

## Энергия и барьер Пайерлса дислокации (кинка) Френкеля–Конторовой

© О.В. Усатенко, А.В. Горбач, А.С. Ковалев\*

Харьковский национальный университет,  
61077 Харьков, Украина

\* Физико-технический институт низких температур,  
61164 Харьков, Украина

(Поступила в Редакцию 11 сентября 2000 г.  
В окончательной редакции 9 ноября 2000 г.)

Во втором порядке теории возмущений в континуальном пределе вычислена энергия потенциального рельефа и барьера Пайерлса топологического возбуждения — кинка в модели Френкеля–Конторовой. Предлагается новый метод анализа проблемы в сильно дискретном пределе. Аналитические результаты сравниваются с численными расчетами.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта INTAS-99 (грант № 167) и программы МНОП (грант USU 082087).

В последнее время значительно возрос интерес к изучению влияния дискретности на свойства решений нелинейных уравнений. В частности, большое количество работ посвящено исследованию структуры и динамики кинка в дискретных системах [1–9]. Наиболее часто изучаемыми одномерными нелинейными уравнениями, допускающими решения в виде топологического дефекта — кинка, являются синусоидальное уравнение Гордона (SGE) и модель  $\Phi^4$ . К SGE сводится в длинноволновом пределе известная модель Френкеля–Конторовой [10]. Данная модель неоднократно привлекалась для теоретического рассмотрения дислокаций в кристаллах [11,12], движения краудионов [13], флюксонов в джозефсоновских контактах, доменных границ в магнитоупорядоченных средах и т.д. [14].

Учет дискретности динамической системы приводит к нескольким качественно новым свойствам движения кинка. Во-первых, потенциальная энергия кинка становится зависящей от позиции его центра. Обусловленный дискретностью системы периодический потенциал с периодом, равным периоду решетки, был назван потенциалом Пайерлса, а разность между максимумом и минимумом энергии кинка — барьером Пайерлса (БП). Таким образом, если кинк не обладает достаточной энергией для преодоления БП, он оказывается “запертым” между двумя соседними максимумами потенциала Пайерлса и осциллирует. Во-вторых, если кинк обладает достаточно большой энергией, то в процессе движения он теряет свою энергию и в результате оказывается запертым [8,9].

Существует ряд способов перехода от континуальной модели к дискретной и наоборот [1,2,4]. Как правило, при таком переходе используют те или иные методы теории возмущений. Такие типичные модели, как SGE и  $\Phi^4$ , обладают параметром, преобразующим дискретные системы в соответствующие континуальные в так называемом континуальном пределе. Все упомянутые

методы дают хорошие результаты при оценке некоторых характеристик кинка, таких как энергия и масса. Однако они оказываются мало эффективными при рассмотрении более тонких эффектов, таких как барьер Пайерлса.

В данной работе в рамках модели Френкеля–Конторовой во втором порядке теории возмущений по малому параметру отношения амплитуды нелинейного потенциального рельефа к энергии межчастичного взаимодействия вычислена поправка к энергии известного решения Френкеля–Конторовой [10]. Сравнение с численными результатами показывает, что поправка к энергии во втором порядке теории возмущений дает более точный результат, тогда как поправка к БП заметно ухудшает результат предыдущего шага теории возмущений. Это свидетельствует о том, что совпадение аналитического и численного выражений для БП в первом порядке теории возмущений является случайным [2]. Более того, на втором шаге теории возмущений возникает поправка к величине БП того же порядка по малому параметру, что и на первом шаге. Такое несоответствие подтверждает ранее сделанные предположения о том, что все члены теории возмущений вносят одинаковый по порядку вклад в величину БП [2,3]. Это ставит под сомнение применимость методов теории возмущений для вычисления БП. Причина неприменимости теории возмущений заключается в том, что величина барьера является экспоненциально малой. Поэтому для получения величины БП необходимо учитывать все члены асимптотического разложения или использовать какой-либо иной метод.

В работе рассмотрен также предел слабой межатомной связи в модели Френкеля–Конторовой. Излагается асимптотический метод подсчета энергии кинка, основанный на комбинации точных (в ядре дислокации) и приближенных линеаризованных (на ее хвостах) решений уравнений движения.

## 1. Постановка задачи

Рассмотрим одномерную одноатомную цепочку (масса атомов  $m$ , межатомное расстояние  $a = 1$ ) с гармоническим потенциалом межчастичного взаимодействия

$$U(\xi_n) = \frac{\alpha}{2}(v_n - v_{n-1})^2, \quad (1)$$

помещенную в периодическое внешнее поле

$$V(x_n) = U_0(1 - \cos x_n), \quad (2)$$

где  $x_n$  — пространственная координата  $n$ -го атома,  $x_n = x_n^0 + v_n$ ,  $v_n$  — смещение  $n$ -го атома из его положения  $x_n^0 = 2\pi n$  при  $n \leq 0$ ,  $x_n^0 = 2\pi(n + 1)$  при  $n > 0$ .

Введем переменные  $u_n$ , задающие смещения частиц из положения  $x_n^0 = \pi n$  как для отрицательных, так и для положительных номеров  $n$  ( $u_n = v_n$  при  $n \leq 0$ ,  $u_n = 2\pi + v_n$  при  $n > 0$ ). Статические смещения  $u_n$  задаются системой разностных уравнений

$$K(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) + \sin u_n = 0, \quad (3)$$

где параметр  $K = \alpha/U_0$  характеризует отношение энергии взаимодействия вдоль цепочки и энергии взаимодействия с подложкой.

## 2. Континуальный предел ( $K \gg 1$ )

При достаточно сильной межатомной связи ( $K \gg 1$ ) смещения атомов цепочки являются плавной функцией координаты, что позволяет перейти от дискретных уравнений (3) к континуальному пределу. Вместо смещений  $u_n$  вводим функцию  $u(x)$  непрерывной координаты  $x$ . Смещения  $u_{n\pm 1}$  могут быть разложены вблизи  $u_n$  в ряд по степеням малого параметра  $1/L$ , где  $L$  — характерный масштаб изменения функции  $u(x)$ . Как следует из (3),  $L \sim \sqrt{K}$ . В первом порядке теории возмущений ограничимся разложением  $u_{n\pm 1}$  с точностью до членов второго порядка по малому параметру  $1/\sqrt{K}$ . В результате приходим к континуальному аналогу уравнения (3) — SGE

$$-Ku'' + \sin u = 0. \quad (4)$$

Его решение, удовлетворяющее граничным условиям  $u(-\infty) = 0$ ,  $u(\infty) = 2\pi$ ,  $u'(-\infty) = 0$ ,  $u'(\infty) = 0$ , соответствующее кинку, имеет вид

$$u(x) = U_0 \equiv 4 \arctg \left[ \exp \left( \frac{x - x_0}{\sqrt{K}} \right) \right], \quad (5)$$

где  $x_0$  определяет произвольное положение центра кинка.

Дискретность системы приводит к зависимости энергии кинка от его положения, т.е. значения константы  $x_0$  [15]

$$E \cong 8\sqrt{K} + \frac{1}{2}\Delta_P \cos(2\pi x_0), \quad (6)$$

где первое слагаемое описывает энергию кинка в нулевом приближении по малому параметру  $1/\sqrt{K}$ , а второе

слагаемое представляет собой дополнительный периодический потенциал, названный потенциалом Пайерлса. При  $x_0 = 0$  кинк обладает максимальной энергией, тогда как при  $x_0 = 1/2$  — минимальной. Величина  $\Delta_P$  характеризует разность между максимальной и минимальной энергиями кинка и собственно есть БП.

В первом шаге теории возмущений величина БП была получена Инденбомом [15]

$$\Delta_{P,I} = 64\pi^2 K \exp(-\pi^2 \sqrt{K}). \quad (7)$$

Интересно сравнить аналитический результат Инденбома  $\Delta_{P,I}$  и данные численных расчетов  $\Delta_{P,num}$ . При  $K = 10$  имеем

$$\Delta_{P,I} = 1.762 \cdot 10^{-10}, \quad \Delta_{P,num} = 1.747 \cdot 10^{-10}.$$

Как видно из приведенных данных, формула (7) дает достаточно точное выражение для величины БП. При вычислении максимальной и минимальной энергий кинка для того же значения  $K = 10$  оказывается, однако, что погрешность самой энергии кинка, задаваемой выражениями (6), (7), имеет порядок  $10^{-2}$ , что во много раз больше БП.

Возникшая проблема может быть изучена путем подсчета следующей поправки к энергии кинка и соответственно к БП. Для этого необходимо воспользоваться более точными уравнениями движения в континуальном приближении, т.е. оставить в них члены более высокого порядка малости по  $1/\sqrt{K}$  при переходе к континуальному пределу в уравнении движения дискретной цепочки (3). Стандартная процедура, основанная на замене смещений соседних атомов на производные по координате от функции  $u(x)$ , имеет существенный недостаток: в каждом последующем шаге теории возмущений надо оставлять производные большего порядка. Это приводит к необходимости искать дополнительные граничные условия, которые в изначальной дискретной задаче, вообще говоря, отсутствуют. В данной работе были использованы два различных асимптотических метода, разработанные в работах [1,2]. Оба метода лишены указанного выше недостатка и приводят к одному и тому же решению для функции  $u(x)$  с точностью до членов второго порядка по малому параметру  $1/\sqrt{K}$

$$u(x) = U_0(x) + U_1(x), \quad (8)$$

где  $U_0(x)$  — решение, полученное в основном порядке теории возмущений (см. (5)), а функция  $U_1(x)$  имеет вид

$$U_1(x) = \frac{3\text{th}[(x - x_0)/\sqrt{K}] - (x - x_0)/\sqrt{K}}{12K \text{ch}[(x - x_0)/\sqrt{K}]}. \quad (9)$$

Используя решение (8), (9) из [1,2], можно вычислить энергию кинка с точностью до  $1/K$

$$E = 8\sqrt{K} \left( 1 - \frac{1}{72K} \right) + \frac{1}{2}\Delta_P \cos 2\pi x_0, \quad (10)$$

где

$$\Delta_P = \left[ \left( 64\pi^2 + \frac{32\pi^4}{9} \right) K - \frac{8}{3}\pi^3\sqrt{K} + \frac{16\pi^2}{9} \right] \times \exp(-\pi^2\sqrt{K}). \quad (11)$$

При  $K = 10$  выражения (10), (11) дают более точные значения для энергии кинка по сравнению с выражением (6), и погрешность вычисления энергии кинка имеет теперь порядок  $10^{-4}$ . Это оправдывает использование методов теории возмущений в приведенной модели для получения энергии кинка. Однако для БП результат не стал ближе к численному

$$\Delta_P = 9.33611 \cdot 10^{-10}.$$

Более того, он даже ухудшился, т.е. его точность стала меньше, чем точность предыдущего шага теории возмущений по сравнению с точным результатом численного расчета. Как видно из формул (7), (11), величины БП на двух последовательных шагах теории возмущений различаются уже в основном порядке по параметру  $1/\sqrt{K}$ . Это противоречит основным предпосылкам теории возмущений. Ранее в работах [2,3] предсказывалось, что все порядки теории возмущений вносят одинаковый вклад в величину БП. Наши результаты подтверждают это.

На рисунке приведена зависимость минимальной энергии кинка от коэффициента  $K$ . Сплошная линия соответствует численным значениям, штриховые линии — значениям, задаваемым формулами (10), (11). Как видно из вставки на рисунке, при значениях  $K \leq 0.3$  данные численного расчета и аналитические результаты, следующие из формул (10), (11), начинают расходиться.

### 3. Предел слабой межатомной связи ( $K \ll 1$ )

В пределе слабой межатомной связи ( $K \ll 1$ ) кинк становится узким и существенно дискретным. Фактически лишь несколько атомов, лежащих вблизи центра кинка, имеют отличные от 0 или  $2\pi$  смещения из положения равновесия. В этом случае удобно вернуться к ранее введенным переменным  $v_n$

$$\begin{aligned} v_n &= u_n, & n \leq 0, \\ v_n &= 2\pi - u_n, & n > 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Считая смещения из положения равновесия  $v_n$  малыми, на первом шаге линеаризуем систему уравнений (3)

$$(2K + 1)v_n - K(v_{n-1} + v_{n+1}) = 0. \quad (13)$$

В отличие от предыдущего предельного случая (сильной межатомной связи) здесь мы пренебрегаем нелинейностью, но зато сохраняем начальную дискретность задачи. Общее решение системы (13) имеет вид

$$v_n = A_1 \lambda_1^n(K) + A_2 \lambda_2^n(K), \quad (14)$$

коэффициенты  $A_1$  и  $A_2$  являются произвольными, а функции  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  задаются соотношениями

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 1 + \frac{1}{2K} + \sqrt{\frac{1}{K} + \frac{1}{4K^2}} \cong \frac{1}{K}, \\ \lambda_2 &= 1 + \frac{1}{2K} - \sqrt{\frac{1}{K} + \frac{1}{4K^2}} \cong K. \end{aligned} \quad (15)$$

Для ограниченности решения на бесконечности необходимо выбрать  $A_2 = 0$  при  $n > 0$  и  $A_1 = 0$  при  $n < 0$ . Возвращаясь к исходным переменным  $u_n$ , получим приближенное решение системы уравнений (3) при  $K \ll 1$  в виде

$$\begin{aligned} u_n &= 2\pi - A\lambda_2^n, & n > 0, \\ u_n &= B\lambda_1^n, & n < 0, \end{aligned} \quad (16)$$

коэффициенты  $A$  и  $B$  определяются конкретной конфигурацией кинка, т.е. положением его центра, а также условием сшивки при  $n = 0$ . Для кинка с максимальной энергией (центр кинка находится на частице с номером  $n = 0$ ) эти коэффициенты равны  $A = B = \pi$ , а для кинка с минимальной энергией (центр кинка лежит между частицами с  $n = 0$  и 1) имеем  $A = 2\pi/(1 + \lambda_2)$ ,  $B = 2\pi\lambda_2/(1 + \lambda_2)$ .

Найденные решения позволяют определить максимальную и минимальную энергии кинка в пределе  $K \ll 1$

$$\begin{aligned} E_{\max} &= 2 + \frac{\pi^2}{2} \left[ \frac{K(1 - \lambda_2)^2 + \lambda_2^2}{1 - \lambda_2^2} + \frac{K(1 - \lambda_1)^2 + 1}{\lambda_1^2 - 1} \right], \quad (17) \\ E_{\min} &= \frac{\pi^2 \lambda_2^2}{(1 + \lambda_2)^2} \left[ \frac{K(1 - \lambda_2)^2 + \lambda_2^2}{(1 - \lambda_2^2)\lambda_2^2} + \frac{K(1 - \lambda_1)^2 + \lambda_1^2}{\lambda_1^2 - 1} \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

При малых  $K$  приближенные значения для  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  равны  $\lambda_1 \cong K^{-1}$ ,  $\lambda_2 \cong K$ . С учетом этого выражения (17), (18) упрощаются

$$E_{\max} = 2 + \frac{\pi^2 K(1 - K + K^2)}{1 - K^2}, \quad (19)$$

$$E_{\min} = \frac{2\pi^2 K(1 + 2K^2 - 2K^3 + K^4)}{(1 + K)^2(1 - K^2)}. \quad (20)$$

Сравнение энергий  $E_{\max}$  и  $E_{\min}$ , получаемых из формул (19), (20), с численными расчетами дает при  $K = 0.05$  следующие результаты:

$$\Delta E_{\max} = E_{\max} - E_{\max, \text{num}} \cong 2.5 \cdot 10^{-4}, \quad (21)$$

$$\Delta E_{\min} = E_{\min} - E_{\min, \text{num}} \cong 1.2 \cdot 10^{-3}.$$

Следующим шагом теории возмущений может являться разложение нелинейного члена  $\sin u_n$  в уравнении (3) до кубических членов по малым смещениям. В данной

работе используется другой метод, основанный на сочетании точных решений нелинейных дискретных уравнений (3) в центре кинка с решениями (16) на его хвостях. Новые значения констант  $A$  и  $B$  в (16) определяются из условий сшивки с решением нелинейных уравнений в центре кинка и зависят от числа частиц, смещения которых считаются точно.

Точный учет смещений трех центральных частиц в случае, когда кинк обладает максимальной энергией (центр кинка лежит на частице с номером  $n = 0$ ), приводит к следующим выражениям для коэффициентов  $A$  и  $B$  в решении (16):  $A = B = A(K)$ , где функция  $A(K)$  задается трансцендентным уравнением

$$K(\pi - 2AK + AK^2) - \sin(AK) = 0. \quad (22)$$

При этом приближенное решение системы (3) в пределе малых  $K$  для кинка с максимальной энергией приобретает вид

$$\begin{aligned} u_n &= 2\pi - A(K)K^n, & n > 0, \\ u_n &= \pi, & n = 0, \\ u_n &= A(K) \left(\frac{1}{K}\right)^n, & n < 0. \end{aligned} \quad (23)$$

С учетом малости  $K$  из (22) имеем  $A(K) \cong 2\pi/(1 + 2K)$ .

Выражение для максимальной энергии кинка с точным учетом смещений центральных частиц имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} E_{\max}^* &= 2 + \frac{A^2 K^3 (1 - K + K^2)}{1 - K^2} \\ &+ K(\pi - AK)^2 + 2[1 - \cos(AK)]. \end{aligned} \quad (24)$$

При  $K = 0.05$  отличие полученной из (24) максимальной энергии от ее численного значения составляет

$$\Delta E_{\max}^* = E_{\max}^* - E_{\max, \text{num}} \cong 4.5 \cdot 10^{-7}. \quad (25)$$

Аналогичным образом получаем более точное решение системы (3) для кинка, обладающего минимальной энергией (центр кинка находится между нулевой и первой частицами, смещения которых мы определяем точно),

$$\begin{aligned} u_n &= 2\pi - B(K)K^n, & n > 0, \\ u_n &= B(K) \left(\frac{1}{K}\right)^{n-1}, & n \leq 0, \end{aligned} \quad (26)$$

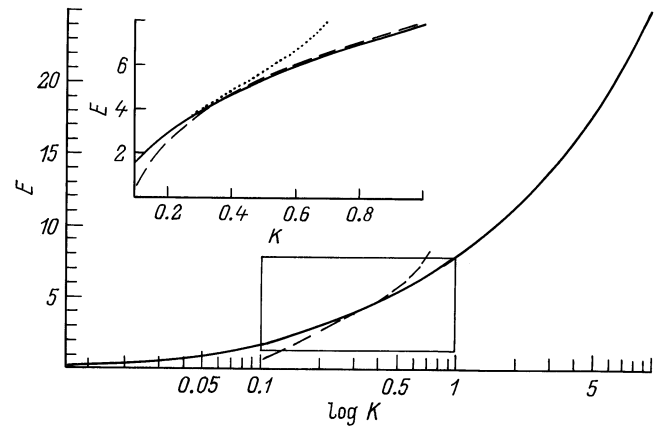
$B(K)$  определяется уравнением

$$K(2\pi - 3BK + BK^2) - \sin(BK) = 0. \quad (27)$$

Приближенное выражение для  $B(K)$  имеет вид  $B(K) \cong 2\pi/(1 + 3K)$ .

Минимальная энергия кинка определяется формулой

$$\begin{aligned} E_{\min}^* &= \frac{B^2 K^3 (1 - K + K^2)}{1 - K^2} + 2[1 - \cos(BK)] \\ &+ 2K(\pi - BK)^2. \end{aligned} \quad (28)$$



Зависимость минимальной энергии кинка от соотношения энергии межчастичного взаимодействия и энергии взаимодействия с подложкой ( $K = \alpha/U_0$ ). Сплошная линия соответствует численным расчетам, штриховые линии — аналитическому выражению, полученному в пределе сильной межатомной связи (10), (11), пунктирные линии — аналитическому выражению, полученному в пределе слабой межатомной связи (28).

При  $K = 0.05$  получаем следующее значение для  $\Delta E_{\min}^* = E_{\min}^* - E_{\min, \text{num}}$ :

$$\Delta E_{\min}^* = E_{\min}^* - E_{\min, \text{num}} \cong 3.1 \cdot 10^{-9}. \quad (29)$$

Сравнение результатов для  $\Delta E$  (21) и (25), (29) показывает, что предложенная методика вычисления энергии кинка в пределе слабой межатомной связи существенно повышает точность аналитического подхода.

На рисунке пунктирными линиями изображена зависимость минимальной энергии кинка от коэффициента  $K$ , задаваемого соотношением (28). Как видно из приведенных графиков, совокупность формул (10), (11), (24), (28), полученных в пределах больших и малых  $K$ , дает достаточно точное выражение для энергии кинка во всем диапазоне значений коэффициента соотношения энергии межчастичного взаимодействия в цепочке и энергии взаимодействия с подложкой.

Следует отметить, что погрешность подсчета энергии кинка при использовании описанного выше метода определяется погрешностью подсчета смещений хвостовых (нецентральных) частиц. Для дальнейшего увеличения точности подсчета энергии необходимо либо увеличивать число частиц, смещения которых мы определяем точно, либо увеличивать точность подсчета остальных частиц.

Итак, рассмотрена модель Френкеля–Конторовой в пределах сильной и слабой межатомной связи. В континуальном пределе во втором порядке теории возмущений вычислены энергии кинка и барьера Пайерлса. В дискретном пределе предложен новый метод получения решения, состоящий в точном учете нелинейности взаимодействия небольшого числа частиц в ядре кинка и решении линеаризованных уравнений вне его. Сравнение аналитических результатов с численными показывает,

что полученные выражения для энергии кинка как в случае сильной, так и в случае слабой межатомной связи дают достаточно точные результаты. В то же время анализ выражения для БП в пределе сильной межатомной связи продемонстрировал сильное расхождение с численными расчетами. Это объясняется тем фактом, что БП в данном пределе, как видно из формул (7) и (11), является экспоненциально малой величиной и для ее оценки необходимо учитывать все члены разложения теории возмущений.

## Список литературы

- [1] P. Rosenau. Phys. Lett. **A118**, 5, 222 (1986).
- [2] S. Flach, K. Kladko. Phys. Rev. **E54**, 3, 2912 (1996).
- [3] S. Flach, C.R. Willis. Phys. Rev. **E47**, 6, 4447 (1993).
- [4] Y. Ishimory, T. Munakata. J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 10, 31 367 (1982).
- [5] M. Peyrard, M.D. Kruskal. Physica **D14**, 1, 88 (1984).
- [6] T. Munakata. Phys. Rev. **A45**, 2, 1230 (1992).
- [7] J.M. Speight, R.S. Ward. Nonlinearity **7**, 2, 475 (1994).
- [8] R. Boesch, C.R. Willis, M. El-Batanouny. Phys. Rev. **B40**, 4, 2284 (1989).
- [9] E. Majernikova, G. Drobny. Phys. Rev. **E47**, 5, 3677 (1993).
- [10] Я.И. Френкель, Т.А. Конторова. ЖЭТФ **8**, 12, 1340 (1938).
- [11] I.R. Sagdeev, V.M. Vinokur. J. Phys. **48**, 9, 1395 (1987).
- [12] N. Flytzanis, S. Crowley, V. Celli. Phys. Rev. Lett. **39**, 14, 891 (1977).
- [13] А.М. Косевич, А.С. Ковалев. Теория динамических краудинонов. Радиационные и другие эффекты в твердых телах. Тбилиси (1973); Материалы школы по радиационным и другим дефектам в твердых телах. Тбилиси (1974). Т. 1. С. 186.
- [14] М. Абловиц, Х. Сигур. Солитоны и метод обратной задачи. Мир, М. (1987). 480 с.
- [15] В.Л. Инденбом. Кристаллография **3**, 2, 195 (1958).