

НОВАЯ ФОРМА РЕЗОНАНСНЫХ ЛИНИЙ, УШИРЕННЫХ ДИСЛОКАЦИЯМИ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ

© Н.С.Аверкиев, В.С.Визгин, Н.И.Саблина

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
(Поступила в Редакцию 26 мая 1995 г.)

Предсказывается, что в тонких пленках или полуограниченных средах неоднородное уширение, обусловленное прямолинейными краевыми дислокациями, дает характерную «клювообразную» форму линий оптических или магнитных резонансов с практически δ -образным всплеском на центральной частоте и слабозатухающими крыльями. Показано, что этот эффект в ЭПР приводит к характерным экспериментально наблюдаемым следствиям.

Эффект неоднородного уширения резонансных линий в тонких пленках и полуограниченных средах качественно отличается от уширения в 3D-случае. Это происходит из-за квази-2D-распределения уширяющих линию дефектов и зондов, на которых наблюдается резонансный переход. Не менее существенным является и изменение вида упругого и электрического поля дефекта в квази-2D-случае из-за возникновения сил изображения. Важная роль этих двух факторов была доказана при теоретическом и экспериментальном исследовании неоднородного уширения линии люминесценции под действием упругих полей центров дилатации в тонкой пленке [1-3]. Дислокации являются одним из наиболее сильных упругих дефектов в кристаллах и относятся к типичным дефектам в тонких пленках. Все это указывает на актуальность рассмотрения неоднородного уширения резонансных линий упругими полями дислокаций в тонких пленках и полуограниченных средах. Первое рассмотрение этой проблемы было предпринято в [2], где исследовался эффект винтовых дислокаций. В настоящей работе впервые рассмотрен актуальный случай краевых дислокаций, который привел к важным выводам о компенсирующем влиянии сил изображения в квази-2D-ситуации и о существовании новой формы неоднородно уширенной резонансной линии, зависящей от геометрии дислокаций в тонкой пленке.

1. Упругое поле краевых дислокаций в полуограниченной среде

Поле деформаций вдали от дислокаций в объеме изотропной среды убывает весьма медленно (как r^{-1} , где r — расстояние от ядра дислокации). Вследствие этого можно ожидать, что наличие свободных границ, на которых отсутствуют внешние силы, изменит форму деформационного поля как вблизи поверхности, так и вдали от нее. Для того

чтобы проиллюстрировать влияние границ, мы рассчитали вектор деформации от краевых прямолинейных дислокаций в полуограниченной изотропной среде. Пусть линия дислокации параллельна оси z , граница вакуум-среда параллельна плоскости (xz) . Линия дислокации находится от границы на расстоянии $y_0 > 0$, вектор деформации $U(r)$ определяется в точке r , причем $y > 0$.

Для краевых прямолинейных дислокаций в такой ситуации возможны две ориентации вектора Бюргерса \mathbf{b} относительно оси y : $\mathbf{b} \parallel x$ или $\mathbf{b} \parallel y$. Для неограниченной среды вектор $U(r)$ для двух ориентаций \mathbf{b} отличался лишь обозначением осей, в ограниченной среде ситуация меняется и вектор U становится зависимым от ориентации \mathbf{b} относительно границы. Уравнение, которому удовлетворяет вектор U , имеет вид

$$\Delta U + \frac{1}{1-2\sigma} \nabla \operatorname{div} U = [\tau \mathbf{b}] \delta(y - y_0), \quad (1)$$

где U зависит только от x, y ; $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$; σ — коэффициент Пуассона; \mathbf{b} — вектор Бюргерса; τ — единичный вектор, касательный к линии дислокации, который в рассматриваемой задаче параллелен оси z .

Решение (1) должно удовлетворять двум условиям. Во-первых,

$$\oint \frac{\partial U_i}{\partial x_k} dx_k = -b_i, \quad (2)$$

где обход совершается по замкнутому контуру вокруг вектора τ , охватывающему ядро дислокации. Во-вторых, отсутствие сил на границе при $y = 0$

$$\sigma_{zy} = \sigma_{yy} = \sigma_{xy}. \quad (3)$$

Решение уравнения (1) удобнее всего искать в виде $U = U^{(0)} + U^{(1)}$, где $U^{(0)}$ выбирается так, чтобы условие (2) выполнялось. В результате этого получаем уравнение для $U^{(1)}$. Функция $U^{(1)}$ должна обладать следующим свойством:

$$\oint \frac{\partial U_i}{\partial x_k} dx_k = 0.$$

При $\mathbf{b} \parallel x$ имеем

$$U^{(0)} = \frac{b}{2\pi} \left(\ln \sqrt{x^2 + (y - y_0)^2}, \operatorname{arctg} \frac{x}{(y - y_0)^2} \right),$$

а при $\mathbf{b} \parallel y$

$$U^{(0)} = \frac{b}{2\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{x}{(y - y_0)^2}, \ln \sqrt{x^2 + (y - y_0)^2} \right).$$

Уравнение для $U^{(1)}$ решается с помощью разложения всех функций в ряд Фурье по координате x . Граничному условию (3) должна удовлетворять функция $U^{(1)} + U^{(0)}$. Далее нас будет интересовать только лишь зависимость от $r(x, y)$ величины $\operatorname{div} U(r)$, которая описывает изменение элементарного объема в каждой точке среды.

В кубическом кристалле за счет этого может меняться энергия оптического или магнитного резонансного перехода. В результате вычислений оказалось, что при $\mathbf{b} \parallel y$

$$\operatorname{div} U = \frac{1-2\sigma}{2\pi(1-\sigma)} b \left[-\frac{x}{x^2 + (y-y_0)^2} + \frac{x}{x^2 + (y+y_0)^2} - \frac{4y_0(y+y_0)x}{[x^2 + (y+y_0)^2]^2} \right], \quad (4)$$

а при $\mathbf{b} \parallel x$

$$\operatorname{div} U = \frac{1-2\sigma}{2\pi(1-\sigma)} b \left[-\frac{y-y_0}{x^2 + (y-y_0)^2} + \frac{y+y_0}{x^2 + (y+y_0)^2} - \frac{2y_0[(y+y_0)^2 - x^2]}{[x^2 + (y+y_0)^2]^2} \right]. \quad (5)$$

Особенность выражений (4), (5) состоит в следующем. При $y_0 = 0$ (дислокация на поверхности) $\operatorname{div} U(x, y) = 0$. Это означает, что за счет свободной границы поле упругой деформации от дислокации уменьшается, т.е. дислокация в объеме изотропной среды или кристалла является более эффективной причиной неоднородного уширения резонансной линии, чем такой же дефект вблизи границы. В (4), (5) кроме обычных слагаемых, обусловленных самой дислокацией и ее изображением, присутствует нетривиальное третье слагаемое, которое различно для разных ориентаций вектора Бюргера относительно поверхности. Существование такого вклада отмечалось также в [4].

Выражения для поля упругих искажений решетки, вызванных краевой дислокацией, полученные в полуограниченной среде, могут быть использованы и в ситуации тонкой пленки, когда упругие модули подложки имеют близкие значения по отношению к пленке. Именно эта ситуация будет рассматриваться в дальнейшем. Противоположный случай требует одновременного учета сил изображения на обеих $2D$ -границах раздела пленки с подложкой. Однако и здесь особенности неоднородного уширения качественно соответствуют эффекту в полуограниченных средах.

2. Форма неоднородно уширенной резонансной линии в тонкой пленке: эффект краевых дислокаций

Воспользуемся статистической формой линии [5] при расчете неоднородного уширения резонансной линии. При этом будем полагать без ограничения общности, что сдвиг резонансной частоты линейен по величине $[\operatorname{div} U]$, где U — поле смещений краевой дислокации,

$$\Delta\omega = a \operatorname{div} U. \quad (6)$$

Здесь a — деформационный потенциал зонда. Выражения для $\operatorname{div} U$, полученные в предыдущем разделе, определяют зависимость $\operatorname{div} U = f(x, y, y_0)$ как от случайных переменных, определяющих распределение $\Delta\omega$ в соответствии с (6). В результате мы приходим к форме резонансной линии $J(\omega)$ в виде

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} dt \frac{1}{L} \int_0^L \exp\left(-\frac{n_s^{1/2}}{L} \iint [1 - e^{-i\omega t}] dx dy\right) dy_0, \quad (7)$$

где $\Delta\omega$ удовлетворяет (7), L — толщина пленки, n_s — концентрация дислокаций.

Рассмотрим актуальный случай тонких пленок с толщиной $L \ll n_s^{-1/2}$. Кроме того, как это обсуждалось выше, будем исследовать ситуацию подложки с упругими свойствами, близкими к упругим свойствам пленки. Это позволяет воспользоваться выражениями для упругого поля дислокации из предыдущего раздела в ситуации, когда актуальные значения x при рассмотрении неоднородно уширенной формы линии существенно превосходят актуальные значения y, y_0

$$x \gg y, y_0. \quad (8)$$

Это неравенство может быть использовано при анализе поля упругих деформаций краевой дислокации в тонкой пленке вследствие дальнедействующего характера этого поля. Погрешности в форме линии будут возникать здесь лишь на ее дальних крыльях, которые соответствуют вкладу $x \sim y \sim y_0$. Тогда в нулевом приближении по малому параметру $Ln_s^{1/2} \ll 1$ их (4), (5) следует

$$(\operatorname{div} U)_{\mathbf{b} \parallel x} = \pm \frac{b(1-2\sigma)}{2\pi(1-\sigma)} \frac{4y_0}{x^2}, \quad (9)$$

$$(\operatorname{div} U)_{\mathbf{b} \parallel y} = \mp \frac{b(1-2\sigma)}{2\pi(1-\sigma)} \frac{4y_0^2}{x^2}. \quad (10)$$

Из (9), (10) немедленно следует, что $|\operatorname{div} U|_{\mathbf{b} \parallel x} \gg |\operatorname{div} U|_{\mathbf{b} \parallel y}$ в меру малости параметра $Ln_s^{1/2}$. Таким образом, главный вклад в неоднородное уширение вносят краевые дислокации с вектором Бюргера $\mathbf{b} \parallel x$ (параллельно поверхности пленки).

Второе важное обстоятельство связано с равной вероятностью реализации краевых дислокаций с $\mathbf{b} \parallel x$ и антипараллельным \mathbf{b} . При учете этого мы немедленно получаем из (8), (9) реализацию симметричной формы линии резонансного перехода

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} dt \frac{1}{L} \int_0^L dy_0 \exp\left(-n_s^{1/2} \int [1 - \cos \Delta\omega t] dx\right). \quad (11)$$

В (11) мы учли также, что $|\operatorname{div} U|_{\mathbf{b} \parallel x}$ зависит только от x и y_0 . Вычислим теперь $J(\omega)$ на основе (11) и (9). В результате

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi L} \int_0^L dy_0 \int_{-\infty}^{\infty} \cos \omega t dt \exp\left(-n_s^{1/2} y_0^{1/2} A^{1/2} \sqrt{|t|} \alpha\right), \quad (12)$$

$$A = \frac{2ba(1-2\sigma)}{\pi(1-\sigma)}, \quad (13)$$

$$\alpha = 2 \int_0^{\infty} \frac{(1 - \cos z)}{z^{3/2}} dz. \quad (14)$$

Из (12) следует, что искомая форма линии имеет вид

$$J(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos \omega t dt \frac{\left[1 - (\sqrt{\Omega_0 |t|} + 1) \exp(-\sqrt{\Omega_0 |t|}) \right]}{\Omega_0 |t|},$$

$$\Omega_0 = L n_s^{1/2} A \alpha^2. \quad (15)$$

В (15) мы получили новую форму резонансной линии, Фурье-образ которой весьма плавно затухает на своих крыльях. Как следует из (15), ширина этой линии $\omega_{1/2}$ порядка Ω_0 и падает при уменьшении толщины пленки. Последнее есть результат действия поля изображения в тонкой пленке, которое компенсирует прямое действие упругого поля краевой дислокации. Это обстоятельство также объясняет малость порядка ($n_s^{1/2} L$) деформационного поля краевых дислокаций в тонкой пленке по сравнению с ее полем в 3D-кристалле. На рис. 1 проведено сравнение новой формы линии с лоренцианом, причем обе кривые нормированы на единицу. Видно, что при переходе от 3D-кристалла к тонкой пленке происходит существенное сужение резонансной линии, неоднородно уширенной упругими полями краевых дислокаций. При этом форма линии изменяется от гауссиана [5] к новой форме (15).

Эта новая форма линии характеризуется слабыми крыльями и мощным пиком вблизи резонансной частоты. Таким образом, развитая теория предсказывает, что в тонких пленках или вблизи границ раздела различных сред происходит сужение резонансных линий, уширенных полями краевых дислокаций. Как уже подчеркивалось выше, этот эффект обусловлен компенсацией упругих полей из-за влияния сил изображения. Вторым следствием, важным для эксперимента, является подавление поверхностного уширения резонансных линий в рассматриваемом случае вследствие эффекта уширения полями дислокаций в объеме образца. Однако поверхностное уширение, индуцированное дислокациями, может приводить к хорошо наблюдаемым следствиям и в 3D-ситуации, если мы учтем возможность одновременного уширения резонансных линий двумя типами упругих дефектов, а именно центрами дилатации и краевыми дислокациями. Необходимо подчеркнуть, что центры дилатации слабо уширяют линию в 3D-случае (лишь вследствие эффектов анизотропии) и весьма существенно [1-3] в 2D-ситуации. В этом случае результирующая форма J_{Σ} линии представляет собой свертку формы линии (15) с Фурье-образом $F_1(t)$ и формы линии, вычисленной в [1-3] для случая уширения центрами дилатации в тонкой пленке (с Фурье-образом $F_2(t)$).

$$J_{\Sigma} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} F_1(t) F_2(t) dt,$$

где $F_2(t)$ в том же пределе тонких пленок представляется в виде

$$F_2(t) = \exp \left(- n_s^d |\alpha_0 t|^{2/3} - i n_s^d |\beta_0 t|^{2/3} \text{sign} t \right),$$

$n_s^d = N/S$, N — количество центров дилатации, $\beta_0 = 2.29 \alpha_0$ для одного типа центров, α_0 определено в [1-3].

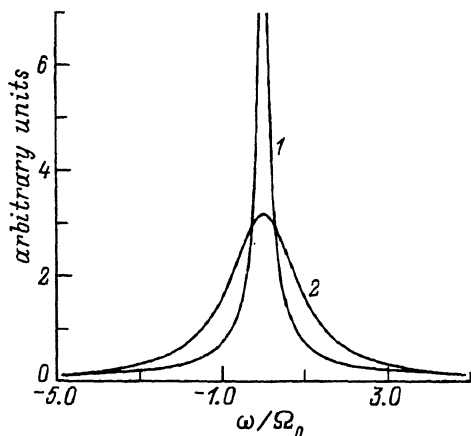


Рис. 1. Резонансная форма линии, уширенная краевыми дислокациями, в квази-2D-случае (1) и сравнение ее с лоренцианом (2). Параметр $\Omega_0 = 0.1$.

Проведем оценки в ситуации, когда параметр $\Omega_0 \approx (n_s^d)^{3/2} \alpha_0 \equiv \Omega_d$. Исследуем эффект свертки для двух актуальных случаев: 1) $\beta_0 = 0$ вследствие эффекта компенсации двух различных типов центров дилатации и 2) $\beta_0 = 2.29\alpha_0$ (один тип центров дилатации). В первом случае, как и в ситуации одного эффекта упругих полей дислокаций (рис. 1, $\Omega_d = 0$), мы приходим к характерной «клювообразной» функции формы с практически δ -образным всплеском на резонансной частоте и слабозатухающими крыльями (рис. 2).

Интересно отметить, что сравнение с аналогично нормированной гауссовой функцией распределения, соответствующей неоднородному уширению упругими полями краевых дислокаций в 3D-случае, показывает, что крылья рассматриваемой формы линии в ситуации, показанной кривой 1 на рис. 2, необычайно развиты. Они существенно превосходят гауссовы уже при $(\omega/\Omega_0) \approx 2$, причем остаются заметными вплоть до $\omega/\Omega_0 \approx 10$.

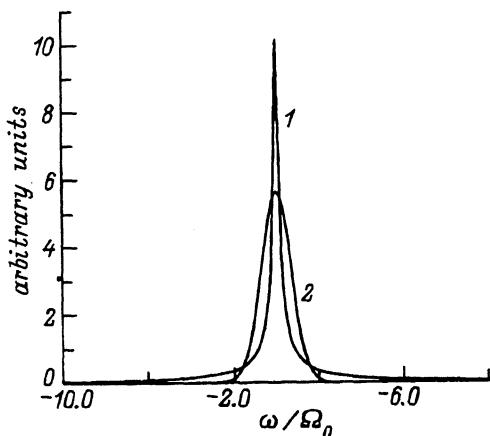


Рис. 2. Свертка резонансных форм линии, уширенных упругими полями краевых дислокаций и центров дилатации, в симметричном случае, $\beta = 0$. 1 — $\Omega_0 = 0.1$, $\Omega_d/\Omega_0 = 0.1$, 2 — гауссова форма линии (приведена для сравнения).

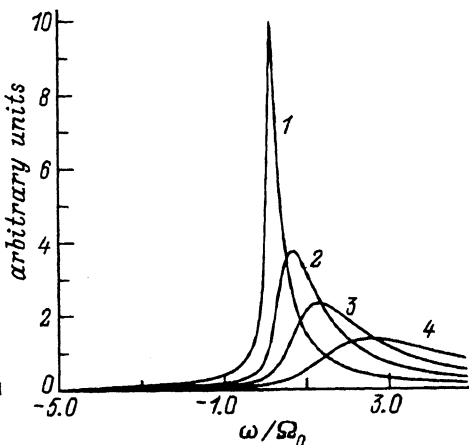


Рис. 3. Свертка резонансных форм линии, уширенных упругими полями краевых дислокаций и центров дилатации, в асимметричном случае, $\beta = 2.29$, $\Omega_0 = 0.1$. Ω_d/Ω_0 : 1 — 0.1, 2 — 0.5, 3 — 1, 4 — 2.

Второе замечательное обстоятельство связано с «клювообразностью» центральной части линии. Последнее при ЭПР-исследованиях, когда изучается производная $\frac{dJ(\omega)}{d\omega}$, приводит к характерным следствиям, которые должны проявиться в экспериментах, а именно, в исследуемом случае при $\omega < 0$, как и при $\omega > 0$, знак $\frac{d^2J(\omega)}{d\omega^2}$ постоянен и положителен. Такое поведение качественно отличается от случая обычных классических форм линий (гауссиана, лоренциана, хольцмаркиана). Действительно, в последней ситуации в центральной области частот $-\omega_0 \leq \omega \leq \omega_0$, где ω_0 порядка полуширины функции формы, $\frac{d^2J(\omega)}{d\omega^2} < 0$, в то время как для $|\omega| > \omega_0$ величина $\frac{d^2J(\omega)}{d\omega^2} > 0$. Это обстоятельство непосредственно отражается в поведении $\frac{dJ(\omega)}{d\omega}$ и тем самым в качественном виде наблюдаемого сигнала ЭПР.

Увеличение вклада центров дилатации одного знака ($\beta \neq 0$) по сравнению с вкладом краевых дислокаций в результирующую функцию формы (увеличение отношения Ω_d/Ω_0) приводит к существенному росту ее сдвига и асимметрии (рис. 3). Это указывает на значительную «чувствительность» результирующей функции формы по отношению к присутствию центров дилатации, что также может быть существенно в экспериментах по резонансной спектроскопии квази-2D-сред.

Список литературы

- [1] Аверкиев Н.С., Вихнин В.С., Соколов Н.С., Яковлев Н.Л. Письма в ЖЭТФ **56**, 1, 11 (1992).
- [2] Averkiev N.S., Vikhnin V.S., Sokolov N.S., Yakovlev N.L. In: Defects in insulating materials / Ed. by O.Kanert and J.-M.Spaeth. World Scientific Publishing Co.Pte.Ltd. (1993). V. 2. P. 1271-1273.
- [3] Аверкиев Н.С., Вихнин В.С., Соколов Н.С., Яковлев Н.Л. ФТТ **36**, 1087 (1994).
- [4] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М. (1972). 599 с.
- [5] Stoneham A.M. Rev. Mod. Phys. **41**, 82 (1969).