\nu}_r^2 + \sum_{r\delta} P H_{r\delta} P,$$

$$\hat{\nu}_r |\dots, \nu_r, \dots\rangle = \nu_r |\dots, \nu_r, \dots\rangle,$$

$$\hat{R}_r^m |\dots, \nu_r, \dots\rangle = |\nu_r + m\rangle \prod_{r' \neq r} |\nu_{r'}\rangle_{r'} = |\dots, \nu_r + m, \dots\rangle,$$

то есть оператор \hat{R}_r^m изменяет число частиц в r -той ячейке на m , а числа частиц в остальных ячейках оставляет неизменными. С помощью оператора P можно перейти к оператору $H_{r\delta}$:

$$PH_{r\delta}P = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m \hat{R}_r^m \hat{R}_{r+\delta}^{-m}.$$

$$|\dots, \varphi_r, \dots\rangle = \sum_{\{\dots, \nu_r, \dots\}} |\dots, \nu_r, \dots\rangle e^{i \sum_r \nu_r \varphi_r}.$$

$$|\varphi_r\rangle_r = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} |\nu\rangle_r e^{i\nu\varphi_r}.$$

$$\hat{\nu}_r |\dots, \varphi_r, \dots\rangle = -i \frac{\partial}{\partial \varphi_r} |\dots, \varphi_r, \dots\rangle,$$

$$\hat{R}_r^m |\dots, \varphi_r, \dots\rangle = e^{im\varphi_r} |\dots, \varphi_r, \dots\rangle,$$