

07,12

Влияние экстремальных флуктуаций примесного рельефа на эволюцию кинк-солитонов в легированных материалах

© Б.В. Петухов

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН,
Москва, Россия

E-mail: petukhov@ns.crys.ras.ru

(Поступила в Редакцию 21 июля 2015 г.)

Динамика кинк-солитонов проявляет высокую чувствительность к случайным неоднородностям потенциального рельефа. Эволюция кинков после их зарождения существенно модифицируется наиболее сильными флуктуациями потенциала. Учет стохастической природы такой модификации производится с помощью теории экстремальных отклонений при случайных блужданиях.

1. Введение

Кинк-солитоны (далее кинки) играют важную роль в кинетике многочисленных систем в физике, химии, биологии [1]. Их эволюция в материалах с хаотическим распределением примесей отличается рядом особенностей по сравнению с поведением обычных частиц, что связано со своеобразной природой этих объектов. В частности, потенциальный рельеф для движения кинков в кристаллах с хаотически распределенными примесями или другими точечными дефектами, как было показано в [2], представляет собой случайную функцию, совершающую хаотические блуждания по шкале энергии. Хотя каждый отдельный шаг такого блуждания статистически не зависит от предыдущих, суммирование шагов приводит к наличию памяти о предыстории или, другими словами, к корреляциям. Флуктуации такого потенциала могут быть чрезвычайно велики, и возникает вопрос об их влиянии на эволюцию кинков.

В [2,3] было показано, что влияние примесей на динамику дислокационных кинков может приводить к кинетическому фазовому превращению с изменением характера движения и переходом к так называемой аномальной кинетике. Такой переход был связан с повышением роли экстремально сильных флуктуаций хаотического примесного рельефа вследствие возникновения медленно убывающих асимптотик времен задержек кинков на них. Это предсказание было экспериментально подтверждено в [4]. Обзор многочисленных работ по аномальной кинетике представлен в [5]. В [6] было показано наличие порога подвижности кинков и дислокаций при несимметричном распределении примесей по долинам кристаллического рельефа. Для описания околопорогового поведения был использован фундаментальный результат теории экстремальных отклонений процесса случайных блужданий, восходящий к теории Спарре Андерсена (см., например, [7,8]). Далее он описан подробно и использован с целью получения новых результатов для кинетики кинков. Отметим, что развитая в 50-е годы XX века теория Спарре Андерсена

долгое время использовалась крайне редко, о чем можно только сожалеть, но теперь ситуация кардинально изменилась. Появились многочисленные приложения в физике, биологии, экономике, климатологии и т.д. [9,10]. Этому немало способствовало дальнейшее развитие и получение многочисленных новых следствий теории, касающихся статистики рекордов в случайных процессах [11,12].

Целью настоящей работы является описание влияния экстремальных флуктуаций потенциального рельефа на кинетику кинков, в том числе аномальную, в широком интервале значений движущей силы.

2. Рельеф для движения кинков в поле хаотически расположенных примесей, вероятность выживания кинка

Рассматривается задача о зарождении резких кинков, когда ширина кинка укладывается в один период решетки. Для наглядности можно представлять себе дислокационные кинки, ограничивающие локальное смещение дислокации между соседними долинами кристаллического рельефа [13]. Дефекты, расположенные в той или другой из этих соседних долин, играют различную роль, приводя к повышению или понижению энергии кинка. Пусть изменение дефектом энергии кинка E_d превышает тепловую энергию kT . Тогда рождение кинков будет необратимым лишь в местах с таким расположением дефектов, в которых при дальнейшей эволюции кинков их энергия не превзойдет первоначальный уровень. В противном случае кинк оказывается в ловушке и застопоривается. Таким образом, для выживания подвижного кинка, вносящего вклад в кинетику, требуется, например, чтобы ближайший дефект, если он неблагоприятный (повышает энергию кинка), располагался дальше чем на расстоянии $l > aE_d/u$, где u — создаваемое движущей силой понижение энергии кинка при его смещении на период решетки a . Если ближайшие дефекты (один или несколько) благоприятные (понижающие энергию

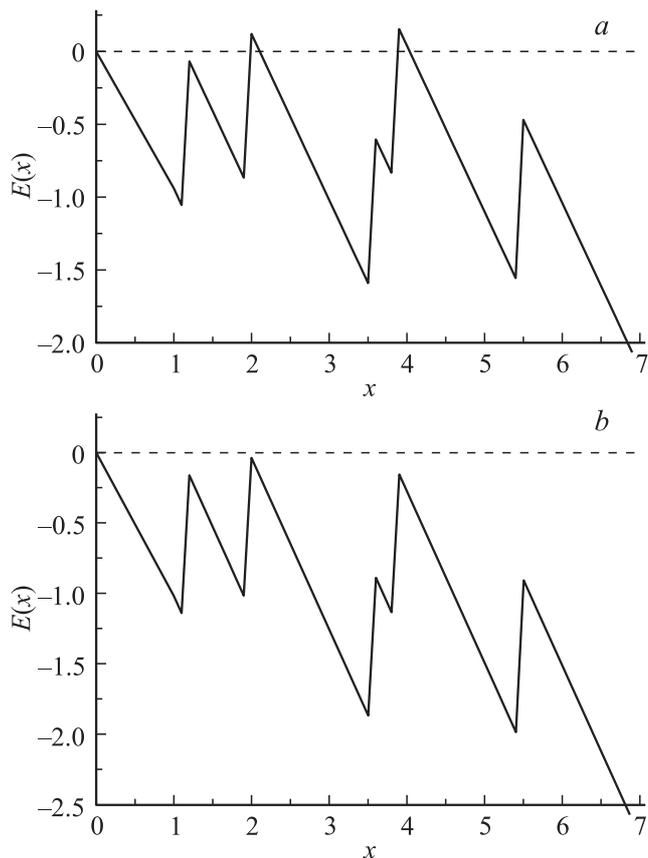


Рис. 1. Случайный рельеф для миграции кинка (схема). *a* — превышение первоначального уровня энергии, показанного штриховой линией, приводит к остановке кинка; *b* — при более высокой движущей силе флуктуации потенциала не препятствуют уходу кинка от места рождения.

кинка), то необходимо чтобы последующие скопления неблагоприятных дефектов не компенсировали создаваемое совместным действием благоприятных дефектов и движущей силы понижение потенциала кинка. Таким образом, вероятность выживания кинка определяется большим (в пределе бесконечным) числом дефектов вдоль миграционного рельефа.

Рис. 1 иллюстрирует две ситуации. В одном случае (при относительно низкой движущей силе) максимумы случайного потенциала превышают начальный уровень энергии и создают барьеры, запирающие кинк вблизи места его рождения. Во втором случае (при более высокой движущей силе) максимумы уходят в область отрицательных значений энергии, и кинк может мигрировать от места рождения. На вопрос о том, возможна ли такая ситуация, при которой на сколь угодно протяженной длине при возрастающем размахе флуктуаций потенциал не превысит требуемого уровня, и должна ответить развиваемая теория.

В рассматриваемой модели потенциальный рельеф для миграции кинков по узлам кристаллической решетки будет описываться выражением, включающим детерми-

нированную и случайную составляющие:

$$E(n) = \sum_{i=1}^n x_i - un \equiv \sum_{i=1}^n y_i. \quad (1)$$

Здесь u — понижение энергии кинка при его смещении на период решетки за счет приложенной движущей силы, x_i — случайные величины, представляющие собой изменение энергии, создаваемое флуктуирующим примесным полем. Они предполагаются независимыми и имеющими одинаковое статистическое распределение $P(x)$. Эквивалентно можно рассматривать случайные величины $y_i = x_i - u$. Таким образом, выражение (1) описывает при изменении n асимметричное случайное блуждание по шкале энергии с постоянным дрейфом, создаваемым движущей силой. Среднее значение случайных величин x_i , если оно отлично от нуля, может быть включено в u , тогда $\langle x_i \rangle = 0$ (угловые скобки обозначают усреднение).

Вероятность выживания p определяется в рассматриваемой модели условием, что описываемая выражением (1) энергия $E(n)$ не превысит первоначального значения, принимаемого за начало отсчета энергии, ни при каком n от 0 до ∞ . Иногда для такой ситуации употребляют заимствованный из англоязычной литературы термин „персистенция“ (persistence). Теория случайных блужданий дает для вероятности выживания p следующую общую формулу, справедливую при любых распределениях $P(x)$ [7,8,12]:

$$p = \exp\{-S\}, \quad S = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} q_n^+, \quad (2)$$

где q_n^+ — вероятность того, что $E(n) > 0$ на n -м шаге.

При существовании конечной дисперсии распределения $P(x)$ при больших значениях n в силу центральной предельной теоремы теории вероятностей распределение $E(n)$ $Q_n(E)$ сходится к нормальному закону

$$Q_n(E) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi Dn}} \exp\left\{-\frac{(E + nu)^2}{2Dn}\right\}.$$

Здесь D — дисперсия распределения $P(x)$, $D = \langle x^2 \rangle$. Таким образом,

$$q_n^+ \rightarrow \int_0^{\infty} dE Q_n(E) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(u\sqrt{\frac{n}{2D}}\right).$$

На основе этого результата в [6] было сделано заключение о наличии порога $p = 0$ при $u \leq 0$, $p \sim u$ при малом $u > 0$. В настоящей работе изучено поведение вероятности выживания кинка также и в ситуации, когда распределение случайных вкладов в потенциал кинка не имеет конечной дисперсии и подвижность кинка имеет аномальный характер.

3. Аномальный режим движения кинков

В той ситуации, когда вероятность больших вкладов в потенциал кинка убывает недостаточно быстро (например, $P(x) \sim x^{-1-\mu}$ при $\mu < 2$), дисперсия $D = \langle x^2 \rangle$ обращается в бесконечность, что, естественно, требует модификации расчета. В этом случае говорят о наличии „тяжелых хвостов“ распределения, характеризуемых индексом μ . Зависимость индекса μ от температуры и движущей силы была определена в [2,3]. Существенным является поведение Фурье-образа $P(x)$ при малых k : $P(k) = 1 - i(E_\mu|k|)^\mu \dots$, E_μ — характерная величина шага случайного блуждания. Будут рассматриваться значения μ в диапазоне $1 < \mu < 2$. При этом $Q_n(E)$ сходится при больших n не к нормальному распределению, а к так называемым распределениям Леви [5,12]

$$Q_n(E) \rightarrow \frac{1}{E_\mu n^{1/\mu}} L_\mu \left(\frac{E + nu}{E_\mu n^{1/\mu}} \right), \quad (3)$$

где

$$L_\mu(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp(-ikz - |k|^\mu).$$

Будем проводить вычисления вероятности выживания p и S в Фурье-представлении

$$\begin{aligned} q_n^+ &= \int_0^\infty dE Q_n(E + un) \\ &= \int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{2\pi(k - i\delta)} \exp\{-iknu - (E_\mu|k|)^\mu\} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \frac{\sin k}{k} \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{(E_\mu k)^\mu}{u^\mu n^{\mu-1}}\right] \right\}, \quad (4) \end{aligned}$$

$$S_\mu = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \frac{\sin k}{k} f_\mu [(E_\mu k/u)^\mu], \quad (5)$$

где $f_\mu(z) = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n} [1 - \exp(-z/n^{\mu-1})]$, $z = (E_\mu k/u)^\mu$.

Определим поведение вероятности выживания при низкой движущей силе, что соответствует малой величине u и большим z . При больших z , пока экспоненциальные члены в $f_\mu(z)$ малы, сумма представляет собой логарифмически расходящийся по верхней границе суммирования ряд. Экспоненциальные члены начинают обрезать расходимость при $n \sim z^{1/(\mu-1)}$. Таким образом, асимптотика $f_\mu(z)$ при больших z имеет вид $f_\mu(z) \approx \ln(z^{1/(\mu-1)}) + \dots$. Это приводит к вкладу в S_μ , равному

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \frac{\sin k}{k} \ln \left[\left(\frac{E_\mu k}{u} \right)^{\mu/(\mu-1)} \right].$$

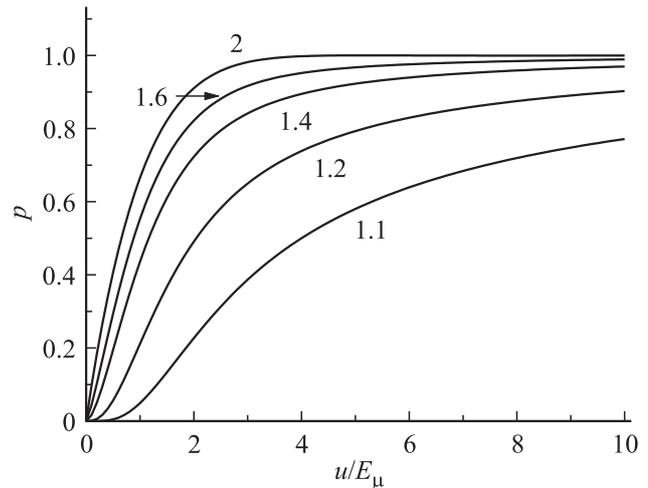


Рис. 2. Зависимость вероятности выживания кинка от движущей силы u для различных значений индекса Леви μ , указанных около кривых.

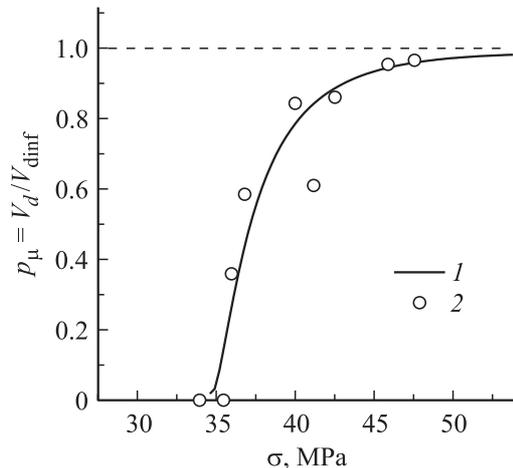


Рис. 3. Модифицирующий частоту рождения кинков фактор $p_\mu(u)$ с $\mu = 1.6$ и аргументом, нормированным для сопоставления с экспериментом (1). 2 — экспериментальные данные для скорости дислокаций в кремнии [15].

Зависящая от u часть имеет вид

$$-\frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk \frac{\sin k}{k} \ln(u^{\mu/(\mu-1)}) = -\frac{\mu}{2(\mu-1)} \ln u.$$

Это дает в p множитель $u^{\mu/2(\mu-1)}$. При $\mu = 2$ получаем линейный закон околорогового поведения вероятности выживания в соответствии с [6]. Поведение вероятности выживания в широком интервале значений движущей силы, найденное с помощью численного расчета по формуле (5), проиллюстрировано для нескольких значений индекса Леви μ на рис. 2. Отметим, что специальный случай $\mu = 1$ был детально исследован в [14]. Упомянем также, что рассчитанная величина p определяет, как показано в [12], еще ряд интересных статистических

величин, касающихся распределения числа рекордных значений случайной функции (1).

4. Заключение

Продвинутая теория случайных блужданий позволяет получать содержательные оценки кинетики кинков для широкого класса распределений создаваемого хаотическими дефектами беспорядка в кристаллах. Эти результаты зависят только от асимптотического поведения функций распределения при экстремально больших значениях аргумента, что делает результаты до некоторой степени универсальными. В настоящей работе показано, что наличие экстремально сильных флуктуаций случайного потенциала приводит к тому, что отнюдь не все рождающиеся кинки вносят вклад в кинетику системы, а лишь некоторая конечная их доля $p < 1$, определяемая вероятностью выживания. Применение фундаментальных результатов теории случайных блужданий позволило рассчитать зависимость вероятности выживания кинка в случайном потенциале от величины движущей силы в широком интервале ее изменения.

Найденные зависимости качественно согласуются с наблюдаемой экспериментально существенной модификацией динамики дислокационных кинков в полупроводниках [15] в области низких напряжений, как это качественно иллюстрируется на рис. 3 с идентификацией $p_\mu = V_d/V_{\text{dinf}}$, где V_d — скорость дислокаций, а V_{dinf} — ее значение при высоких напряжениях, когда влияние примесей незначительно. Наличие порога подвижности — так называемых стартовых напряжений — означает асимметрию содержания примесей по долинам рельефа (большая часть связана с дислокацией, что естественно). Рисунок соответствуют следующие параметры: стартовое напряжение $\sigma_{\text{st}} = 34.6$ МПа, $V_d/V_{\text{dinf}} = p_\mu$, $\mu = 1.6$. Вид экспериментальной кривой указывает на то, что имеет место не простая перенормировка движущей силы средним значением примесного поля, а модификация зависимости в ограниченной области низких напряжений, описание которой требует учета стохастического характера примесного рельефа.

Список литературы

- [1] T. Vachaspati. Kinks and domain walls. Cambridge University Press. N. Y. (2006). 176 p.
- [2] Б.В. Петухов. ФТТ **13**, 1445 (1971).
- [3] Б.В. Петухов. ФТТ **30**, 2893 (1988).
- [4] Yu.L. Iunin, V.I. Nikitenko, V.I. Orlov, B.V. Petukhov. Phys. Rev. Lett. **78**, 3137 (1997).
- [5] J.-P. Bouchaud, A. Georges. Phys. Rep. **195**, 127 (1990).
- [6] Б.В. Петухов. ФТТ **24**, 439 (1982).
- [7] J.H.V. Kemperman. The passage problem for a stationary Markov chain. University of Chicago Press, Chicago (1961). 127 p.
- [8] В. Феллер. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Мир, М. (1984). Т. 2. 752 с.
- [9] J. Krug, K. Jain. Physica A **358**, 1 (2005).
- [10] G. Wergen, M. Bogner, J. Krug. Phys. Rev. E **83**, 051 109 (2011).
- [11] В.В. Невзоров. Рекорды. Математическая теория. ФАЗИС, М. (2000). 244 с.
- [12] S.N. Majumdar, G. Schehr, G. Wergen. J. Phys. A **45**, 355 002 (2012).
- [13] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 598 с.
- [14] P.Le Doussal, K.J. Wiese. Phys. Rev. E **79**, 051 105 (2009).
- [15] V. Orlov, Yu.L. Iunin, M.V. Badylevich, O. Lysytskiy, H. Richter. Solid State Phenom. **95–96**, 465 (2004).