

Туннельное зарождение пар кинков на дислокациях в потенциальном рельефе Пайерлса со случайными искажениями

Б.В. Петухов

*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН,
Ленинский пр. 59, г. Москва, 119333, Россия
E-mail: petukhov@ns.crys.ras.ru*

Статья поступила в редакцию 13 марта 2018 г., опубликована онлайн 26 июля 2018 г.

В связи с повышенным в последнее время интересом к механическим свойствам квантовых кристаллов существует потребность изучения низкотемпературной динамики дислокаций. В эту динамику немаловажный вклад вносит туннелирование через барьеры, создаваемые периодическим рельефом кристаллической решетки, приводящее к образованию пар кинков. Недостаточное совершенство кристаллов зачастую накладывает неконтролируемые возмущения, модифицирующие закономерности процесса туннельного образования кинков. В работе моделируется влияние возмущений случайными полями внутренних напряжений типа пространственного «гауссовского шума». Рассчитывается средняя по реализациям случайных полей частота квантово-механического туннельного образования пар кинков. Показано, что даже относительно слабые по сравнению с кристаллическим рельефом возмущения приводят к существенной модификации зависимости частоты образования кинков от движущей силы.

Ключевые слова: квантовые кристаллы, кинки, туннелирование, случайные внутренние напряжения.

Введение

Существует большое количество материалов, ярко проявляющих при достаточно низких температурах квантовое поведение механических свойств. В первую очередь можно указать кристаллы He и Ne, молекулярные твердые материалы H₂ и CH₄, некоторые ионные (LiH), ковалентные (графит) и металлические (Li) кристаллы, а также вигнеровские кристаллы, решетки вихрей и ряд других (в качестве недавнего обзора см. [1]). Многие свойства таких материалов определяются подвижностью дефектов, в частности, дислокаций, преодолевающих препятствия с помощью квантовых механизмов. Неоценимый вклад в исследование квантовых механизмов движения дислокаций и низкотемпературной пластичности материалов внесли В.Д. Нацик и его коллеги в многочисленных работах, из которых упомянем только некоторые [2–6]. Эволюция ранних экспериментальных исследований низкотемпературных аномалий пластичности кристаллических материалов описана в обзоре [7].

В работе [8] высказано предположение, что наблюдающиеся особенности низкотемпературной пластичности *p*-H₂ в области температур 1,8–4,2 К обусловлены особенностями когерентного зонного перемещения пере-

гибов на дислокациях в пайерлсовском рельефе кристаллической решетки, модулированном остаточной примесью ортомолекул и дейтерия. Проведенный в работе [9] полуколичественный анализ экспериментальных результатов дал авторам основания высказать утверждение, что характеристики зарегистрированных процессов пластического течения в твердом ³He можно трактовать в рамках существующих представлений о механизмах движения дислокаций в рельефе Пайерлса.

Низкотемпературное туннелирование дислокаций в периодическом потенциальном рельефе кристаллической решетки является одним из примеров макроскопической квантовой динамики. основополагающие идеи такой динамики были сформулированы в работе [10] и получили широкое дальнейшее развитие и разносторонние приложения [11]. Помимо туннелирования дислокаций [12,13], квантовое рождение пар кинков изучалось применительно к длинным джозефсоновским контактам [14], волнам зарядовой плотности [15,16] и многим другим системам [17]. Наблюдение неклассической вращательной инерции в твердом ⁴He [18] вызвало новый всплеск интереса к квантовым кристаллам [19] и предсказанным ранее [20] особенностям квантовой динамики дефектов в них.

В исследуемых материалах неизбежно присутствует та или иная степень неупорядоченности. С понижением температуры увеличивается роль неоднородностей протяженного барьера Пайерлса, что должно приводить к увеличению статистического разброса вероятности образования пары кинков. Целью настоящей работы является выяснение влияния неконтролируемых составляющих реальной структуры кристаллов, моделируемых случайными полями внутренних напряжений, на закономерности квантового туннелирования дислокаций.

2. Описание модели

Широко используемой простой моделью дислокации в кристалле является струна в плоском периодическом потенциале $U_0(y)$, называемом барьерами Пайерлса и имитирующим рельеф кристаллической решетки. Период функции $U_0(y)$, описывающей энергию дислокации в расчете на единицу длины при однородном смещении y , обозначим h . Энергии различных неоднородных конфигураций дислокационной струны $y(x,t)$ представляются функционалом

$$E\{y(x,t)\} = \int \left\{ \frac{\rho}{2} \dot{y}^2(x,t) + \frac{\kappa}{2} y'^2(x,t) + U_0[y(x,t)] \right\} dx. \quad (1)$$

Здесь ρ — плотность массы дислокации на единицу длины, κ — линейное натяжение, точка над символом означает дифференцирование по времени, штрих — дифференцирование по пространственной координате x вдоль долины кристаллического рельефа. Отметим, что модель струны (1) является чрезвычайно общей и получаемые в ее рамках результаты без труда переносятся на описание динамики квазиодномерных систем самой различной природы (см., например, [17,21]).

Положение дислокационной линии вблизи дна потенциального рельефа кристаллической решетки при приложении внешнего напряжения σ , не превышающего так называемого напряжения Пайерлса $\sigma_P = \frac{1}{b} \max \frac{dU_0(y)}{dy}$ (b — величина вектора Бюргерса дислокации), становится метастабильным и имеет конечное время жизни. За счет флуктуаций дислокация преодолевает барьер, разделяющий долины кристаллического рельефа, и переходит в энергетически более выгодное положение, смещаясь на период решетки в направлении, диктуемом внешней нагрузкой.

Переход дислокации в соседнюю долину кристаллического рельефа оптимальным образом, т.е. с преодолением энергетического барьера минимальной высоты, происходит путем образования локального зародыша нового положения. Как детально описано во многих монографиях, например в [22,23], зародыш представляет собой участок дислокации в соседней долине, ограниченный перегибами дислокационной линии через хребет кристаллического рельефа. Эти перегибы называют также кинками или топологическими солитона-

ми. Кинк представляет собой коллективную моду, способную перемещаться вдоль хребта кристаллического рельефа, вовлекая в свое движение эстафетным образом различные группы атомов материала. При достаточной плавности перегиба или, другими словами, протяженности кинка d_k , заметно превышающей период решетки вдоль линии дислокации a , рельефом Пайерлса второго рода можно пренебречь и трансляция кинка в однородном поле напряжений под действием движущей силы $f = \sigma b h$ происходит свободно.

В работе [24] путем исследования геометрии энергетического рельефа при напряжениях, низких по сравнению с σ_P , показано, что эти перегибы, или кинки, являются довольно устойчивыми образованиями по отношению к изменению их формы, что позволяет считать их некоторым подобием квазичастиц. Кинк характеризуется собственной энергией E_k и массой m_k . Существует связь наподобие релятивистской: $E_k = m_k c^2$, $c = \sqrt{\kappa/\rho}$ — скорость звука.

Вероятность низкотемпературного туннельного образования пары кинков в квазиклассическом приближении, в основном, описывается экспоненциальным фактором [12]

$$\Gamma_q = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} S \right\}, \quad (2)$$

где действие S есть интеграл от лагранжиана L : $S = \int L dt$, вычисляемый вдоль оптимальной траектории, переводящей систему через барьер. В работе [12] использовалось описание пары кинков как обычной квазичастицы с лагранжианом $L = \frac{1}{2} m_p \dot{x}^2 - E_p(x)$ и энергией $E_p(x) = 2E_k - \sigma b h x$. Здесь x — координата относительного движения кинка и антикинка в паре, и, соответственно, m_p — приведенная масса, равная $m_k/2$. Эти выражения, строго говоря, неприменимы при малом разделении кинков x порядка ширины индивидуально кинка d_k , однако вклад этой области мало существен. Характерной чертой полученного в [12] результата является чрезвычайно резкая зависимость частоты рождения кинков от напряжения «зенеровского» типа $\Gamma_q = \exp \{ -\text{const} / \sigma \}$.

Впоследствии по мере широкого распространения «солитонной парадигмы» [25,26] задача о туннельном зарождении пар кинков «всплывала» в самых различных областях физики, включая теорию поля [27], джозефсоновские контакты [28] и многие другие. В настоящей работе при описании динамики кинков будет применяться «релятивистский» подход [15–17] и др., приводящий при однородном напряжении к лагранжиану

$$L = -2E_k \sqrt{1 - (\dot{x}/2c)^2} + \sigma b h x, \quad (3)$$

где $\dot{x} = dx/dt$ — скорость относительного движения кинков в паре.

Кроме того, будет дополнительно учтено случайно неоднородное внутреннее напряжение $\sigma_i(x)$. Такое обобщение, модифицирующее закономерности динамики дислокаций в кристаллах, является следствием наличия обычно плохо контролируемых искажений идеальной периодической структуры. Влияние отдельных локальных неоднородностей на вероятность туннелирования дислокации через барьер Пайерлса изучалось в работах [29,30]. В работе [31] рассчитывалась усредненная по положениям примесей квантовая перенормировка действия и энергии кинка. В настоящей работе найдем среднюю частоту туннельного образования пар кинков в случайно неоднородной среде.

Влияние неупорядоченности реальной структуры кристалла будем моделировать внутренним напряжением $\sigma_i(x)$, представляющим собой пространственный гауссовский шум, возможно, с ненулевым средним значением $\langle \sigma_i(x) \rangle = \sigma_{av}$ и корреляционной функцией $\langle (\sigma_i(x) - \sigma_{av})(\sigma_j(x') - \sigma_{av}) \rangle = 2D_i \delta(x - x')$. Другой популярной моделью неупорядоченности, применяемой при описании динамики обычных частиц, являются хаотически расположенные короткодействующие дефекты, создающие нескоррелированный энергетический рельеф. Подчеркнем отличие рассматриваемого энергетического рельефа для кинков, в котором проявляется принципиальная разница природы кинков и обычных частиц. А именно, энергия кинка при его перемещении в поле случайных внутренних напряжений совершает случайные блуждания по энергетической шкале и обладает памятью о предыстории. Такой потенциал был предложен в [32] и фигурировал впоследствии под разными названиями: поле случайной силы, потенциал Синая и т.п. [33].

Можно для иллюстрации привести простую модель внутренних напряжений, создаваемых хаотически расположенными вдоль линии дислокации примесными атомами, изменяющими энергию ядра дислокации на некоторую величину типа энергии связи u . Обозначим числа заполнения i -го узла решетки n_{i1} в первой долине и n_{i2} во второй долине, $n_{i1,2} = 1$, если узел содержит примесь, $n_{i1,2} = 0$, если примесь отсутствует. Тогда вносимое примесями изменение энергии дислокационного сегмента длиной ma при его перемещении из первой долины кристаллического рельефа во вторую можно записать как $\Delta E = u \sum_{i=1}^m (n_{i2} - n_{i1})$, a — период решетки

вдоль линии дислокации. Вероятность заполнения узла, т.е. того, что $n_{i1,2} = 1$ равна средней концентрации примесных атомов c_1 на узел решетки в первой долине и c_2 на узел решетки во второй долине, соответствующая вероятность отсутствия примеси равна $1 - c_{1,2}$. Тогда среднее изменение энергии есть $\langle \Delta E \rangle = u(c_2 - c_1)m$. При наличии асимметрии распределения примесей по долинам кристаллического рельефа из-за их избытка в исходном положении дислокации $c_1 > c_2$, что эквива-

лентно наличию «сухого трения», или пиннинга, характеризуемого напряжением

$$\sigma_{av} = \frac{u(c_2 - c_1)}{abh}. \quad (4)$$

Вычислим среднее от квадрата изменения энергии. Используем выражение

$$\left[\sum_{i=1}^m (n_{i2} - n_{i1}) \right]^2 = \left[\sum_{i=1}^m \Delta n_i \right]^2 = \sum_{i=1}^m \Delta n_i^2 + \sum_{i < j} \Delta n_i \Delta n_j.$$

Усредняя, получаем

$$\langle \Delta n \rangle = (c_2 - c_1),$$

$$\langle \Delta n^2 \rangle = \langle n_2^2 \rangle + \langle n_1^2 \rangle - 2 \langle n_2 \rangle \langle n_1 \rangle = c_2 + c_1 - 2c_2c_1.$$

$$\begin{aligned} \left\langle \left[\sum_{i=1}^m (n_{i2} - n_{i1}) \right]^2 \right\rangle &= m \langle \Delta n^2 \rangle + m(m-1) \langle \Delta n \rangle^2 = \\ &= m(c_2 + c_1 - 2c_2c_1) + m(m-1)(c_2 - c_1)^2 = \\ &= m(c_2 - c_2^2 + c_1 - c_1^2) + m^2(c_2 - c_1)^2. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\langle \Delta E^2 \rangle - \langle \Delta E \rangle^2 = u^2 m (c_2 - c_2^2 + c_1 - c_1^2).$$

В континуальном пределе $c_{1,2} \ll 1$ и $\langle \Delta E^2 \rangle - \langle \Delta E \rangle^2 \approx u^2 m (c_2 + c_1)$. Таким образом, «коэффициент диффузии» кинка по шкале энергии есть

$$D_i = u^2 (c_2 + c_1) / 2a. \quad (5)$$

Внутреннее напряжение накладывается на однородное внешнее напряжение σ , так что пара кинков эволюционирует в потенциальном рельефе

$$E_p(x) = 2E_k - s(x), \quad (6)$$

где $s(x) = \int_0^x [\sigma + \sigma_i(x')] b h d x'$.

Уравнение Эйлера–Лагранжа с независимым от времени потенциалом имеет, как известно, интеграл энергии

$$\begin{aligned} \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - L &= \frac{2E_k}{\sqrt{1 - (\dot{x}/2c)^2}} \frac{\dot{x}^2}{4c^2} + 2E_k \sqrt{1 - (\dot{x}/2c)^2} - s(x) = \\ &= \text{const} = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

(В точке поворота траектории x_0 , являющейся нулем потенциала, $\dot{x} = 0$, следовательно, $\text{const} = 0$.)

Используя (7), преобразуем выражение для действия к виду

$$S = (1/2c) \int_0^{x_0} dx \sqrt{4E_k^2 - s^2(x)}. \quad (8)$$

Для вероятности туннельного образования пары кинков $\Gamma_{0q} = \exp(-2S/\hbar)$ в идеальном материале (без внут-

ренных напряжений, $s(x) = \sigma$ из (8) следует, как было получено в [15],

$$\Gamma_{0q} = \exp\left\{-\frac{\pi E_k^2}{\hbar c f_0}\right\}. \quad f_0 = \sigma b h. \quad (9)$$

При наличии случайного потенциала $s(x)$ и x_0 , и Γ_q — случайные величины, зависящие от локальной реализации $s(x)$. По этой причине следует применять статистическое описание и характеризовать процесс туннельного зарождения кинков средними величинами и функциями распределения. Статистическим расчетам для функционалов от случайных функций типа броуновских траекторий в недавнее время уделялось большое внимание как математиками, так и физиками (см. [34,35] в качестве обзоров). Займемся вычислением средней вероятности преодоления туннельного барьера Γ_q , руководствуясь выработанными там рецептами

$$\langle \Gamma_q \rangle = \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\hbar c} \int_0^{x_0} dx \sqrt{4E_k^2 - s^2(x)}\right\} \right\rangle. \quad (10)$$

Хотя из принятого определения $s(x)$ следует $s(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow 0$, удобно в промежуточном расчете ввести некоторое ненулевое начальное значение случайной функции $s(0) = s_0$, положив его равным нулю в окончательных выражениях. Некоторые связанные с этим обобщением моменты будут прокомментированы в Заключение. Обозначим $Q(s_0)$ среднее (10) по броуновским траекториям, начинающимся при $x = 0$ со значения s_0 и продолжающимся до $x = x_0$, являющейся

точкой первого пересечения траекторией нулевого уровня потенциала, в которой барьер заканчивается

$$Q(s_0) = \left\langle \exp\left[-\int_0^{x_0} V(s(x)) dx\right] \right\rangle. \quad (11)$$

Здесь $V(s(x)) = \frac{1}{\hbar c} \sqrt{4E_k^2 - s^2(x)}$. Для $Q(s_0)$ может быть стандартным способом получено уравнение [35]. Выделим на траектории малый начальный участок протяженностью dx , приводящий к переходу в $s_0 + ds_0$. Для оставшегося участка траектории движение начинается в точке dx со значения $s_0 + ds_0$, что дает возможность переписать соотношение (11) в виде

$$Q(s_0) = [1 - V(s_0)dx] \left\langle \exp\left[-\int_{dx}^{x_0} V(s(x')) dx'\right] \right\rangle. \quad (12)$$

Значение для рассматриваемых траекторий имеет лишь величина s в начале траектории, дальнейший процесс не зависит от того, что было при меньших x . Поэтому

$$\left\langle \exp\left[-\int_{dx}^{x_c} V(s(x')) dx'\right] \right\rangle$$

есть та же самая функция Q , но

$$\text{со сдвинутым аргументом } \left\langle \exp\left[-\int_{dx}^{x_c} V(s(x')) dx'\right] \right\rangle = Q(s_0 + ds_0).$$

Здесь ds_0 является случайной величиной, по которой следует еще произвести усреднение. Следовательно,

$$Q(s_0) = [1 - V(s_0)dx] \langle Q(s_0 + ds_0) \rangle \approx [1 - V(s_0)dx] \left\langle Q(s_0) + \frac{dQ(s_0)}{ds_0} \langle ds_0 \rangle + \frac{1}{2} \frac{d^2Q(s_0)}{ds_0^2} \langle ds_0^2 \rangle + \dots \right\rangle. \quad (13)$$

Подставляя в (13) $\langle ds_0 \rangle = (\sigma_{av} + \sigma) b h dx$, $\langle ds_0^2 \rangle \approx 2b^2 h^2 D_i dx + \langle ds_0 \rangle^2$ и сравнивая линейные по dx вклады, приходим к уравнению

$$\frac{d^2Q(s_0)}{ds_0^2} + 2A \frac{dQ(s_0)}{ds_0} - B \sqrt{4E_k^2 - s_0^2} Q(s_0) = 0. \quad (14)$$

Здесь $A = \frac{\sigma_{av} + \sigma}{2bhD_i}$, $B = \frac{1}{\hbar c b^2 h^2 D_i}$.

Функция $Q(s_0)$ удовлетворяет граничным условиям: $Q(2E_k) = 1$, так как при $s_0 = 2E_k$, очевидно, $x_0 = 0$, и из (11) следует $Q(2E_k) = 1$; $Q(-\infty) = 0$, так как при $s_0 \rightarrow -\infty$ $x_0 \rightarrow \infty$, и из (11) следует $Q(s_0) \rightarrow 0$.

Произведем подстановку $U(s_0) = Q(s_0) \exp(As_0)$, приводящую к уравнению

$$U''(s_0) - \left[A^2 + B\sqrt{4E_k^2 - s_0^2}\right] U(s_0) = 0; \quad (15)$$

Граничные условия для $U(s_0)$

$$U(2E_k) = \exp(2AE_k); \quad U(s_0 \rightarrow -\infty) \rightarrow 0.$$

Используя аналогию уравнения (15) с уравнением Шредингера, ищем его приближенное «квазиклассическое» решение в виде $\exp[Z(s_0)]$ и, пренебрегая второй производной от $Z(s_0)$, получаем приближенно

$$U(s_0) = \frac{C_1}{\left[A^2 + B\sqrt{4E_k^2 - s_0^2}\right]^{1/2}} \exp\left\{-\int_{s_0}^{2E_k} \left[A^2 + B\sqrt{4E_k^2 - s'^2}\right]^{1/2} ds'\right\} + \frac{C_2}{\left[A^2 + B\sqrt{4E_k^2 - s_0^2}\right]^{1/2}} \exp\left\{\int_{s_0}^{2E_k} \left[A^2 + B\sqrt{4E_k^2 - s'^2}\right]^{1/2} ds'\right\}. \quad (16)$$

Из условия $U(s_0 \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$ следует $C_2 = 0$. Из второго граничного условия $U(2E_k) = \exp(2E_k A)$ получаем $C_1 = A \exp(2E_k A)$. Полагая в полученном решении $s_0 = 0$ и возвращаясь к $Q(s_0)$, получаем

$$\langle \Gamma_q \rangle = Q(0) = \frac{1}{[1+N]^{1/2}} \exp\left\{-\frac{\pi E_k^2}{\hbar c b h (\sigma + \sigma_{av})} \varphi(N)\right\}, \quad (17)$$

где $N = \frac{8E_k D_i}{\hbar c (\sigma + \sigma_{av})^2}$, а функция $\varphi(N) = \frac{8}{\pi N} \left\{ \int_0^1 \left[1 + N\sqrt{1-t^2}\right]^{1/2} dt - 1 \right\}$ дает перенормировку

идеальной экспоненты в (9), полностью описывая влияние неупорядоченности с помощью одного параметра N .

При слабом влиянии неупорядоченности $N \ll 1$ приближенное вычисление интеграла дает

$$Q(0) \approx \exp\left\{-\frac{\pi E_k^2}{\hbar c (\sigma_{av} + \sigma) b h} + \frac{16 E_k^3 D_i}{3(\hbar c)^2 b h (\sigma_{av} + \sigma)^3}\right\}. \quad (18)$$

Первое слагаемое в показателе экспоненты согласуется с выражением (9) с учетом перенормировки внешнего напряжения средним значением внутреннего напряжения σ_{av} (например, из-за асимметрии распределения примесей по долинам рельефа). Отрицательное значение $\sigma_{av} < 0$ понижает вероятность туннелирования. Второе слагаемое в показателе экспоненты (18) описывает поправку, обусловленную флуктуациями внутренних напряжений, и, будучи положительным, напротив, приводит к увеличению вероятности туннелирования.

При сильной неупорядоченности $N \gg 1$

$$Q(0) \approx \frac{1}{N^{1/2}} \exp\left\{-2E_k A(N)^{1/2} \int_0^1 (1-t^2)^{1/4} dt\right\} = \sqrt{\frac{\hbar c}{8E_k D_i}} (\sigma + \sigma_{av}) \exp\left\{-K_1 \frac{(2E_k)^{3/2}}{\sqrt{\hbar c D_i b h}}\right\}, \quad (19)$$

где $K_1 = \int_0^1 (1-t^2)^{1/4} dt = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(1/4)}{6\Gamma(3/4)} \approx 0,874019\dots$, Γ — интеграл Эйлера второго рода.

Обращает на себя внимание отсутствие зависимости показателя экспоненты от напряжения. По порядку величины действие при сильной неупорядоченности составляет $1/\sqrt{N}$ от идеального значения, т.е. вероятность туннелирования в среднем повышается. Это проявление вклада от благоприятствующих флуктуаций, понижающих барьер.

В общем случае произвольных значений N для показателя экспоненты можно написать аппроксимацию

$$\ln \langle \Gamma_q \rangle = -\frac{\pi E_k^2}{\hbar c b h (\sigma + \sigma_{av})} \frac{1 + 1,53736\sqrt{N}}{1 + 1,23656\sqrt{N} + 0,69074N}, \quad (20)$$

максимальная погрешность которой $\sim 0,5\%$.

Зависимость абсолютного значения показателя экспоненты средней вероятности туннельного образования пары кинков от эффективного напряжения проиллюстрирована на рис. 1. Как видно, резкий рост этой величины при уменьшении эффективного напряжения в идеальном кристалле (приводящий к еще более резкому убыванию самой вероятности) сменяется ее выходом на конечное значение в соответствии с (19). Это предельное значение уменьшается при увеличении степени неупорядоченности.

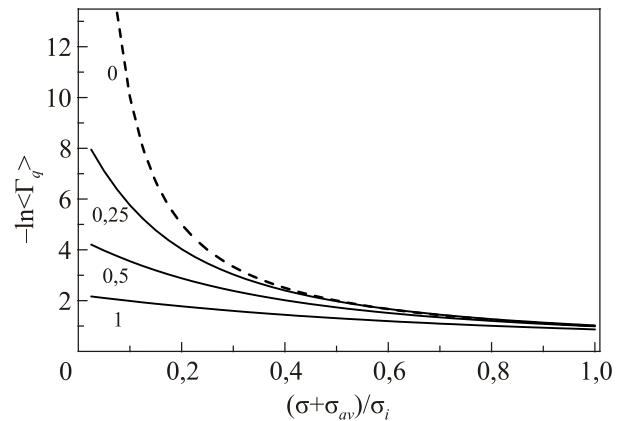


Рис. 1. Зависимость логарифма средней вероятности образования пары кинков при различной степени неупорядоченности, характеризуемой параметром $4\hbar c (b h)^2 D_i / \pi^2 E_k^3$, значения которого указаны цифрами у кривых. Штриховая линия соответствует идеальной зависимости от напряжения, $\sigma_i = 2\sqrt{E_k D_i} / \hbar c$.

Заклучение

Промоделировано влияние неупорядоченной составляющей энергетического рельефа кристалла на образование пар дислокационных кинков при низких температурах, когда этот процесс имеет характер квантового туннелирования. Ввиду предполагаемого случайного характера возмущений вероятность зарождения каждой пары кинков Γ_q зависит от конкретной реализации внутренних напряжений в окрестности места события. В разных удаленных друг от друга местах вдоль линии дислокации такие реализации статистически независимы. Поэтому при множественном параллельном возникновении пар кинков частота их образования самоусредняется в силу законов больших чисел, так что скорость движения дислокации определяется средней по всем возможным конфигурациям случайных внутренних напряжений вероятностью $\langle \Gamma_q \rangle$.

В результате проведенного расчета найдена зависимость усредненной вероятности туннельного образования пары кинков от движущей силы, параметров струнной модели и статистических характеристик случайных внутренних напряжений. Рассматривался случай низких значений движущей силы, применительно к дислокациям это означает напряжения как внешние, так и внутренние, малые по сравнению с напряжением Пайерлса. При этом задача сводится к описанию одномерного движения по коллективной координате — относительному расстоянию между кинком и антикинком в зарождающейся паре, что позволяет использовать хорошо разработанные методы теории случайных одномерных процессов. Расчет показал в итоге, что даже относительно слабые по сравнению с кристаллическим рельефом возмущения приводят к существенной модификации зависимости частоты образования кинков от движущей силы.

Хотя к описанию движения дислокаций в классических (не квантовых) материалах напрямую полученные результаты неприменимы, некоторые качественные их следствия, например, конкуренция уменьшающей частоту образования кинков однородной перенормировки действующего напряжения и повышающих эту частоту флуктуаций внутренних напряжений могут помочь понять часто наблюдаемое разнонаправленное влияние легирования на пластичность [6]. Рисунок 2 качественно иллюстрирует такое влияние. Наличие среднего вклада случайного потенциала может быть обусловлено динамическим старением дислокаций, приводящим к возникновению некоторого напряжения пиннинга, которое играет роль порога в движении дислокаций. Однако вопрос о соотношении средней и флуктуационной составляющих возмущающего рельефа требует дополнительного исследования. Оставлено в стороне также изучение влияния на зарождение пар кинков преактивации и температуры.

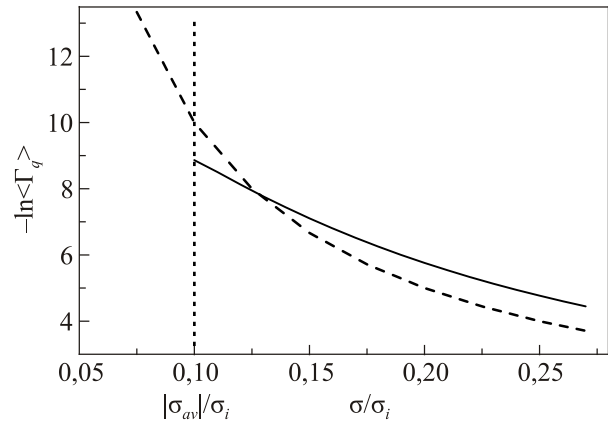


Рис. 2. Конкуренция пиннинга и флуктуаций, понижающих высоту барьера. Средняя перенормировка напряжения $\sigma_{av} = -0,1\sigma_i$, параметр $4\hbar c(bh)^2 D_i / \pi^2 E_k^3 = 0,25$. Штриховая линия соответствует идеальному кристаллу.

Проведенный расчет допускает различные обобщения, расширяющие область его использования. Применительно к дислокациям возможно наложение другого типа локальных возмущений, служащих центрами зарождения кинков. Влияние таких центров сводится к перенормировке высоты барьера — $2E_k$, в идеальном кристалле — на некоторую величину ΔE . Напомним, что при переходе от формулы (16) к (17) начальное значение случайного потенциала $s(x)$ полагалось нулем, что, в принципе, необязательно. Поведение $s(x)$ при размере пары $x \sim d_k$, когда кинк и антикинк перекрываются, вещь условная, и полученные выражения допускают замену s_0 на другое значение ΔE . Это не должно привести к существенной модификации вычисленной зависимости частоты рождения кинков от напряжения ввиду локального характера вносимого возмущения. Как показывают расчет в [29] и детальное исследование в теории разупрочнения материалов при легировании (см., например, [23]), возмущения, локализованные в области размеров порядка ширины кинка, слабо зависят от напряжения при $\sigma \ll \sigma_p$.

Отметим также чрезвычайно общий характер используемой модели, что допускает перенос полученных результатов на другие системы с переключением состояний в физике, химии, биологии и т.д., в которых существенна низкотемпературная динамика кинк-солитонов или доменных стенок [36–38].

1. С. Cazorla and J. Boronat, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 035003 (2017).
2. В.Д. Нацик, А.Д. Рощупкин, *ФНТ* **6**, 101 (1980) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **6**, 49 (1980)].
3. В.Д. Нацик, Г.И. Кириченко, В.В. Пустовалов, В.П. Солдатов, С.Э. Шумилин, *ФНТ* **22**, 965 (1996) [*Low Temp. Phys.* **22**, 733 (1996)].
4. А.Н. Диулин, Г.И. Кириченко, В.Д. Нацик, В.П. Солдатов, *ФНТ* **24**, 595 (1998) [*Low Temp. Phys.* **24**, 452 (1998)].

5. В.Д. Нацик, В.П. Солдатов, Л.Г. Иванченко, Г.И. Кириченко, *ФНТ* **30**, 340 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 253 (2004)].
6. Г.И. Кириченко, В.Д. Нацик, В.В. Пустовалов, В.П. Солдатов, С.Э. Шумилин, *ФНТ* **36**, 445 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 351 (2010)].
7. В.В. Пустовалов, *ФНТ* **15**, 901 (1989) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **15**, 497 (1989)].
8. Л.А. Алексеева, Д.Н. Казаков, *ФТТ* **49**, 2005 (2007) [*Phys. Solid-State* **49**, 2104 (2007)].
9. А.А. Лисунов, В.А. Майданов, В.Ю. Рубанский, С.П. Рубец, Э.Я. Рудавский, С.Н. Смирнов, *ФНТ* **42**, 1372 (2016) [*Low Temp. Phys.* **42**, 1075 (2016)].
10. И.М. Лифшиц, Ю.М. Каган, *ЖЭТФ* **62**, 385 (1972) [*Sov. Phys. JETP* **35**, 206 (1972)].
11. U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, World Scientific Publishing Co. Pvt. Ltd, Singapore (2008).
12. Б.В. Петухов, В.Л. Покровский, *Письма в ЖЭТФ* **15**, 63 (1972) [*JETP Lett.* **15**, 44 (1972)].
13. P-G de Gennes, *C. R. Physique* **7**, 561 (2006).
14. S. Takagi, *Macroscopic Quantum Tunneling*, Cambridge University Press, Cambridge (2002).
15. K. Maki, *Phys. Rev. B* **18**, 1641 (1978).
16. И.В. Криве, А.С. Рожавский, *ФНТ* **6**, 1272 (1980) [*Sov. Low Temp. Phys.* **6**, 618 (1980)].
17. V.I. Ivlev and V.I. Mel'nikov, *Phys. Rev. B* **36**, 6889 (1987).
18. E. Kim and M.H.W. Chan, *Science* **305**, 1941 (2004).
19. D. Aleinikava, E. Dedits, and A.B. Kuklov, *J. Low Temp. Phys.* **162**, 464 (2011).
20. А.Ф. Андреев, *УФН* **118**, 251 (1976) [*Sov. Phys. Usp.* **19**, 137 (1976)].
21. F. Marchesoni, *Phys. Rev. B* **57**, 7930 (1998).
22. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Атомиздат, Москва (1972).
23. Б.В. Петухов, *Динамика дислокаций в кристаллическом рельефе. Дислокационные кинки и пластичность кристаллических материалов*, Lambert Academic Publishing, Saarbrücken (2016).
24. Б.В. Петухов, В.Л. Покровский, *ЖЭТФ* **63**, 634 (1972) [*JETP* **36**, 336 (1973)].
25. A.R. Bishop, J.A. Krumhansl, and S.E. Trullinger, *Solitons in Condensed Matter: A Paradigm Physica D* **1**, 1 (1980).
26. О.М. Браун, Ю.С. Кившарь, *Модель Френкеля–Конторовой. Концепции, методы, приложения*, Springer, Berlin (2008).
27. М.Б. Волошин, И.Ю. Кобзарев, Л.Б. Окунь, *Ядерн. физ.* **20**, 1229 (1974) [*Sov. J. Nucl. Phys.* **20**, 644 (1975)].
28. M.V. Fistul, A. Wallraff, Y. Koval, A. Lukashenko, B.A. Malomed, and A.V. Ustinov, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 257004 (2003).
29. Б.В. Петухов, В.Я. Сухарев, *ФНТ* **9**, 520 (1983) [*Sov. J. Low. Temp. Phys.* **9**, 264 (1983)].
30. T. Kato, *Phys. Rev. B* **64**, 134106 (2001).
31. I.V. Krive and A.S. Rozhavsky, *Phys. Lett. A* **132**, 363 (1988).
32. Б.В. Петухов, *ФТТ* **13**, 1445 (1971) [*Sov. Phys. Solid State* **13**, 1204 (1971)].
33. J.-P. Bouchaud and A. George, *Phys. Rep.* **195**, 127 (1990).
34. M. Yor, *Exponential Functionals of Brownian Motion and Related Processes*, Springer, Berlin (2000).
35. S.N. Majumdar, in: *The Legacy of Albert Einstein: A Collection of Essays in Celebration of the Year of Physics*, World Scientific, Singapore (2007), p. 93.
36. M. Dubé and P.C. Stamp, *J. Low Temp. Phys.* **110**, 779 (1998).
37. Р. Раджараман, *Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля*, Мир, Москва (1985).
38. T. Vachaspati, *Kinks and Domain Walls. An Introduction to Classical and Quantum Solitons*, Cambridge University Press, Cambridge, New York, Melbourne, Madrid, Cape Town, Singapore, São Paulo (2006).

Тунельне зародження пар кінків на дислокаціях
в потенційному рельєфі Пайерлса
з випадковими спотвореннями

Б.В. Петухов

У зв'язку з підвищенням останнім часом інтересу до механічних властивостей квантових кристалів існує потреба вивчення низькотемпературної динаміки дислокацій. В цю динаміку важливий внесок вносить тунелювання через бар'єри, які створені періодичним рельєфом кристалічної ґратки, що призводить до утворення пар кінків. Недостатня досконалість кристалів найчастіше накладає неконтрольовані збудження, які модифікують закономірності процесу тунельного утворення кінків. В роботі моделюється вплив збуджень випадковими полями внутрішніх напружень типу просторового «гаусівського шуму». Розраховується середня з реалізацій випадкових полів частота квантово-механічного тунельного утворення пар кінків. Показано, що навіть відносно слабкі у порівнянні з кристалічним рельєфом збудження призводять до суттєвої модифікації залежності частоти утворення кінків від рушійної сили.

Ключові слова: квантові кристали, кінки, тунелювання, випадкові внутрішні напруження.

Tunneling nucleation of kink pairs on dislocations
in the Peierls potential relief
with random distortions

B.V. Petukhov

Due to the recent increased interest in the mechanical properties of quantum crystals, there is a need to study the low-temperature dynamics of dislocations. Tunneling through the barriers created by the periodic relief of the crystal lattice, which leads to the formation of pairs of kinks, makes an important con-

tribution to this dynamics. The lack of perfection of the crystals imposes often uncontrolled perturbations, modifying the features of the process of the tunneling formation of kinks. The perturbations are modeled by the random fields of internal stresses such as spatial "Gaussian noise". The average over realizations of random fields rate of quantum-mechanical tunnel formation of the kink pairs is calculated. It is shown that even perturbations that

are relatively weak in comparison with the crystalline relief lead to a significant modification of the kink formation rate dependence on the driving force.

Keywords: quantum crystals, kinks, tunneling, random internal stresses.