

14,15

Образование пар кинков в обобщенной модели Лоте—Хирта

© Б.В. Петухов

Федеральное государственное бюджетное учреждение
„Национальный исследовательский центр „Курчатовский институт“,
Москва, Россия

E-mail: petukhov@crys.ras.ru

Поступила в Редакцию 13 октября 2024 г.

В окончательной редакции 1 февраля 2025 г.

Принята к публикации 2 февраля 2025 г.

Кинетика образования пар кинков на дислокациях описана в рамках модели, промежуточной между моделью резких кинков и континуальной моделью упругой струны. Рассмотрены эффекты, к которым приводит дискретное строение кристаллических материалов. Теория основана на универсальной модели Френкеля—Конторовой и может быть применена к протяженным системам разнообразной природы.

Ключевые слова: дислокационные кинки в дискретной среде, барьеры Пайерлса, модель Френкеля—Конторовой, энергетический ландшафт.

DOI: 10.61011/FTT.2025.02.59996.261

1. Введение

Кинетика переходов многих протяженных линейных систем между вырожденными мультистабильными состояниями в потенциальных рельефах играет важную роль в многочисленных проблемах физики, химии, биологии и других наук: при движении ступеней на поверхности растущего кристалла, в биологических макромолекулах, нанопроволоках, при переключении намагниченности в спиновых цепочках и молекулярных магнетиках с цепочечной структурой и многих других аналогичных одномерных и квазиодномерных структурах [1–3]. Давнюю историю, в частности, имеет изучение перемещения дислокаций в периодическом потенциальном рельефе кристаллических решеток, называемом барьерами Пайерлса [4–6]. В связи с расширением круга перспективных в высокотемпературных приложениях и микроэлектронике материалов, характеризующихся высоким кристаллическим рельефом, изучение кинетики дислокаций в барьерах Пайерлса приобрело повышенную актуальность, и число соответствующих работ стремительно растет. Укажем для примера только некоторые [7–15], включающие обзоры.

Распад метастабильных состояний протяженных систем, в настоящей работе для определенности выбирается как прототип дислокация, происходит посредством флуктуационного образования зародышей энергетически предпочтительного состояния, превращающихся на последующих стадиях в пары кинков. Кинки представляют собой границы между различными состояниями или, иначе, доменами. Расчетам кинетики образования пар кинков посвящены многочисленные работы в различных подходах; ввиду их неисчислимости ссылки будут даваться в основном на монографии и обзоры. Популярен континуальный подход в описании кинков как топологических солитонов [16–20]. Стимулирующим

обстоятельством является возможность в ряде случаев получать точные аналитические описания характеристик кинков [21,22]. В то же время применительно к твердым телам континуальные подходы являются приближенными, в связи с дискретностью кристаллической решетки, и нуждаются в специальном обосновании. Зачастую это сводится к выбору специальной области параметров. Расширение области параметров достигается учетом влияния дискретности по теории возмущений в пределе, в котором его влияние невелико [23,24].

Имеются, однако, ситуации, когда влияние дискретности на свойства кинков значительно [25,26]. Например, кинки на дислокациях в полупроводниках типа кремния или германия, являющиеся предметом многолетних экспериментальных и теоретических исследований [27–31], имеют малую протяженность порядка периода кристаллической решетки и в полной мере ощущают ее дискретность. Наиболее очевидным эффектом дискретности среды является нарушение непрерывной трансляционной инвариантности. Энергия кинка периодически изменяется при его перемещении вдоль системы с периодом кристаллической решетки. Разность энергий в максимумах $E_{\max}$ и минимумах $E_{\min}$ рельефа для кинков $\Delta E_{\text{P2}} = E_{\max} - E_{\min}$ называется барьерами Пайерлса второго рода, в отличие от барьеров Пайерлса первого рода для дислокации в целом. Часто периодический энергетический потенциальный рельеф первого рода описывают, как будет делаться и в настоящей работе, с помощью гармонического закона $E_{\text{P}}(y) = E_0 \cos(2\pi y/h)$, где $E_0 = \sigma_{\text{P}} b h / 2\pi$ — характерная энергия на единицу длины дислокации; σ_{P} — напряжение Пайерлса, при превышении которого снимаются барьеры для перемещения дислокации; b — величина вектора Бюргерса; h — высота кинка, равная расстоянию между минимумами потенциального рельефа; y — координата в направлении смещения дислокации. В отсутствие внешней движущей

силы или при ее относительно небольшой величине кинки приобретают статическую конфигурацию, соответствующую минимуму энергии. Перемещение кинка возможно только в результате преодоления активационных барьеров с помощью тепловых или квантовых флуктуаций.

Имеется противоположная по отношению к континуальным моделям теория термоактивируемого движения дислокаций по кинковому механизму Лоте и Хирта [32]. В этой теории кинки рассматриваются как бесструктурные резкие границы областей системы, находящихся в различных состояниях, в частности, в различных долинах кристаллического рельефа. Модель Лоте и Хирта успешно использовалась для описания динамики дислокаций в полупроводниках типа кремния или германия [33]. В этой теории пренебрегается модификацией конфигураций кинков и барьеров для их миграции под действием движущей силы. В силу своей простоты эта теория послужила удобной отправной точкой для описания дополнительных эффектов, например, связанных с квантовым туннелированием [34] и влиянием точечных дефектов [35–38]. Однако отсутствие учета влияния на параметры кинков внешней нагрузки ограничивает применимость этого ультрадискретного подхода областью малых движущих сил, когда разность энергий между различными вырожденными состояниями мала. В более общем случае следует учитывать, что при приложении внешней движущей силы вырождение состояний снимается и потенциальный рельеф приобретает, как его часто называют для наглядности, вид наклоненной „стиральной доски“.

В непрерывной среде любой величины внешней силы достаточно, чтобы привести кинк в движение, но в дискретном случае это не так. При относительно небольших значениях внешней силы кинк несколько изменяет свою конфигурацию, но остается статичным в пределах минимума рельефа. Однако энергии максимума и минимума потенциального рельефа изменяются, разность между ними с ростом движущей силы уменьшается и при некотором критическом значении обращается в нуль. При большей движущей силе статические конфигурации кинков отсутствуют, и реализуется динамический режим. Таким образом, теория Лоте–Хирта требует обобщения как для учета зависимости активационных параметров от движущей силы, так и для описания перехода между статическим и динамическим поведением кинков. Развитию более общей теории, позволяющей более полно изучить энергетику кинков на различных стадиях процесса их образования, и посвящена настоящая работа.

2. Зарождение кинков

В модели Лоте и Хирта зародышем пары кинков считается отрезок дислокации, перешедший из первоначального протяженного вдоль кристаллографического направления минимума потенциального рельефа кри-

сталлической решетки в соседний минимум, ограниченный резкими перегибами (кинком и его близнецом антикинком). В однородном поле напряжений σ на единицу длины дислокации действует сила $F = \sigma b$. Энергия пары кинков записывается как $E_{\text{крНЛ}} = 2E_k - Fhx$, где E_k — энергия одиночного кинка или антикинка в отсутствие движущей силы, x — размер перешедшего отрезка. При достаточно низкой движущей силе размер существенных для термоактивируемых переходов зародышей велик и взаимодействием ограничивающих их кинка и антикинка пренебрегается. Пара кинков считается устойчивым образованием, если понижение энергии на размере пары превысит тепловую энергию $k_B T$, что имеет место при $x > k_B T / Fh$, и тепловым флуктуациям, могущим схлопнуть пару, то есть привести к аннигиляции кинков-близнецов, будет противостоять достаточный барьер. Теория Лоте и Хирта является, по существу, одномерной, учитывающей только одну степень свободы — координату кинка неизменной формы вдоль линии дислокации. Этого не достаточно, чтобы полностью описать зависимость активационных параметров от движущей силы.

Опишем образование кинков в усовершенствованной по сравнению с используемой в теории Лоте–Хирта моделью. Подходящим инструментом для описания энергетики дискретных кинков служит классическая модель Френкеля–Конторовой [39]. Эта модель рассматривает периодическую вдоль одного направления, например x , цепочку частиц или звеньев, называемых далее для краткости также „атомами“. Период обозначим как a . Атомы связаны между собой упругими силами и находятся в ортогональном направлении y в некотором потенциальном рельефе, называемом далее потенциалом подложки. В данной работе для иллюстративных расчетов в качестве потенциала подложки будет приниматься гармонический рельеф, деформированный однородным полем напряжений. Различные конфигурации цепочки задаются набором смещений атомов вдоль оси y — $\{y_n\}$, отсчитанных от основного состояния, находящегося в минимуме потенциала подложки.

Энергия цепочки при любой конфигурации атомов с использованием безразмерных параметров записывается в виде

$$E_{\text{FK}} = \sum_n \left[\frac{\beta}{2} (u_{n+1} - u_n)^2 + 1 - \cos(u_n) - Eu_n - E_m \right], \quad (1)$$

где n есть порядковый номер атомов вдоль цепочки, β задает масштаб упругого взаимодействия атомов, $u_n = 2\pi y_n / h$, y_n — смещение n -го атома из основного состояния цепочки, находящегося при $u_m = \arcsin(E)$ (m здесь обозначает минимум, не следует путать с порядковым номером), $1 - \cos(u_n) - Eu_n$ — это нормированный (как и E_{FK}) на характерную энергию $E_0 = \sigma_r a b h / 2\pi$ потенциал подложки, $E = \sigma / \sigma_r$ характеризует движущую силу, $E_m = 1 - \cos(u_m) - Eu_m$ есть

приходящаяся на один период также нормированная на E_0 энергия основного состояния.

Выражение (1) задает энергетический ландшафт в конфигурационном пространстве, размерность которого равна неограниченно большому числу атомов в цепочке. При $E < 1$ в этом ландшафте есть минимумы и максимумы; положения цепочки вдоль минимумов являются при $1 > E > 0$ метастабильными состояниями. Наибольший интерес представляют энергетически выгодные конфигурации цепочки, определяемые условиями экстремума

$$dE_{\text{FK}}/du_n = -\beta(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \sin(u_n) - E = 0. \quad (2)$$

При больших значениях $\beta > 1$, то есть большой жесткости связей, относительные смещения соседних атомов малы, и система уравнений (2) переходит в свой континуальный аналог, описывающий упругую струну:

$$\beta a^2 \cdot \frac{d^2 y}{dx^2} - \sin(u) + E = 0. \quad (3)$$

Параметр β связан с коэффициентом линейного натяжения струны κ соотношением $\beta = \kappa h / 2\pi \sigma_p b a^2$. В отсутствие движущей силы $E = 0$ уравнение (3) — это хорошо известное статическое уравнение синус-Гордона [40], имеющее точным решением кинк-солитон с энергией $E_k = 8\beta^{1/2}$. Уравнение (3) легко решается и при наличии движущей силы, что позволяет, в частности, рассчитывать перевальные конфигурации на вершине барьера для перехода системы между долинами потенциального рельефа [41]. Энергия такой конфигурации есть энергия активации пары кинков, равная

$$E_{\text{кр}} = 2 \int_{u_m}^{u_{\text{Max}}} \sqrt{2\beta[\cos(u_m) - \cos(u) + E(u_m - u)]} du, \quad (4)$$

где u_{Max} есть максимальное смещение в перевальной конфигурации, соответствующее границе положительности подынтегрального выражения в (4) и определяемое условием $\cos(u_m) - \cos(u_{\text{Max}}) + E(u_m - u_{\text{Max}}) = 0$. Формула (4) может быть аппроксимирована простой формулой $E_{\text{кр}} \approx 2E_k(1 - E)^{1/3}$. Аналитическое исследование асимптотической зависимости энергии активации (4) при больших значениях движущей силы проведено в работе [42].

Имеются многочисленные работы, приближенно описывающие дискретные кинки как возмущенные кинк-солитоны уравнения синус-Гордона [23,24]. Возмущение можно считать малым, когда протяженность кинка велика по сравнению с периодом цепочки. Когда же размер кинка сравним с периодом, дискретность ощущается в полной мере, и ее нельзя считать малым возмущением. В этом случае требуется другой подход к решению системы уравнений (2) и описанию конфигураций кинков. Такой эффективный и чрезвычайно наглядный подход, более гибкий, чем теория Лоте–Хирта, был предложен в работах [43–46] и использовался, в основном, для

изучения свойств и динамики индивидуальных кинков. В настоящей работе аналогичный подход будет применяться для описания кинетики зарождения пар кинков. В рамках этого подхода некоторое представление об устройстве энергетического ландшафта можно получить, изучая его проекции при произвольно заданных смещениях части атомов, а смещения остальных считая оптимально подстраивающимися под них с выполнением соотношений (2). Это позволяет эффективно понижать размерность конфигурационного пространства, рассматривая частично равновесные состояния цепочки. При малых значениях параметра β упругие связи атомов легко растяжимы, и относительные смещения атомов могут быть достаточно велики. Это приводит к тому, что перегиб между соседними долинами кристаллического рельефа растянет связи лишь между малым числом атомов. Как будет подтверждено дальнейшим расчетом, существенному смещению могут быть подвержены лишь один-два приграничных атома, а прочие смещены из основного состояния u_m или $u_m + 2\pi$ не слишком сильно и их равновесные положения легко рассчитываются по теории возмущений. Значительно смещаемые атомы будем называть активными центрами. Учет их смещений, меняющихся с изменением движущей силы, привнесит в модель структурность, отсутствующую в теории Лоте–Хирта и позволяющую выйти за рамки этой теории и рассмотреть дополнительные по сравнению с ней эффекты.

При большой энергии упругого взаимодействия атомов в кинке по сравнению с тепловой энергией $k_B T$ низкоэнергетические состояния цепочки содержат протяженные по сравнению с периодом прямолинейные участки, размещающиеся в минимумах потенциала подложки. Будут рассматриваться флуктуационно образующиеся конфигурации цепочки, имеющие в качестве исходного состояния такой прямолинейный участок. Мало смещенные из положений равновесия u_m или $u_m + 2\pi$ атомы находятся в окрестности, в которой потенциал подложки близок к квадратичному. Это дает возможность линеаризовать систему уравнений (2) относительно смещений $\delta u_n = u_n - \arcsin(E)$: $-\beta(\delta u_{n+1} + \delta u_{n-1} - \delta u_n) + (1 - E)^{1/2} \delta u_n = 0$. Ищем решение в виде $\delta u_n \propto B\lambda^n$; подстановка его в линеаризованные уравнения с учетом ограниченности при $n \rightarrow \infty$ дает

$$\lambda = 1/\left\{1 + (1 - E^2)^{1/2} 2\beta + [(1 - E^2)/4\beta^2 + (1 - E^2)^{1/2}/\beta]^{1/2}\right\}. \quad (5)$$

Кинки образуются парами, проходя через симметричные перевальные конфигурации, в которых далекими от равновесных будем считать только смещения атомов на границах зародыша. Благодаря симметрии, энергию пары кинков можно записать как удвоенную сумму по

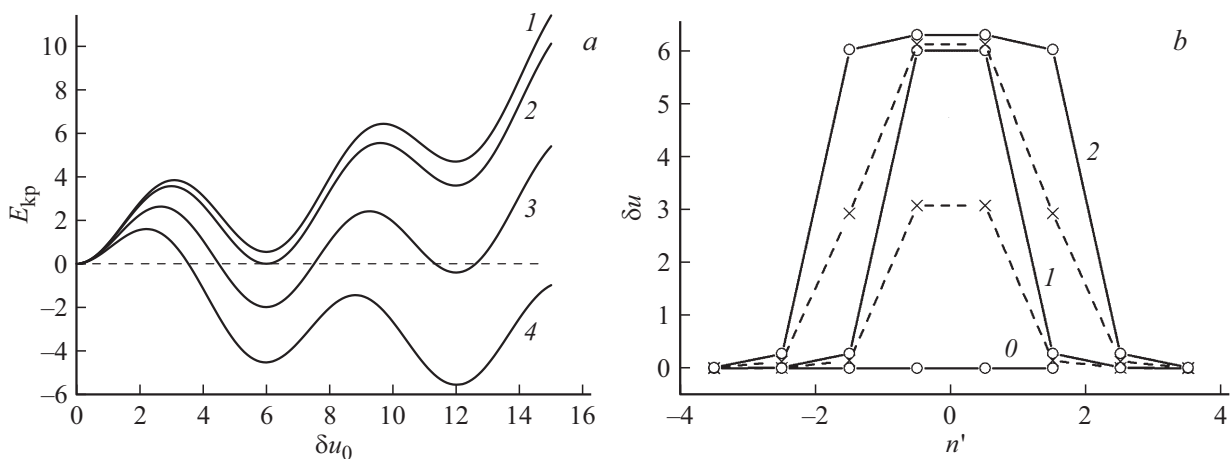


Рис. 1. а) Зависимость энергии пары кинков от положения активного атома при различных значениях движущей силы. Кривая 1 соответствует $E = 0.1$, 2 — $E = E_{cr} = 0.1428 \dots$, 3 — $E = 0.3$, 4 — $E = 0.5$. Параметр $\beta = 0.05$. б) Конфигурации цепочки в экстремальных точках энергетического ландшафта. Кругами отмечены смещения атомов в минимумах, крестиками — в точках перевала.

положительным номерам атомов:

$$E_{kp} = 2 \sum_{n=0}^N \left[\frac{\beta}{2} (\delta u_{n+1} - \delta u_n)^2 + (1 - E^2)^{1/2} - \cos(u_n) - E \delta u_n \right]. \quad (6)$$

В простейшем варианте считаем активным и точно рассматриваем только первый атом с номером 0, а остальные считаем находящимися в квадратичной окрестности потенциального рельефа и оптимально подстроенными под δu_0 . Подставляя значения их равновесных смещений $\delta u_n = \delta u_0 \lambda^n$ в (6), получаем приближенно

$$E_{kp} \approx \delta u_0^2 \left\{ \beta(1 - \lambda)^2 + (1 - E^2)^{1/2} \lambda^2 / (1 - \lambda^2) \right\} + 2(1 - E^2)^{1/2} [1 - \cos(\delta u_0)] - 2E \sin(\delta u_0) - 2E \delta u_0. \quad (7)$$

Выражение (7) дает приближенное одномерное представление энергетического рельефа, в котором эволюционирует зародыш пары кинков на первоначальном этапе его образования. Различный характер протекания начальной стадии и преодолеваемые барьеры в зависимости от величины движущей силы иллюстрирует рис. 1. На нем изображено изменение энергии пары кинков вдоль адиабатической траектории, на которой смещения всех остальных атомов цепочки подстроились под положение активного атома, для различных значений движущей силы E . Параметр жесткости упругих связей атомов есть $\beta = 0.05$. Энергия цепочки с парой кинков в первом минимуме выше энергии основного состояния при низком значении движущей силы $E < E_{cr} = 0.1428 \dots$ и ниже при более высоком значении $E > E_{cr}$. Во втором случае высота барьера для попадания в первый минимум и является энергией

активации пары кинков, т.к. возвращение в исходное состояние, то есть аннигиляция или, иначе, схлопывание кинков является маловероятным. В первом случае состояние в этом минимуме является лишь промежуточным, и для необратимого образования пары кинков требуется преодоление последующих барьеров до попадания в минимум с отрицательной энергией.

Результат расчета энергии E_{cr} для любых значений β может быть аппроксимирован путем подгонки формулой $E_{cr} \approx 2.2637\beta^{0.9}/(1 + 1.6\beta)$, как это демонстрируется на рис. 2.

После преодоления первого барьера и попадания в ближайший минимум возможна развилка с различными

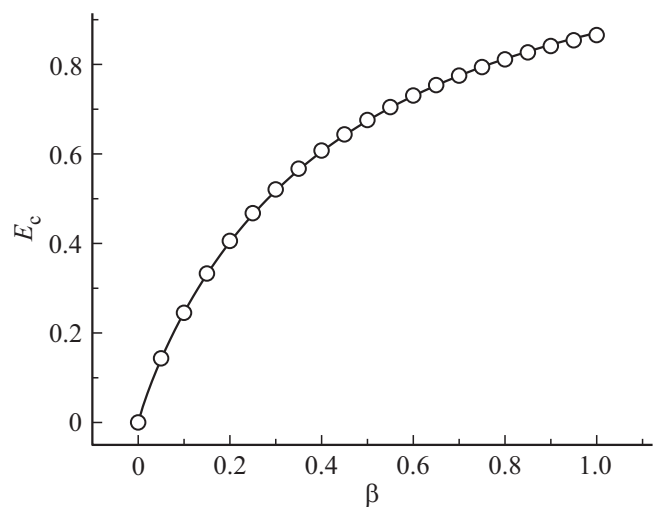


Рис. 2. Зависимость граничного значения движущей силы, отвечающего возникновению состояния цепочки с более низкой энергией, чем исходное, от параметра жесткости упругих связей β (кружки). Сплошная линия показывает результат подгонки аналитическим выражением $E_{cr} \approx 2.2637\beta^{0.9}/(1 + 1.6\beta)$.

вариантами дальнейшей эволюции. Для получения более полного представления о них полезно несколько обобщить расчет и рассматривать как активные два атома, включив в их число еще атом с номером 1. Атомы с большими номерами $n > 1$ считаем подстраивающимися под смещение атома 1 — δu_1 как $\delta u_n = \delta u_1 \lambda^{n-1}$. В этом случае бесконечномерный энергетический ландшафт (1) или (6) сводится к наглядному двумерному, являясь функцией двух переменных δu_0 и δu_1 .

Не выписывая в явном виде получающееся при этом очевидным образом из (1) аналитическое выражение, проиллюстрируем ситуацию наглядной картиной. Пример такого ландшафта при частном выборе параметров $\beta = 0.05$ и $E = 0.1$ показан на рис. 3 с помощью линий уровней энергии. Значения энергий, которым соответствуют изображенные линии уровня, определяются преимущественно высотами точек перевалов, через которые они проходят. Штриховыми линиями показаны адиабатические кривые, отвечающие при заданном значении δu_0 минимуму энергии по смещениям всех других атомов, включая атом 1, и описываемые вышеприведенным выражением (7). Наглядно геометрически такая линия представляет собой дно долины, идущей через перевал от одного минимума рельефа к другому. Минимумы отвечают стабильным или метастабильным состояниям цепочки, а разность значений энергии в точке перевала и минимуме дает высоту барьера для перехода из одного состояния в другое.

3. Начальная стадия распространения кинков, составляющих пару

При наличии внешней движущей силы все состояния цепочки являются метастабильными, и за счет тепловых флуктуаций происходит эволюция цепочки в направлении, диктуемом движущей силой, в состояния с более низкой энергией. В принципе, такая эволюция может происходить разнообразными путями через различные последовательные минимумы энергии. Однако резкая аррениусовская зависимость скорости переходов от высоты барьеров приводит к тому, что с подавляющей вероятностью переход произойдет через наиболее низкий перевал в рельефе. Так, в ситуации, изображенной на рис. 3, после первичного перехода в минимум с энергией 0.54 можно ожидать преимущественных переходов не в минимум с энергией 4.659 через перевал высотой 6.393, а в минимум — 0.712 через перевал 3.08.

Переход из первоначального состояния, отмеченного цифрой 0, в ближайший минимум энергии 0.54, конфигурация в котором отмечена цифрой 1, может считаться стадией инициации метастабильной пары кинков. Переход из этого состояния в минимум —0.712 через перевал высотой 3.08 представляет собой начало стадии расширения зародыша пары кинков, о чем еще будет идти речь далее.

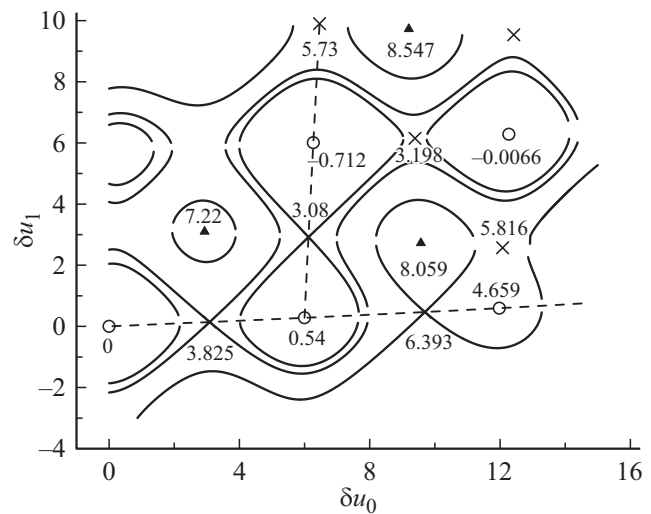


Рис. 3. Двумерный энергетический ландшафт в пространстве смещений первых атомов δu_0 и δu_1 при параметрах $\beta = 0.05$ и $E = 0.1$, показанный линиями постоянного уровня энергии. Кругами обозначены минимумы, треугольниками — максимумы рельефа, крестиками — точки перевала. Штриховыми линиями изображены долины рельефа, идущие от минимума к минимуму через перевалы.

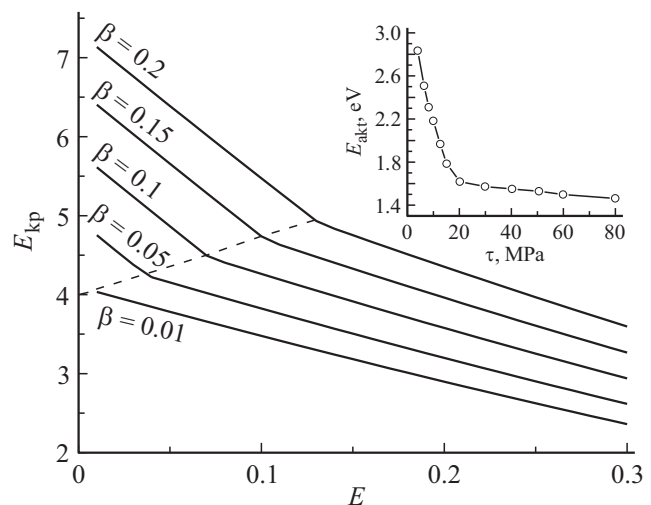


Рис. 4. Зависимость энергии активации пары кинков от движущей силы при различных значениях параметра β , указанных цифрами у кривых. При более высоких значениях движущей силы энергия активации определяется барьером для перехода из основного состояния в первый минимум потенциального рельефа, а при более низких значениях барьером для перехода из первого минимума во второй. На вставке показана для сравнения зависимость энергии активации движения дислокаций от напряжения в Ge [31].

Рис. 4 иллюстрирует зависимость энергии активации пары кинков от движущей силы при различных значениях параметра β . Эта зависимость в отличающихся областях значений движущей силы (по разные стороны от штриховой линии на рисунке) вдоль адиабатических

линий определяется различными переходами, в связи с чем имеет вид кривых с изломами. При более высоких значениях движущей силы энергия активации определяется барьером для перехода из основного состояния в первый минимум потенциального рельефа; при более низких значениях движущей силы энергия активации определяется барьером для перехода из первого минимума во второй. Как видно из рис. 4, барьер для образования пары кинков в широкой области существенно зависит от движущей силы, понижаясь с ее увеличением. На вставке для качественного сравнения показана зависимость от движущей силы энергии активации, найденная в измерениях скорости дислокаций в Ge [31].

4. Образование пар кинков различного размера

Чтобы описать следующие за инициацией этапы зарождения пар кинков, изучим энергии более широких зародышей, границы которых раздвинуты далее от центрального атома. Переходы к ним энергетически более выгодны, чем дальнейшее продвижение центрального атома, поскольку такому продвижению препятствуют однонаправленные силы натяжения со стороны двух соседних атомов. Смещению же границы препятствуют разнонаправленные и частично компенсирующие друг друга силы натяжения со стороны соседей. Таким образом, следует передать эстафету „активности“ атомам, соседним с центральным, а атом с номером 0 попадает в квадратичную окрестность второй долины потенциала подложки, и его смещение, подстраивающееся под смещение атома 1, легко найти и исключить из дальнейшего расчета: $\delta u_0 = 2\pi - \lambda(2\pi - \delta u_1)$. Получаем энергетический рельеф, иллюстрируемый рис. 5, зависящий теперь от координат δu_1 и δu_2 , исследование которого аналогично предыдущему, относящемуся к рис. 3, основанному на формуле (7). Основное изменение по сравнению с (7) дает разность энергий между второй и первой долинами подложки $-4\pi E$, вносимая смещением границ зародыша на один период цепочки.

Повторение шагов с расширением зародышей приводит к дальнейшему понижению энергии в минимумах в основном за счет вкладов растущего числа центральных атомов. Рассмотрим зародыши пар кинков, содержащие $2k_0$ центральных атомов, перешедших в окрестность второй долины потенциала подложки. Считаем активными атомы с номерами $k = \pm k_0$, на границах зародыша. Атомы внутри границ находятся в квадратичной окрестности верхнего минимума потенциала подложки и имеют смещения $\delta u_{k_0-1} = 2\pi - \lambda(2\pi - \delta u_{k_0})$, $\delta u_k = 2\pi - \lambda^{k_0-k}(2\pi - \delta u_{k_0})$, $\delta u_{k'} = \delta u'_{k_0} \cdot \lambda^{k_0-k}$. Штрих означает отсчет от дна верхней долины потенциала подложки. Атомы с номерами от $k_0 + 1$ до ∞ находятся в квадратичной окрестности нижнего минимума потенциала подложки и имеют смещения $\delta u_k = \delta u_{k_0} \lambda^{k-k_0}$.

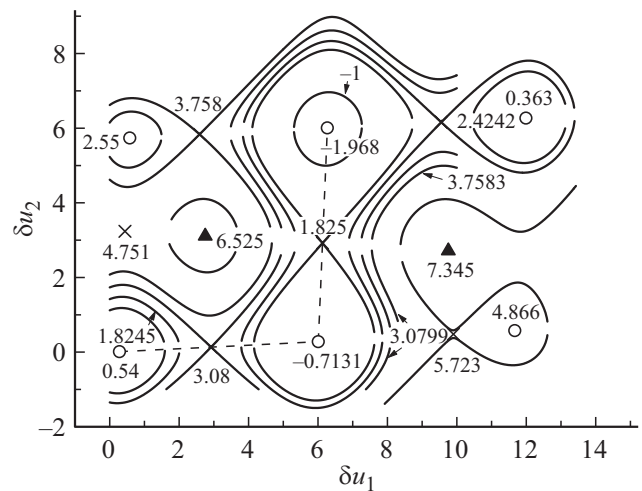


Рис. 5. Энергетический рельеф для следующей за инициацией стадией эволюции зародыша пары кинков при активных атомах с номерами 1 и 2. Параметры те же, что на рис. 3: $\beta = 0.05$ и $E = 0.1$.

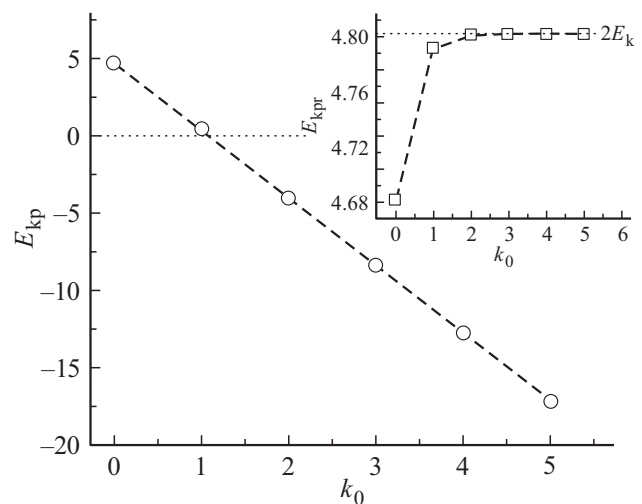


Рис. 6. Минимальные значения энергий зародышей пар кинков различного размера между границами $-k_0$ и k_0 . Значения параметров $\beta = 0.4$, $E = 0.35$. На вставке показаны приведенные значения без учета понижения энергии во второй долине потенциала подложки.

Энергия цепочки E_c получается добавлением к выражению (7) энергии центральных атомов:

$$E_c = 2 \sum_{n=0}^{k_0-1} \left[\frac{\beta}{2} (\delta u_{n+1} - \delta u_n)^2 + \cos(u_m) - \cos(u_n) - E \delta u_n \right] \\ = \beta u'_{k_0}{}^2 [\beta(1 - \lambda)^2 + (1 - E^2)^{1/2} \lambda^2] \\ \times \lambda^2 (1 - \lambda^{2k_0}) / (1 - \lambda^2) - 2\pi E k_0. \quad (9)$$

Получаемое выражение позволяет рассчитать оптимальные значения энергий зародышей различного размера в энергетическом рельефе, отвечающие более низким

барьерам для образования пары кинков. Рис. 6 иллюстрирует результаты такого расчета. Для выбранных параметров энергии зародышей с $k_0 = 0$ и 1 превышают энергию в основном состоянии и, следовательно, неустойчивы по отношению к схлопыванию. Зародыши с большим числом центральных атомов $k_0 > 2$ имеют более низкую энергию, чем основное состояние, и имеют тенденцию расширяться далее. Переходная область вокруг границы с увеличением размера зародыша быстро приобретает стандартную форму и энергию, как демонстрирует вставка к рис. 6, на которой показано изменение минимальной энергии зародыша за вычетом вклада центральной части $-4\pi k_0 E$. Остальную часть устанавливающейся энергии зародыша можно приписать двум кинкам, так что энергия достаточно широкого зародыша описывается выражением

$$E_{\text{кр}} = 2E_k - 2k_0\Delta E, \quad (10)$$

где $\Delta E = 2\pi E$ есть понижение энергии атома при его смещении между долинами потенциала подложки. Формула (10) есть аналог соответствующего выражения теории Лоте–Хирта с тем отличием, что форма кинка теперь не является совершенно резкой, т.к. описывается неоднородными смещениями активного и примыкающих атомов, меняющимися к тому же с изменением движущей силы, от которой зависит также величина энергии кинка.

5. Заключение

Бесконечномерная модель Френкеля–Конторовой, довольно сложная для количественного анализа ее динамики, радикально упрощается с использованием двух концепций. Первая из них — это использование частично равновесных состояний системы, когда произвольные положения в потенциальном рельефе занимает небольшое число атомов цепочки, а все остальные адиабатически подстраиваются под них. В результате бесконечномерный энергетический рельеф редуцируется к любой желаемой размерности. От числа используемых измерений зависит точность приближения, оправданного в целом при малой жесткости упругих связей звеньев цепочки. Вторая концепция — это выбор оптимальной последовательности переходов системы в конфигурационном пространстве. Такой выбор среди множества флуктуационно доступных путей становится практически однозначным при температурах или, точнее, тепловых энергиях $k_B T$, малых по сравнению с типичной высотой барьеров в энергетическом ландшафте. Хотя, вообще говоря, в области сравнительно больших значений движущей силы нельзя полностью исключать вероятность отклонений от основного сценария с переходами только в ближайшую долину потенциала подложки и примешивания некоторой доли более сложных переходов. Например, с образованием энергетически более затратных „многоэтажных“ кинков.

Применение этих двух концепций приводит к сравнительно простой модели, изложенной в работе, позволяющей расширить рамки теории Лоте и Хирта [4,32] и описать кинетику образования пар кинков в значительно более широкой области параметров, в которой имеет место существенная зависимость энергии активации от движущей силы. Кроме того, модель предсказывает изменение характера этой зависимости. Как показывает расчет, результаты которого иллюстрируются на рис. 3, в области относительно высоких значений движущей силы энергия активации определяется переходами из основного состояния системы в ближайший минимум энергетического рельефа. В области же более низких значений движущей силы энергия активации определяется начальной стадией расширения зародыша, границы которого в дальнейшем приобретают стандартную форму изолированных кинков. В результате зародыши достаточно больших размеров качественно соответствуют теории Лоте и Хирта, хотя и в видоизмененном и обобщенном виде, т.к. имеет место зависимость активационных параметров от движущей силы. Эта зависимость с повышением жесткости упругих связей звеньев системы и вовлечением в образование пар кинков большего числа звеньев сглаживается и переходит к континуальному пределу (4). Таким образом, предложенная теория заполняет пробел в представлениях о кинетике зарождения пар кинков, перекидывая мост между моделью резких доменных стенок Лоте и Хирта и континуальной моделью упругой струны.

Изменение контролирующего процесс образования пары кинков перехода в различных областях значений движущей силы приводит к излому на зависимости энергии активации от движущей силы, иллюстрируемому рис. 4. Качественно подобный излом наблюдался в экспериментах по измерению скоростей движения дислокаций в Ge [31], что отражено на вставке к рис. 3, и в других полупроводниковых материалах [47–49].

Экспериментальные данные по непосредственным измерениям скоростей дислокаций и по извлекаемым из макроскопических механических испытаний материалов с кинковым механизмом пластической деформации активационным параметрам демонстрируют большое разнообразие. В металлах с объемно-центрированной кубической кристаллической решеткой со сравнительно невысоким напряжением Пайерлса по отношению к модулю сдвига имеет место плавная зависимость энергии активации от нагрузки, описываемая выражением (4), хотя и нередко возмущаемая наличием других дефектов. В материалах, характеризующихся высокими напряжениями Пайерлса, в т.ч. полупроводниках с ковалентными связями между атомами, зависимость энергии активации от внешней нагрузки нередко отсутствует в определенных интервалах ее изменения в соответствии с теорией Лоте и Хирта. Однако в более широких интервалах изменения напряжения имеют место отклонения от предсказаний этой теории, например в Ge, InP и других

полупроводниках и материалах с промежуточными типами химических связей атомов [27–31, 47–49]. Энергии активации оказываются различными в интервалах относительно более высоких и более низких напряжений, что находится в качественном согласии с результатами настоящей работы.

Финансирование работы

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ „Курчатовский институт“.

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] One-Dimensional Nanostructures / Ed. Z.M. Wang. Springer, Science+Business Media, N.Y. (2008).
- [2] А.С. Давыдов. Успехи физических наук **138**, 12, 603 (1982).
- [3] M. Remoissenet. Waves Called Solitons: Concepts and Experiments. Springer, Berlin. (1994).
- [4] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 598 с. [J.P. Hirth, J. Lothe. Theory of Dislocations. McGraw-Hill (1967).]
- [5] U. Messerschmidt. Dislocation dynamics during plastic deformation / Ed. R. Hull. Berlin. Springer Science & Business Media, Heidelberg (2010).
- [6] Б.В. Петухов. Динамика дислокаций в кристаллическом рельефе. Дислокационные кинки и пластичность кристаллических материалов. Saarbrücken: Lambert Academic Publishing. (2016). 385 с.
- [7] C.R. Weinberger, G.J. Tucker, S.M. Foiles. Phys. Rev. B **87**, 5, 054114 (2013).
- [8] S.P. Fitzgerald. Sci. Rep. **6**, 1, 39708 (2016). <https://doi.org/10.1038/srep39708>
- [9] L. Dezerald, L. Proville, L. Ventelon, F. Willaime, D. Rodney. Phys. Rev. B **91**, 9, 094105 (2015). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.094105>
- [10] F. Maresca, W.A. Curtin. Acta Materialia **182**, 144 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.10.007>
- [11] A. Ghafarollahi, W. Curtin. Acta Materialia **215**, 117078 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117078>
- [12] I.H. Kim, H.S. Oh, S.J. Kim, E.S. Park. J. Alloys. Compounds **886**, 161320 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.161320>
- [13] E.P. George, D. Raabe, R.O. Ritchie. Nature Rev. Mater. **4**, 8, 515 (2019).
- [14] Y. Tang, R. Wang, B. Xiao, Z. Zhang, S. Li, J. Qiao, S. Bai, Y. Zhang, P.K. Liaw. Progr. Mater. Sci. **135**, 101090 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2023.101090>
- [15] I.J. Beyerlein, P. Cao, T.M. Pollock. Mater. Res. Soc. Bull. **48**, 7, 746 (2023). <https://doi.org/10.1557/s43577-023-00567-8>
- [16] Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, Х. Моррис. Солитоны и нелинейные волновые уравнения. Мир, М. (1988). 694 с. [R.K. Dodd, J.C. Eilbeck, J.D. Gibbon, H.C. Morris. Solitons and Nonlinear Wave Equations. Academic Press Inc. (1982).]
- [17] Y.S. Kivshar, B.A. Malomed. Rev. Mod. Phys. **61**, 4, 763 (1989).
- [18] A.R. Bishop, J.A. Krumhansl, S.E. Trullinger. Physica D **1**, 1, 1 (1980).
- [19] A. Scott. Nonlinear Science: Emergence and Dynamics of Coherent Structures. Oxford University Press, Oxford (2003).
- [20] T. Vachaspati. Kinks and Domain Walls. An Introduction to Classical and Quantum Solitons. Cambridge University Press, Cambridge, N.Y., Melbourne, Madrid, Cape Town, Singapore, São Paulo (2006).
- [21] The sine-Gordon Model and its Applications / Eds J. Cuevas-Maraver, P.G. Kevrekidis, F. Williams. Springer, Switzerland (2014).
- [22] В.Е. Захаров, С.В. Манаков, С.П. Новиков, Л.П. Питаевский. Теория солитонов: Метод обратной задачи. Наука, М. (1980). 319 с.
- [23] M.G. Clerc, R.G. Elías, R.G. Rojas. Philos. Trans. R. Soc. A **369**, 1935, 412 (2011).
- [24] M.J. Ablowitz, Z.H. Musslimani, G. Biondini. Phys. Rev. E **65**, 2, 026602 (2002).
- [25] D. Hennig, G.P. Tsironis. Phys. Rep. **307**, 5–6, 333 (1999).
- [26] M. Peyrard, M.D. Kruskal. Physica D **14**, 1, 88 (1984).
- [27] H. v. Schaumburg. Philos. Mag. **25**, 6, 1429 (1972).
- [28] В.И. Никитенко, Б.Я. Фарбер, Ю.Л. Иунин. ЖЭТФ **93**, 4, 1304 (1987). [V.I. Nikitenko, B.Ya. Farber, Yu.L. Iunin. JETP **66**, 4, 738 (1987).]
- [29] Yu.L. Iunin, V.I. Nikitenko. Scripta Materialia **45**, 11, 1239 (2001).
- [30] I. Yonenaga. Mater. Trans. **46**, 9, 1979 (2005).
- [31] C. Claeys, E. Simoen. Fundamentals and Technological Aspects of Extended Defects in Germanium. Springer, Berlin, Heidelberg (2009). https://doi.org/10.1007/978-3-540-85614-6_1
- [32] J. Lothe, J.P. Hirth. Phys. Rev. **115**, 3, 543 (1959).
- [33] A. George, J. Rabier. Revue Physique Appliquée **22**, 9, 941 (1987).
- [34] Б.В. Петухов, В.Л. Покровский. Письма в ЖЭТФ **15**, 1, 63 (1972). [B.V. Petukhov, V.L. Pokrovskii. JETP Lett. **15**, 1, 44 (1972).]
- [35] T. Ninomiya, R. Thomson, F. Garcia-Moliner. J. Appl. Phys. **35**, 12, 3607 (1964).
- [36] В.В. Рыбин, А.Н. Орлов. ФТТ **11**, 11, 3251 (1969).
- [37] Б.В. Петухов. ФТТ **35**, 5, 1121 (1993). [B.V. Petukhov. Sov. Phys. Solid State **35**, 5, 571 (1993).]
- [38] Б.В. Петухов. ФТТ **66**, 3, 473 (2024). [B.V. Petukhov. Phys. Solid State **66**, 3, 458 (2024).]
- [39] О.М. Браун, Ю.С. Кившарь. Модель Френкеля–Конторовой. Концепции, методы и приложения. Springer (2008). 322 с. [O.M. Braun, Y.S. Kivshar. The Frenkel–Kontorova Model: Concepts, Methods, and Applications. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg (2004).]
- [40] The sine-Gordon Model and its Applications / Eds J. Cuevas-Maraver, P.G. Kevrekidis, F. Williams. Springer, Switzerland (2014). <https://doi.org/10.1007/978-3-319-06722-3>
- [41] П. Гийо, Дж. Дорн. Критический обзор пайерлсовского механизма деформации. В кн.: Актуальные вопросы теории дислокаций. Мир, М. (1968). С. 270–310 [P. Guyot, J.E. Dorn. Canadian J. Phys. **45**, 2, 983 (1967).]

- [42] Б.В. Петухов, В.Л. Покровский. ЖЭТФ **63**, 2, 634 (1972).
[B.V. Petukhov, V.L. Pokrovskii. JETP **36**, 2, 336 (1972).]
- [43] S. Flach, K. Kladko. Phys. Rev. E **54**, 3, 2912 (1996).
- [44] K. Kladko, I. Mitkov, A.R. Bishop. Phys. Rev. Lett. **84**, 19, 4505 (2000).
- [45] I. Mitkov, K. Kladko, A.R. Bishop. Phys. Rev. E **61**, 2, 1106 (2000).
- [46] О.В. Усатенко, А.В. Горбач, А.С. Ковалев. ФТТ **43**, 7, 1202 (2001). [O.V. Usatenko, A.V. Gorbach, A.S. Kovalev. Phys. Solid State **43**, 7, 1247 (2001).]
- [47] J.R. Patel, P.E. Freeland. J. Appl. Phys. **42**, 9, 3298 (1971).
- [48] Б.Я. Фарбер, И.Е. Бондаренко, В.И. Никитенко. ФТТ **23**, 7, 2192 (1981).
- [49] P. Gall, J.P. Peyrade, R. Coquillé, F. Reynaud, S. Gabillet, A. Albacete. Acta Metallurgica **35**, 1, 143 (1987).

Редактор Е.В. Толстякова