

не возникает и при деформировании образца скольжением в любых известных системах скольжения независимо от того, осуществляется деформация одиночным скольжением или множественным.

В заключение отметим, что некоторые полученные нами данные показывают, что излучения связаны не просто с самим процессом формирования двойника, а с пересечением двойников, однако этот вывод пока не является окончательным.

Список литературы

- [1] Закревский В. А., Пахотин В. А., Вайткевич С. К. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 3. С. 723—729.
- [2] Закревский В. А., Шульдинер А. В. // Письма в ЖТФ. 1984. Т. 10. № 3. С. 139—143.
- [3] Полетаев А. В., Шмурак С. З. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 12. С. 3567—3575.
- [4] Закревский В. А., Шульдинер А. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 10. С. 3042—3046.
- [5] Закревский В. А., Шульдинер А. В. // Изв. СО АН СССР, сер. хим. наук. 1987. В. 5. № 17. С. 73—76.
- [6] Кусов А. А., Клингер М. И., Закревский В. А. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 6. С. 1694—1701.
- [7] Nakamura T., Ohi K. // J. Phys. Soc. Japan. 1963. V. 18. N 7. P. 985—995.
- [8] Николаев В. И., Смирнов Б. И., Иванцов В. А. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 8. С. 2519—2521.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
19 октября 1991 г.

© Физика твердого тела, том 34, № 3, 1992
Solid State Physics, vol. 34, N 3, 1992

РЕЛАКСАЦИЯ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ПАРНОГО ПЕРЕГИБА НА ВИНТОВОЙ ДИСЛОКАЦИИ В ОЦК РЕШЕТКЕ

О. В. Клявин, Н. П. Лиходедов

Известно [1], что парный перегиб на винтовой дислокации в континуальной теории должен релаксировать путем притяжения и аннигиляции одиночных парных перегибов разных знаков, а внешнее приложенное напряжение должно увеличивать длину парного перегиба и тем самым переводить дислокацию в соседнюю долину Пайерлса. Однако теоретически процесс релаксации атомной структуры парного перегиба на основе учета конкретного межатомного потенциала решетки до сих пор в литературе не был рассмотрен.

Этот вопрос представляет большой интерес для выяснения микроскопического механизма движения дислокаций в рельефе Пайерлса [2], атомной динамики дислокаций с примесями в решетке [3] и физики внутреннего трения в кристаллах с высоким барьером Пайерлса [4], где используется модель дислокационных сегментов, колеблющихся между жесткими стопорами. В работе [5] было показано, что атомная структура одиночного перегиба на винтовой дислокации в альфа-железе проявляется в наличии областей сжатия (дилатация отрицательная, $\Delta R < 0$) и разрежения ($\Delta R > 0$) между атомами решетки вдоль атомных рядов, параллельных оси дислокации. На расстояниях свыше 6—8 Å от оси дислокации этими дилатациями можно пренебречь и рассматривать дислокацию как прямолинейную; максимальные дилатации, обусловленные перегибом (по всей его ширине), локализованы вблизи оси перегиба. Для описания отклонения оси дислокации от исходной долины Пайерлса использовалось соотношение

$$\Delta y(z) = (2h/\pi) \operatorname{arctg} [\exp(-\pi z/W_k)], \quad (1)$$

где h — расстояние между ближайшими долинами Пайерлса, W_k — ширина перегиба, z — координаты атомов в направлении оси дислокации.

В настоящей работе был использован аналогичный метод для формирования парного перегиба на винтовой дислокации $1/2a(111)$ в альфа-железе [5]. Парный перегиб моноатомной высоты варьировался по ширине и представлялся в виде одиночного перегиба ($\Delta y > 0$, $W_+ = 2b$ и $4b$), прямолинейного участка винтовой дислокации ($\Delta y = 0$, $W = 4b$ и $8b$) и одиночного перегиба противоположного знака ($\Delta y < 0$, $W_- = 2b$ и $4b$). Таким образом, общая ширина парного перегиба изменялась в пределах от $8b$ до $16b$ (b — вектор Бюргерса). Смещения атомов, вызванные введением винтовой дислокации в решетку, описывались известным соотношением

$$\Delta z_i = (b/2\pi) \operatorname{arctg} (y_i/x_i), \quad (2)$$

где y_i и x_i — координаты атомов в плоскости, перпендикулярной оси дислокации.

В расчетах использовался метод молекулярной динамики с потенциалом Джонсона, размеры расчетной ячейки составляли $8 \times 8 \times 50b$, граничные условия жесткие. Релаксация парного перегиба (для конкретных атомных рядов, расположенных вблизи центра ядра дислокации, согласно анализу, выполненному в [6]) отслеживалась как в отсутствие внешнего напряжения, так и при наличии деформации сдвига, приложенной к верхней и нижней плоскости расчетной ячейки и равной 1 и 2%. Кроме того, релаксация парного перегиба исследовалась между двумя атомами гелия, симметрично расположенным в ячейке на линии дислокации в междоузлиях решетки. Исходная структура парного перегиба в одном из рядов, расположенных вблизи центра ядра дислокации ($W_+ = 2b$, $W_- = 2b$, $W = 4b$), полученная на основании формул (1), (2), изображена на рис. 1, а (ось ординат — дилатация ΔR , ось абсцисс — ось дислокации, единица длины — вектор Бюргерса). Эта структура является неустойчивой и, согласно представлениям теории упругости, должна аннигилировать притяжением и слиянием одиночных перегибов разных знаков, приводя к возвращению дислокации в первоначальную долину Пайерлса. На рис. 1, б показана атомная структура перегиба через 10 периодов колебаний, а полностью релаксированная — на рис. 1, в. Видно, что процесс релаксации парного перегиба существенно отличается от классической схемы его аннигиляции и происходит путем расплывания и дробления больших областей дилатации на более мелкие области сжатия и растяжения, которые благодаря жестким граничным условиям в конечном итоге собираются у границы ячейки. Аналогичная картина релаксации наблюдалась и для других атомных рядов, расположенных как вблизи центра, так и на периферии ядра дислокации в области парного перегиба.

Далее было обнаружено, что процесс релаксации парного перегиба практически не отличается по своему характеру от такового при приложении деформации сдвига (до 2%) к расчетной ячейке. Это указывает на отсутствие влияния поля упругих напряжений решетки, возникающего при приложении касательного напряжения к перегибу.

Релаксация парного перегиба, помещенного на отрезке винтовой дислокации между двумя атомами гелия, также не отличалась по своему характеру в отсутствие указанных атомов на линии дислокации и при приложении к ячейке деформации сдвига до 2% (ср. рис. 1 и 2). В этом случае (рис. 2) часть дилатаций атомов, возникающих при расплывании двойного перегиба в конкретном атомном ряду, накапливается вблизи атомов гелия, не приводя к их перемещению, что указывает на большую устойчивость положения атома гелия, расположенного в междоузлии решетки.

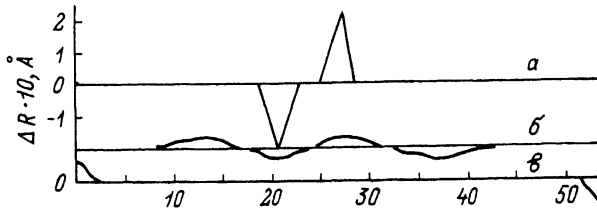


Рис. 1. Атомная структура парного перегиба для атомного ряда вблизи центра ядра дислокации. *a* — исходная, полученная по формуле (1); *б* — через 10 периодов колебаний; *в* — полностью релаксированная.

Таким образом, полученные данные радикально отличаются от известной классической схемы релаксации парного перегиба, которая следует из континуальных представлений.¹ Тем не менее этот результат не является неожиданным. Действительно, он указывает лишь на тот факт, что величина этого упругого поля является недостаточной для их притяжения и последующей аннигиляции вследствие того, что перегибы имеют моноатомную высоту и фактически еще не являются протяженными линейными дефектами — отрезками краевой дислокации с достаточно мощным полем упругих напряжений. Вероятно, по этой причине экспериментально в различных материалах в электронном микроскопе при большом разрешении наблюдаются дислокации лишь с двойными перегибами большой высоты [7]. В этой связи представляет большой интерес исследование процесса релаксации парных перегибов высотой в несколько или десятки межатомных расстояний, которые, возможно, будут аннигилировать по классической схеме. Не исключено влияние типа граничных условий на характер релаксации парных перегибов, а также высоты вторичного рельефа Пайерлса, препятствующего их аннигиляции. Влияние жестких граничных условий сказывается на характере релаксации атомов только вблизи от границ расчетной ячейки. В центре ее, где

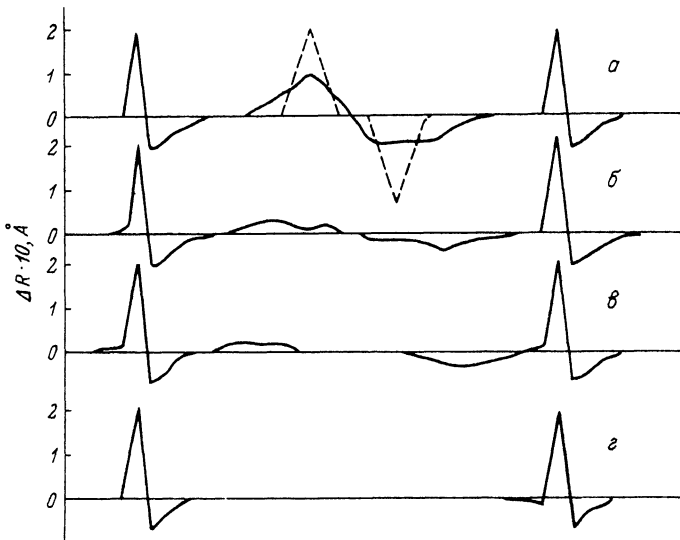


Рис. 2. Атомная структура парного перегиба для атомного ряда вблизи центра ядра дислокации, помещенного между двумя атомами гелия, при деформации сдвига ячейки на 2%.

Штриховая линия — исходная структура, полученная по формуле (1); *a*–*г* — через 3, 7, 10, 20 периодов колебаний соответственно.

¹ Одиночный перегиб на винтовой дислокации $1/2 a \langle 111 \rangle$ в ячейке со структурой альфа-железа с жесткими граничными условиями сохраняет свою форму во времени на линии дислокации после релаксации начальной конфигурации, заданной в соответствии с уравнением (1).

фактически отскакивает релаксация двойного перегиба, этим влиянием можно пренебречь. Уменьшение величин дилатаций атомов на дислокационной линии с перегибом с течением времени (рис. 1, 2) связано с методикой отвода лишней кинетической энергии атомов при релаксации перегиба, которая детально описана в [8].

Список литературы

- [1] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972, 425 с.
- [2] Актуальные вопросы теории дислокаций // Под ред. А. Н. Орлова. М.: Мир, 1966. 325 с.
- [3] Klyavin O. V., Likhodedov N. P., Orlov A. N. // Progress in Surface Science. 1990. V. 33. N 4. P. 1—125.
- [4] Seeger A., Donth H., Pfaff F. // Disc. Faraday Soc. 1957. V. 23. P. 19—37.
- [5] Клявин О. В., Лиходедов Н. П., Орлов А. Н. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 11. С. 3388—3396.
- [6] Клявин О. В., Лиходедов Н. П., Орлов А. Н. // Сб. «Моделирование на ЭВМ структурных дефектов в кристаллах». Л., ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР, 1988. 56 с.
- [7] Appel F., Bethge H., Messerschmidt U. // Phys. Stat. Sol. (a). 1976. V. 38. P. 103—108; 1977. V. 42. p. 61—70.
- [8] Клявин О. В., Лиходедов Н. П., Орлов А. Н. // Препринт ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР. 1985. № 955. 56 с.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
24 октября 1991 г.

УДК 621.315.592

© Физика твердого тела, том 34, № 3, 1992
Solid State Physics, vol. 34, N 3, 1992

ЭФФЕКТ ХОЛЛА В ФЕРРОМАГНИТНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ HgCr_2Se_4 n -ТИПА В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В. А. Костылев, А. А. Самохвалов, Н. М. Чеботаев

В ряде теоретических и экспериментальных работ было показано, что взаимодействие горячих носителей заряда со спиновыми волнами в магнитных полупроводниках приводит к ряду новых явлений, связанных с разогревом и генерацией магнонов [1–5]. В результате в сильном электрическом поле изменяются многие физические свойства и параметры ферромагнитных и антиферромагнитных полупроводников, например: намагниченность, электропроводность, затухание спиновых и магнитостатических волн и т. д. [6–8]. В частности, на вольт-амперных характеристиках (ВАХ) появляются участки отрицательной дифференциальной электропроводности, что представляет существенный научный и практический интерес [9,10].

В работе [9] сообщалось, что нелинейность ВАХ n - HgCr_2Se_4 формировалась за счет изменения электропроводности тонкого приконтактного слоя, и выдвигалось предположение о ганновском механизме отрицательной дифференциальной электропроводности. Результаты ряда новых теоретических и экспериментальных работ по расшивке зонной структуры этого соединения также свидетельствуют в пользу данного предположения [11–14].

Настоящая работа содержит результаты первых исследований эффекта Холла в ферромагнитном полупроводнике n - HgCr_2Se_4 в сильном электрическом поле в области магнитного упорядочения ($T \ll 110$ – 130 K).

Были исследованы ВАХ и эффект Холла монокристаллических образцов HgCr_2Se_4 , которые в парамагнитной области температур обладают дырочным типом электропроводности, а в ферромагнитной — электронным. Образцы пред-