

- [1] Elemans J. B., Van Loo B., Loopstra B. O. // J. Solid State Chem. 1971. V. 3. N 2. P. 238—242.  
 [2] Bogush A. K., Pavlov V. I., Balyko L. V. // Cryst. Res. Technol. 1983. V. 18. N 5. P. 589—598.  
 [3] Quezel-Ambrunaz S. // Bull. Soc. Fr. miner. et crystallogr. 1969. V. 91. N 4. P. 339—343.  
 [4] Wood V. E., Austin A. E., Collins E. W. // J. Phys. Chem. Solids. 1973. V. 34. N 5. P. 859—868.  
 [5] Троянчук И. О., Черный А. С., Зонов Ю. Г. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 2. С. 193—197.  
 [6] Троянчук И. О., Мазовко А. В. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 4. С. 1174—1173.

Институт физики твердого тела  
и полупроводников АН БССР  
Минск

Поступило в Редакцию  
21 ноября 1990 г.

УДК 548.4 : 530.1 : 539.2

© Физика твердого тела, том 33, № 6, 1991  
Solid State Physics, vol. 33, N 6, 1991

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ЭВМ ТЕРМОАКТИВИРОВАННОГО ПЕРЕХОДА ДИСЛОКАЦИИ ФРЕНКЕЛЯ—КОНТОРОВОЙ ЧЕРЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ БАРЬЕР

А. И. Ландау, А. В. Гревцова

Вероятность термоактивированного перехода частицы или квазичастицы (например, дислокации) через потенциальный барьер описывается известной формулой Аррениуса  $w = \nu \exp(-U_0/T)$ , где  $U_0$  — высота барьера;  $T$  — температура, выраженная в энергетических единицах;

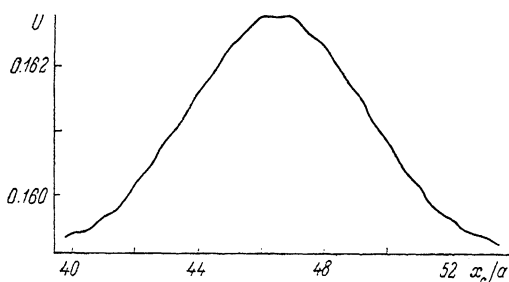


Рис. 1.

$\nu$  — предэкспоненциальный множитель. В развитой Крамерсом теории [1, 2] была предложена следующая формула для  $\nu$ :

$$\nu = (\omega_\alpha / 2\pi\omega_\beta) [(\gamma^2/4m^2 + \omega_\beta^2)^{1/2} - \gamma/2m], \quad (1)$$

где  $m$  — масса частицы;  $\gamma$  — коэффициент силы динамического трения;  $\omega_\alpha$  и  $\omega_\beta$  — условные частоты, которые определяются следующим образом. Если форма потенциальной ямы перед барьером может быть аппроксимирована параболой  $U(x) = 1/2 \alpha^2 x^2$ , а форма вершины барьера — параболой  $U(x) = U_0 - 1/2 \beta^2 (x - x_b)^2$ , где  $x_b$  — координата вершины, то  $\omega_\alpha = \alpha/\sqrt{m}$  и  $\omega_\beta = \beta/\sqrt{m}$ . Проверка теории Крамерса представляет интерес не только для теории дислокаций или диффузии, но и для статистической физики в целом.

В настоящей работе методом компьютерного моделирования исследовался термоактивированный переход через потенциальный барьер дислокации, которая в рамках известной модели Френкеля—Конторовой [3, 4] описывалась уравнениями

$$m \frac{d^2 u_k}{dt^2} + \gamma \frac{du_k}{dt} - A_1 (u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}) - A_2 \sin(2\pi u_k/a) + F + F_k^{\text{б}} + R_k, \quad k=2, 3, \dots, N-1 \quad (2)$$

с граничными условиями  $u_1=0$  и  $u_N=a$ . Здесь  $u_k$  — смещение  $k$ -го атома из положения равновесия;  $a$  — период решетки;  $A_1, A_2$  — параметры модели;  $F$  — внешняя сила;  $F_k^{\text{б}}$  и  $R_k$  — соответственно барьерная сила и сила тепловых толчков, действующих на  $k$ -й атом. Случайная сила  $R_k$  имела нормальное распределение с нулевым средним значением и диспер-

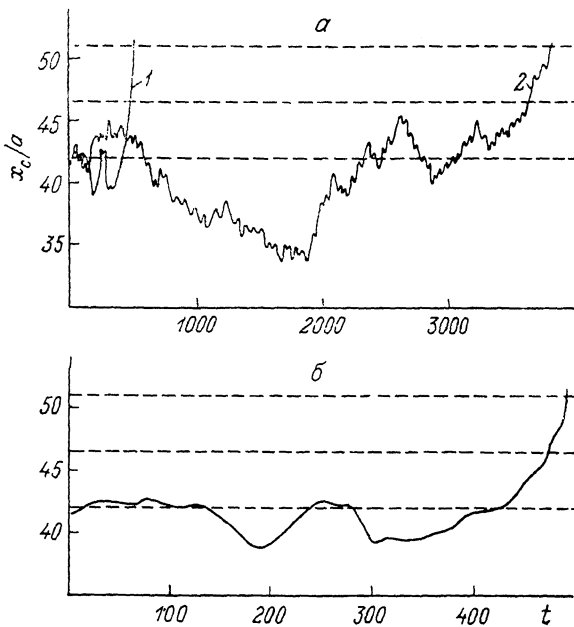


Рис. 2.

сией  $D^2=2\gamma T/\Delta t_r$ , где  $\Delta t_r$  — длительность каждого теплового толчка. Координата  $x_c$  центра дислокации определялась соотношением

$$x_c = \sum_{k=1}^{N-1} \left(k + \frac{1}{2}\right) (u_{k+1} - u_k),$$

а потенциальная энергия  $U$  рассматриваемой системы — соотношением

$$U = \frac{A_1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} (u_{k+1} - u_k)^2 + \frac{aA_2}{2\pi} \sum_{k=1}^N \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi u_k}{a}\right)\right] - \sum_{k=1}^N F_k^{\text{б}} u_k. \quad (3)$$

Силовой барьер выбирался простой прямоугольной формы  $F_k^{\text{б}}=F_0$  при  $k_1 \leq k < k_2$ ,  $F_k^{\text{б}}=-F_0$  при  $k_2 \leq k \leq k_3$  и  $F_k^{\text{б}}=0$  при всех других  $k$  (в работе использовались значения:  $N=80$ ,  $k_1=43$ ,  $k_2=47$  и  $k_3=51$ ). Потенциальный барьер, отвечающий этому силовому барьеру, определялся зависимостью  $U=U(x_c)$ , которая при выбранных значениях  $F_0$  и других параметров находилась с помощью моделирования (рис. 1). Проводя огибающую линию к вершине найденного потенциального барьера, можно было приближенно оценить значение  $\omega_{\text{б}}$ . При моделировании использовались безразмерные параметры:  $\tilde{t} = t\sqrt{A_1/m}$ ,  $\tilde{\gamma} = \gamma/\sqrt{mA_1}$ ,  $\tilde{A} = A_2/A_1$ ,

$T = T/a^2 A_1$  (при дальнейшем изложении знак « $\sim$ » опускается); безразмерные силы выражались в единицах  $aA_1$ .

На рис. 2 изображены две из полученных пространственно-временных траекторий движения дислокации через потенциальный барьер при  $T = 10^{-3}$ ,  $A = 0.1$ ,  $F = 5.5 \cdot 10^{-4}$ ,  $F_0 = 10^{-3}$  и  $\Delta t_r = 5 \cdot 10^{-3}$ . На рис. 2, а кривые 1 и 2 отвечают соответственно значениям  $\gamma_1 = 0.01$  и  $\gamma_2 = 0.5$  при одинаковых других параметрах; на рис. 2, б кривая 1 показана в более крупном масштабе. На обоих рисунках нижняя, средняя и верхняя штриховые линии отвечают соответственно началу, середине и концу силового барьера. Как видно из рис. 2, в случае большего значения  $\gamma$  дислокация совершала больше хаотических движений по барьеру и медленнее его преодолевала.

На основе всех полученных результатов машинного моделирования для каждого заданного значения  $T$  и  $\gamma$  было определено среднее время  $\bar{\tau}$  перехода дислокации через барьер; каждый переход считался совершившимся при первом достижении условия:  $x_c > k_3$ . Для  $T_1 = 10^{-3}$  и  $\gamma_1 = 0.01$  оказалось  $\bar{\tau}_1 = 440$  (в безразмерных единицах времени), а при  $\gamma_2 = 0.5$  было  $\bar{\tau}_2 = 9586$ . Для  $T_2 = 2 \cdot 10^{-3}$  указанным значениям  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  соответствовали  $\bar{\tau}_1 = 230$  и  $\bar{\tau}_2 = 5588$ . Зная  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  и оцененное безразмерное значение  $\omega_3 \approx 0.017$ , можно было при каждом фиксированном  $T$  с помощью формулы (1) найти теоретическое значение отношения  $\bar{\tau}_2/\bar{\tau}_1 = v_1/v_2 = 21.97$ . Результаты же моделирования показывают, что  $\bar{\tau}_2/\bar{\tau}_1 = 21.8$  при  $T_1$  и  $\bar{\tau}_2/\bar{\tau}_1 = 24.3$  при  $T_2$ . Отсюда видно, что для выбранных значений параметров имеет место хорошее согласие между данными моделирования и формулой (1). Кроме того, подтверждено предположение, лежащее в основе теории Крамерса, что преодоление частицей или квазичастицей потенциального барьера совершается в результате постепенного диффузионного переползания частицы через барьер в процессе ее хаотических броуновских блужданий под воздействием большого числа тепловых толчков.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Kramers H. A. // Physica. 1940. V. 7. N 4. P. 284—304.
- [2] Чандрасекар С. Стохастические проблемы в физике и астрономии. М.: ИЛ, 1947. 168 с.
- [3] Конторова Т. А., Френкель Я. И. // ЖЭТФ. 1938. Т. 8. № 12. С. 1340—1358.
- [4] Френкель Я. И. Введение в теорию металлов. М.: Физматгиз, 1958. 368 с.

Физико-технический институт  
низких температур АН УССР  
Харьков

Поступило в Редакцию  
23 ноября 1990 г.

© Физика твердого тела, том 33, № 6, 1991  
Solid State Physics, vol. 33, N 6, 1991

### ФАЗА $YBa_2Cu_3O_{6.5}$ НЕ ЯВЛЯЕТСЯ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ

И. С. Любутин, В. Г. Терзиев, Е. М. Смирновская, А. Я. Шапиро

При исследовании сверхпроводящих свойств поли- и монокристаллов  $YBa_2Cu_3O_{7-y}$  с разной степенью кислородной нестехиометрии  $y$  на кривой  $T_c = f(y)$  обнаруживают две «ступеньки» на уровне  $T_c \approx 90$  и  $T_c \approx 60$  К [1-4]. Первую из этих ступенек естественно связывают с фазой  $YBa_2Cu_3O_7$ , а вторую иногда [5, 6] — с индивидуальной фазой  $YBa_2Cu_3O_{6.5}$ , структура которой сейчас активно обсуждается в литературе [6, 7]. В настоящей работе на образцах  $YBa_2(Cu_{0.99}Fe_{0.01})_3O_{7-y}$  показано, что объем сверхпроводящей фазы резко падает при приближении  $y$  к значению 0.5, указывая,