Письма в ЖЭТФ, том 15, вып 1, стр. 63 – 66 *5 января 1972 г.*

ТУННЕЛИРОВАНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ

Б.В. Петухов, В.Л. Покровский

Как известно, движение дислокаций в плоскости скольжения через барьеры Пайерлса происходит путем образования и дальнейшего расширения двойных перегибов. При достаточно низких иемпературах такое явление носит характер квантового подбарьерного проникновения (туннелирования). Целью данной работы является вычисление времени туннельного образования двойного перегиба.

Мы принимаем простейшую модель дислокации как струны в периодическом потенциальном поле $U_0(y)$ (рельеф Пайерлса). Пусть первоначально струна покоится на дне одной из долин (нулевые колебания считаются малыми). В поле постоянного внешнего напряжения F такое положение становится неустойчивым, и струна за конечное среднее время перейдет в соседнюю долину. В дальнейшем будет рассматриваться потенциальный рельеф $U(y) = U_0(y) - Fy$ только для двух соседних долин. Гамильтониан струны имеет вид

$$H = \int \frac{\rho}{2}\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)^2 dx + V\{y\}; \quad V\{y\} = \int\left[\frac{\kappa}{2}\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^2 + U(y)\right] dx. \quad (1)$$

Рассматривается движение только в плоскости скольжения, координата x направлена вдоль долины, координата y – поперек, ρ – плотность струны, κ – ее жесткость.

Квантовая струна описывается волновой функцией $\Psi\{y\}$, являющейся функционалом от $y(x)$. Решение квантовомеханической задачи в общем виде не представляется возможным. Однако в рассматриваемом нами случае, когда высота барьера U_0 велика по сравнению с энергией нулевых колебаний, справедливо квазиклассическое приближение. Для вычисления вероятности перехода w необходимо найти траекторию $y(x, t)$, осуществляющую данный переход, вдоль которой классическое действие чисто мнимое и минимально по модулю. Вероятность перехода $w \sim \exp\{2i S/\hbar\}$. (Здесь и в дальнейшем мы отвлекаемся от несущественных для нас предэкспоненциальных множителей). Решение задачи мы получим в двух предельных случаях

1. Малые напряжения $F << F_p$ (F_p – напряжение Пайерлса, равное $max\,(dU_0/dy)$). В этом случае главный вклад в действие дают широкие двойные перегибы, которые имеют практически стандартную форму, отличаясь только длиной ℓ. При достаточно больших ℓ потенциальную энергию двойного перегиба $U(\ell)$ можно записать в виде

$$V(\ell) = V_0 - Fa\ell \quad (2)$$

(a – расстояние между долинами).

Формула (2) допускает наглядное толкование. Естественно считать участки дислокации, находящиеся в разных долинах, разными "фазами", линейные энергии которых отличаются на величину Fa. Энергия границ между "фазами" равны $V_0/2$. Такой подход для случая термических флуктуаций был развит в работах [1, 2], а для квантового образования зародышей в жидкости – в работе [3]. Наиболее близка наша работа по духу работе [4].

Можно также показать, что кинетическая энергия связана главным образом с движением перегиба как целого. Отвечающая такому движению "масса" перегиба M, как это видно из выражения для кинетической энергии (1), равна

$$M = \rho \int \left(\frac{\partial y_0}{\partial x}\right)^2 dx \quad . \quad (3)$$

Функция $y_0(x)$ описывает равновесную форму перегиба.

Задача окончательно свелась к одномерной, и действие вычисляется обычным способом

$$S = i \int_0^{V_0/Fa} \sqrt{M(V_0 - Fa\ell)}\, d\ell = \frac{2}{3}\, i\, \frac{V_0^{3/2}}{Fa} \sqrt{M}\,. \qquad (4)$$

Отметим, что формула (2) неверна вблизи одной из точек поворота. Однако эта область не вносит существенного вклада в интеграл (4). Таким образом, вероятность перехода равна

$$w \sim \exp\left\{- \frac{4}{3}\, \frac{V_0^{3/2}\sqrt{M}}{\hbar F a}\right\}. \qquad (5)$$

Для оценки величины показателя экспоненты можно воспользоваться выражением для V_0, полученным в работе [5], и подставить $\rho a \sim m$ (m – масса атома вещества), $\kappa \sim Ga^2$ (G – модуль сдвига)

$$\ln w \sim - \frac{F_p}{F}\, \frac{a\sqrt{mGa^3}}{\hbar}\,. \qquad (6)$$

Множитель, стоящий при отношении F_p / F имеет смысл отношения постоянной решетки к амплитуде нулевых сдвиговых колебаний. Отсюда ясно, что квантовые эффекты следует искать в веществах, в которых амплитуда нулевых колебаний не слишком мала. В первую очередь следует указать кристаллы инертных элементов, а также водорода, дейтерия, метана.

Существует некоторая область температур, в которой наиболее вероятным является сложный процесс: сначала происходит термическая активация с энергией E, а затем туннелирование. Вероятность этого процесса w пропорциональна произведению

$$w \sim w_T\, w_q \sim \exp\left\{ - \frac{E}{T} - \frac{4}{3}\, \frac{\sqrt{M}}{Fa\hbar}\, (V_0 - E)^{3/2}\right\}.$$

Наиболее вероятным значением E при $T > Fa\hbar / 4\sqrt{MV_0}$ является

$$E(T) = V_0 - \frac{1}{4}\, \frac{\hbar^2 a^2 F^2}{MT^2}\,.$$

В этой области температур вероятность перехода равна

$$w \sim \exp\left\{ - \frac{V_0}{T} + \frac{\hbar^2 a^2 F^2}{12MT^3}\right\}. \qquad (7)$$

2. Напряжения, близкие к напряжениям Пайерлса.

В случае $f = F_p - F \ll F_p$ потенциал $U(y)$ вблизи точки перегиба можно представить в виде $U(y) = fy - \frac{b}{3} y^3$, где $b = - \frac{1}{2} U_0'''$, а минимум $U(y)$ находится в точке $y_0 = - \sqrt{\frac{f}{b}}$. Метод расчета аналогичен использованному в работе [3].

Запишем уравнение Гамильтона – Якоби для действия, приняв единицами измерения для y – $\sqrt{f/b}$, для x – $\kappa^{1/2} f^{-1/4} b^{-1/4}$, для S – $f(\sqrt{\kappa \rho}/b)$. В этих единицах уравнение примет стандартный вид

$$\frac{1}{2} \int \left(\frac{\delta S}{\delta y} \right)^2 dx + \int \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^2 + y - \frac{y^3}{3} + \frac{2}{3} \right] dx = 0. \qquad (8)$$

Ответ для вероятности перехода будет

$$\ln w \approx -2 |S| f \frac{\sqrt{\kappa \rho}}{\hbar b} \qquad (9)$$

$|S|$ – безразмерное число. Приближенная вариационная оценка дает $|S| \lesssim 20$.

Заметим, что логарифм скорости дислокации в два раза меньше, чем $\ln w$, что весьма важно при оценке экспоненциально малых эффектов.

Попытки выяснить роль квантовых эффектов в преодолении дислокациями барьеров Пайерлса делались, исходя из нестрогих допущений, в работе [6]. Однако эти оценки не подтверждаются нашим расчетом.

Авторы выражают благодарность С.И.Анисимову и С.В.Иорданскому за полезные дискуссии.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
15 ноября 1971 г.

Литература

[1] I.Lothe, I.P.Hirth. Phys., Rev., 115, 543, 1959.

[2] А.П.Казанцев, В.Л.Покровский. ЖЭТФ, 58, 677, 1970.

[3] И.М.Лифшиц, Ю.М.Каган. ЖЭТФ, 62, вып. 1, 1972.

[4] С.В.Иорданский, А.М.Финкельштейн. ЖЭТФ, 62, вып. 1, 1972.

[5] P.Guyot, J.E.Dorn. Can. J. of Phys., 45, 983, 1967.

[6] A.C.Arko, J.Weertman. Acta Met., 17, 687, 1969.