

# СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИОННЫХ КИНКОВ В СЛУЧАЙНОМ ПОЛЕ АДСОРБИРОВАННЫХ ДИСЛОКАЦИЕЙ ПРИМЕСЕЙ

Б. В. Петухов\*

*Институт кристаллографии Российской академии наук  
119333, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 июня 2009 г.

Предложена модель влияния адсорбированных дислокационными ядрами примесей на подвижность дислокационных кинков в материалах с высоким кристаллическим рельефом (барьерами Пайерлса). Рассчитан спектр времен задержки кинков на статистических флуктуациях плотности примесей при достаточно большой энергии взаимодействия примесей с дислокациями, когда потенциал миграции не сводится к случайному гауссову потенциалу. Показано, что флуктуации в распределении примесей существенно изменяют характер миграции дислокационных кинков вследствие медленного убывания вероятности больших времен задержки. Рассчитаны зависимости положения границы динамического фазового перехода к сублинейному дрейфу кинков,  $x \propto t^\delta$  ( $\delta < 1$ ), и характеристик аномальной подвижности от физических параметров — напряжения, концентрации примесей, температуры эксперимента и др.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема транспорта частиц различной природы в неупорядоченных средах издавна привлекает широкое внимание исследователей. Интересный аспект этой проблемы возникает в материалах, характеризующихся широким спектром барьеров с медленно убывающей вероятностью наличия больших времен задержки мигрирующих объектов. В настоящее время известны многие такие системы в физике, химии, биофизике и других областях, изучению особенностей кинетики в которых посвящена большая литература (см., например, обзоры [1–7] и указанные в них ссылки). В качестве нескольких примеров отметим движение дислокаций, дисперсионный транспорт зарядов в примесных полупроводниках, диффузию полимеров и биологических макромолекул в гелях, перенос на фрактальных структурах, лазерное охлаждение атомных газов. Наличие широкого спектра барьеров с медленно убывающей асимптотикой вероятности больших времен задержки (heavy tails) приводит к таким качественным особенностям поведения частиц, как нелинейный дрейф под дей-

ствием внешней движущей силы, а в ее отсутствие — к аномально медленной релаксации. Установление вида спектра времен задержки является, таким образом, ключевым моментом в предсказании аномалий кинетики конкретных систем. Между тем во многих случаях наличие медленно убывающих асимптотик спектра просто постулируется, хотя вопрос об их происхождении заслуживает внимания, так как его решение позволяет установить корреляцию экспериментальных данных с внутренней природой изучаемых объектов. Статистический расчет такого спектра времен задержки при движении дислокационных кинк-солитонов (или просто кинков) в случайном потенциале адсорбированных дислокацией примесей является целью настоящей работы.

Одной (но еще недостаточной) причиной, приводящей к повышенной вероятности наличия больших времен задержки, может быть одномерность системы, при которой у частиц нет возможности выбирать путь движения и обходить неудобные препятствия. Естественным образом такая ситуация возникает при движении дислокационных кинков вдоль линий дислокаций в примесных материалах, в связи с чем эта система имеет давнюю историю изучения аномалий кинетики [8–11].

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

Дислокации в полупроводниках, металлах с ОЦК-структурой, керамических и некоторых других материалах движутся, преодолевая периодический потенциальный рельеф кристаллической решетки (барьеры Пайерлса) посредством термоактивируемого зарождения пар кинк–антикинк с последующим расширением их на всю дислокацию. В то время как кинковый механизм хорошо разработан для идеальных кристаллов [12–14], теория для примесных и легированных материалов, твердых растворов и сплавов далека от завершенности. Существуют важные для практических приложений эффекты, обусловленные легированием: твердорастворное упрочнение, дислокационное старение и т. п. Для стабильной работы полупроводниковых устройств часто необходима иммобилизация, или пиннинг дислокаций. Причиной закрепления дислокаций является поглощение примесей благодаря наличию энергетически выгодных для них состояний в дислокационных ядрах, характеризующихся некоторой энергией связи  $E_b$ . Экспериментальные данные показывают существенную зависимость напряжения открепления дислокаций в кремнии от величины магнитного поля [15], что интерпретируется как вклад короткодействующих сил в примесно-дислокационное взаимодействие. Эти электронные или «химические» силы ярко проявляют себя в магнитопластическом эффекте [16]. Следовательно, более или менее реалистичная модель движения дислокаций в легированных материалах должна быть основана на учете влияния на кинетику кинков короткодействующих потенциалов случайно расположенных примесей.

Для изучения систематических черт дислокационного пиннинга проводились детальные эксперименты с предварительной термообработкой образцов. Изменением длительности термообработки создавался контролируемый избыток примесей в дислокационных ядрах [17–19], вызывающий «старение» дислокаций. Избыточное содержание примесей в ядрах может также возникать и на движущихся дислокациях в условиях так называемого динамического старения (см., например, работы [20–23]). На условиях реализации такого режима движения дислокаций следует остановиться несколько подробнее, так как они определяют пределы применимости полученных в настоящей работе результатов.

Возможная модель осуществления элементарного акта смещения дислокации на период решетки в условиях увлечения примесей предложена, в частности, в работе [24]. Главной предпосылкой реализации такого режима является наличие конечной энер-

гетической щели между наиболее энергетически выгодными состояниями примесей в ядре дислокации и прочими их состояниями, что следует из атомно-дискретного устройства дислокационного ядра и подтверждается атомистическими расчетами энергии связи примесей с дислокациями. Из-за наличия потенциальной ямы порядка энергии связи примеси с дислокацией имеется большая разница между временем  $\tau$  перехода примесей в состояния в ядре дислокации и временем  $\tau_1$  ухода примесей из этой потенциальной ямы в прочие долины кристаллического рельефа;  $\tau_1 \gg \tau$ . Условием реализации рассматриваемого в работе режима следует считать  $\tau \leq \tau_{tr} < \tau_1$ , где  $\tau_{tr}$  — время смещения дислокации на период решетки. Условие  $\tau \leq \tau_{tr}$  обеспечивает увлечение примесей дислокацией в рассматриваемом режиме, в согласии с экспериментальным фактом динамического старения дислокаций. Условие  $\tau_{tr} < \tau_1$  определяет верхнюю границу применимости рассчитываемого спектра времен задержки кинков.

В настоящей работе изучается роль избыточного содержания примесей в дислокационных ядрах, которое, по предположению, в результате адсорбции намного превышает среднее по объему содержание в кристалле, что позволяет не принимать во внимание наличие примесей вне дислокационных ядер. Распределение примесей вдоль линий дислокаций считается полностью хаотичным.

В ранних работах [25] взаимодействие дислокационных кинков с примесями описывалось (по аналогии с обычными частицами) локализованными потенциалами, создающими при небольшой концентрации примесей изолированные барьеры на пути движения кинков. Такое взаимодействие перенормирует среднюю скорость движения кинков по сравнению с их скоростью в достаточно чистых кристаллах. В работе [8] была предложена иная модель, принимающая во внимание специфику квазичастиц типа кинка и учитывающая суммарный вклад примесей, модифицирующих энергию дислокационного ядра. В этой модели энергия взаимодействия кинка с примесью ступенчатым образом изменялась на величину порядка энергии связи  $E_b$  дислокации с примесью при перемещении кинка через примесную ячейку кристаллической решетки. Таким образом, принималось, что потенциал кинка в примесном кристалле содержит вклад  $\Delta E$ , пропорциональный разности  $N_1 - N_2$  числа примесей между двумя долинами кристаллического рельефа, связываемых кинком:

$$\Delta E(x) = E_b [N_1(x) - N_2(x)]. \quad (1)$$

В результате потенциал кинка при его перемещении совершает случайные блуждания по шкале энергии, делая «шаги» величиной  $E_b$  в случайных точках расположения примесей вдоль дислокации. Такой сильнофлуктуирующий потенциал и является главной причиной появления больших барьеров и обусловленных этим качественно новых черт кинетики кинков. В частности, в работе [8] было показано, что среднее время преодоления кинком барьеров, образованных случайными скоплениями хаотически распределенных примесей, неограниченно возрастает при температуре  $T$ , меньшей некоторой критической величины  $T_g$ , зависящей от концентрации примесей. Тем самым было установлено наличие своеобразного динамического фазового перехода с обращением в нуль средней скорости движения кинков в области  $T \leq T_g$ . Для этой области температур был предложен следующий приближенный кинетический закон зависимости длины пробега  $x$  от времени  $t$ :  $x \propto P^{-1}(t)$ , где  $P(t)$  — вероятность встретить барьер со временем преодоления, превышающим  $t$ . Такой тип кинетической зависимости с равной нулю средней скоростью движения впоследствии фигурировал под различными названиями: аномальная подвижность, движение в фазе крипа, гетерогенная динамика, квазилокализация, движение в поле случайной силы и т. д. [1–11, 26–30].

В то время как подвижность в нормальной фазе описывается лишь одним моментом функции распределения времен задержки, а именно, средним временем преодоления препятствия  $\langle \tau \rangle$ , для описания движения в аномальной фазе при  $T \leq T_g$  требуется более полная характеристика спектра времен задержки. Частично задача нахождения этого спектра была решена в работах [8–11], в которых было обнаружено степенное убывание вероятности больших времен задержки. Более общему решению для важного в приложениях случая больших энергий связи  $E_b$  по сравнению с тепловой энергией посвящена настоящая работа.

В работе [8] рассматривался случай одинаковой средней плотности распределения примесей в долинах кристаллического рельефа, создающих для кинка статистически симметричный случайный потенциал (1). Асимметрия вносилась лишь наличием внешней движущей силы  $f$ . Аномально медленная диффузия частиц в таком потенциале в отсутствие внешней движущей силы ( $f = 0$ ) была рассмотрена в работе [26], привлекая широкое внимание как физиков, так и математиков и породившей обширную литературу (см. ссылки в цитируемых выше обзорах [1–7]).

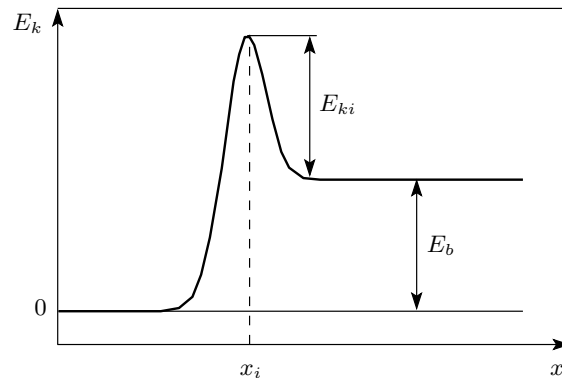


Рис. 1. Потенциал взаимодействия кинка с примесью  $E_k(x)$ : локальный пик+ступенька ( $x_i$  — координата примеси вдоль линии дислокации)

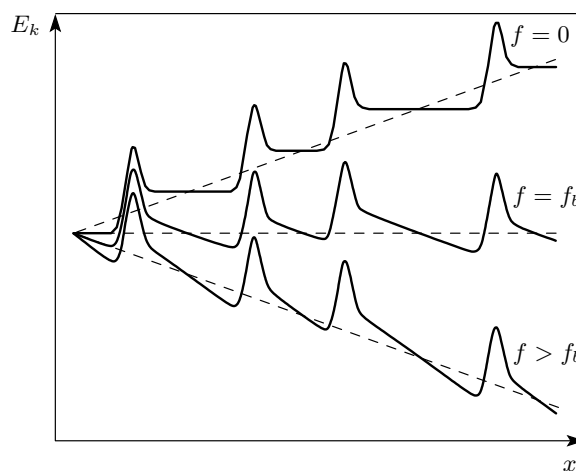


Рис. 2. Потенциальный рельеф для миграции кинка вдоль дислокации с адсорбированными примесями при различной величине движущей силы  $f$

Для описания движения кинков в поле адсорбированных дислокацией примесей следует рассмотреть асимметричный вариант потенциала (1), когда главную роль играют примеси, расположенные в исходной долине кристаллического рельефа, в связи с чем будем полагать  $N_2(x) = 0$ . Упрощенный потенциал взаимодействия кинка с примесью схематически представлен на рис. 1. После прохождения кинка через примесь дислокация отрывается от примеси и полная энергия повышается на величину энергии связи  $E_b$ . Помимо этого ступенчатого вклада в  $E_k(x)$ , локальное взаимодействие между кинком и примесью создает пик около примесной ячейки, который дополнительно увеличивает энергию на некоторую величину  $E_{ki}$ .

Суперпозиция ступенчатых вкладов от всех примесей, хаотически распределенных вдоль дислокационного ядра, порождает сильнофлуктуирующий, но

в среднем повышающийся энергетический рельеф для смещения кинка (рис. 2). Это повышение эквивалентно тормозящей силе  $f_b = E_b/\bar{l}$ , где  $\bar{l}$  — среднее расстояние между одиночными примесями. Связь между движущей кинк силой  $f$  и внешним напряжением  $\sigma$  дается формулой  $f = \sigma bh$ , где  $b$  — вектор Бюргерса дислокации,  $h$  — высота кинка (расстояние между долинами кристаллического рельефа). Будем принимать во внимание только ступенчатые вклады в энергию взаимодействия кинка с примесью, полагая для простоты  $E_{ki} = 0$ , так как обобщение на случай  $E_{ki} > 0$  может быть легко проведено простой модификацией окончательных формул.

## 2. ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ НА РАСПРОСТРАНЕНИЕ КИНКОВ

Для времени  $\tau$  преодоления барьера, образованного некоторой флуктуацией скопления примесей, будем использовать известную формулу теории распада метастабильных состояний (см., например, работу [31]):

$$\tau = \frac{l_f}{D_k} \int \exp \left[ \frac{U(x)}{kT} \right] dx. \quad (2)$$

Здесь  $l_f$  — размер локализации частицы в предбарьерном состоянии,  $D_k$  — коэффициент диффузии,  $U(x)$  — энергетический профиль барьера. Интеграл берется по размеру барьера. В рассматриваемом случае  $l_f = kT/f$ ,  $U(x) = E_b N(x) - fx$ ,  $N(x)$  — случайное число примесей на длине  $x$ , отсчитываемой от положения кинка перед первой примесью в скоплении.

Время  $\tau$ , даваемое формулой (2), является функционалом от конфигурации примесей, создающей случайный потенциал. Подобного типа функционалы как в конечных, так и в бесконечных пределах интегрирования имеют приложения в различных областях и широко изучаются в математической статистике (см., например, работу [32]). Наиболее изученным является случай гауссова потенциала, популярного в силу его универсальности. В работе [8] для функционала (2) было выведено уравнение, решением которого найдена функция распределения интеграла в бесконечных пределах для предельного гауссова случая. Это распределение было также получено в работе [33] для приложений в области изучения финансовых рисков. Однако в физических приложениях к реальным примесным системам во многих случаях более адекватным является рассмотрение энергий взаимодействия  $E_b$ , превышающих тепловую энергию  $kT$ , когда потенциал не сводится к гауссову. Такая ситуация и будет в центре внима-

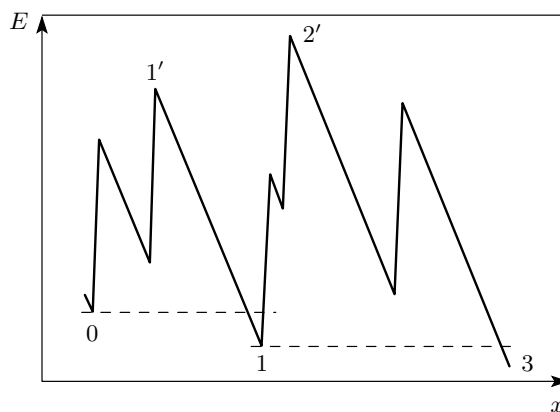


Рис. 3. Составной барьер для движения кинка, распадающийся на два независимых барьера. Предбарьерные состояния отдельных барьеров отмечены цифрами 0, 1; максимальные значения высот барьеров — цифрами 1', 2'; цифра 3 отмечает окончание второго барьера

ния в настоящей работе. Для этого случая ранее [10] был найден показатель степени убывания функции распределения в области больших времен задержки. Этот результат будет обобщен в настоящей работе расчетом полного спектра.

В то время как для нахождения асимптотик спектра при больших временах задержки можно было изучать функционал (2) в бесконечных пределах, как это делалось в работах [8, 10] (perpetual functional [32]), для более полного расчета спектра требуется конкретизировать определение функционала с учетом, вообще говоря, случайного характера пределов интегрирования. Уточним, что будет приниматься за размер барьера, определяющий верхний предел интегрирования в выражении (2). Дополнительное условие разграничения барьеров вытекает из того, какие скопления примесей считать образующими единый барьер, а какие — распадающимися на независимые барьеры. Ситуацию разъясняет рис. 3. Глобальному максимуму соответствует точка 2', однако его высота не является энергией активации для перехода из предбарьерного состояния 0, поскольку изображенная конфигурация распадается на два отдельных барьера. Первый барьер имеет высоту, отвечающую энергии в точке 1', а второй — высоту, равную разности энергий в точках 2' и 1. Таким образом, условием окончания барьера считается уменьшение энергии ниже первоначального (предбарьерного) значения, принимаемого за начало отсчета, и интеграл в выражении (2) распространяется до первого пересечения потенциалом нулевого уровня энергии.

Первая примесь в скоплении повышает энергию кинка на величину  $E_b$  относительно предбарьерного состояния. Поэтому будем искать вероятность  $P_b(\tau)$  того, что при начальном уровне энергии  $E_b$  время задержки на барьере дорастет до уровня  $\tau$  на длине, соответствующей первому пересечению энергией  $E_k(x)$  предбарьерного уровня  $E = 0$ . Для расчета  $P_b(\tau)$  удобно использовать несколько более общую величину: вероятность  $P(E, \tau)$  дорасти, стартуя с произвольного начального значения энергии  $E$ , до времени задержки  $\tau$  при условии, что  $E_k(x) > 0$  на всей длине барьера. Эта новая величина удобна тем, что для нее легко может быть выведено уравнение, решение которого затем в пределе  $E \rightarrow E_b$  даст интересующую нас вероятность  $P_b(\tau)$ . Отметим граничное условие на функцию  $P(E, \tau)$ :

$$P(E, \tau) = 1 \quad \text{при} \quad E > E_M \equiv kT \ln(\tau/\tau_*), \quad (3)$$

поскольку при заданной величине  $E$  минимально возможное значение  $\tau$ , определяемое вкладом единственной примеси, есть  $\tau_* \exp(E/kT)$ ,  $\tau_* = l_f^2/D_k$ .

Запишем соотношение для  $P(E, \tau)$ , рассматривая все допустимые положения следующей по порядку примеси. Выделим вклад первой примеси в интеграл в выражении (2):

$$\tau = \tau_* \left[ \exp\left(\frac{E}{kT}\right) - \exp\left(\frac{E'}{kT}\right) \right] + \tau', \quad (4)$$

где  $E' = E - fl$ ,  $l$  — промежуток между первой и последующей примесями,  $\tau'$  — остаточный вклад во время задержки. Вероятность  $P(E, \tau)$  можно записать как сумму вероятностей всех вариантов расположения второй примеси в скоплении, не нарушающих условие  $E_k(x) > 0$ . Вероятность частного варианта дается произведением вероятности  $\exp(-l/\bar{l})dl/\bar{l}$  иметь промежуток между первой и последующей примесями равный  $l$  и вероятности  $P(E - fl + E_b, \tau')$  того, что интеграл типа (2) с потенциалом  $U(x)$ , начинающимся со значения энергии  $E - fl + E_b$ , отсчитанной от положения второй примеси, будет превышать величину  $\tau'$ , так что

$$P(E, \tau) = \int_0^{E/f} \exp\left(-\frac{l}{\bar{l}}\right) P\left(E - fl + E_b, \tau - \tau_* \left[ \exp\left(\frac{E}{kT}\right) - \exp\left(\frac{E - fl}{kT}\right) \right]\right) \frac{dl}{\bar{l}} = \\ = \frac{1}{f\bar{l}} \int_0^E \exp\left(\frac{E' - E}{f\bar{l}}\right) P\left(E' + E_b, \tau - \tau_* \left[ \exp\left(\frac{E}{kT}\right) - \exp\left(\frac{E'}{kT}\right) \right]\right) dE'. \quad (5)$$

Дифференцируя соотношение (5) по  $E$ , получаем уравнение

$$\frac{\partial P(E, \tau)}{\partial E} = -\frac{1}{f\bar{l}} [P(E, \tau) - P(E + E_b, \tau)] - \\ - \frac{\tau_*}{kT} \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \frac{\partial P(E, \tau)}{\partial \tau}. \quad (6)$$

Нас будет интересовать решение уравнения (6) для времен задержки, определяемых не единственной примесью, а их скоплениями для значений  $\tau$ , удовлетворяющих условию  $E_M = kT \ln(\tau/\tau_*) > E_b$ . Отметим, что  $E_M$  можно придать смысл эффективной высоты барьера, а в пределе  $T \rightarrow 0$  величина  $E_M$  фактически переходит в энергию активации преодоления препятствия. Если перейти от переменной  $\tau$  к переменной  $E_M$ , то последнее слагаемое в уравнении (6) примет вид

$$\exp\left(\frac{E - E_M}{kT}\right) \frac{\partial P(E, E_M)}{\partial E_M}.$$

Отсюда можно заключить, что при  $E \rightarrow E_b$  в области  $E_M - E_b \gg kT$  это слагаемое содержит малый множитель  $\exp((E - E_M)/kT)$  и им можно пренебречь. Таким образом, приходим к упрощенному уравнению

$$\frac{\partial P(E, \tau)}{\partial E} = -\frac{1}{f\bar{l}} [P(E, \tau) - P(E + E_b, \tau)]. \quad (7)$$

На функцию  $P(E, \tau)$  наложены следующие условия:

$$P(E, \tau) = \begin{cases} 0, & E \leq 0, \\ 1, & E > E_M. \end{cases}$$

Предельное значение  $P(E, \tau)$  при  $E \rightarrow E_M$  снизу может отличаться от единицы, так как возможен скачок; поэтому обозначим этот предел  $P_M$ . Для удобства решения уравнения (7) с использованием преобразования Лапласа сделаем подстановку

$$P(E, \tau) = \exp\left(\frac{E_M - E}{f\bar{l}}\right) Q\left(\frac{E_M - E}{E_b}\right).$$

Вместо (7) получаем уравнение

$$\frac{dQ(\varepsilon)}{d\varepsilon} = -\gamma Q(\varepsilon - 1), \quad (8)$$

где  $\gamma = (f_b/f) \exp(-f_b/f)$  и введена безразмерная переменная  $\varepsilon = (E_M - E)/E_b$ . На функцию  $Q(\varepsilon)$  наложены условия

$$Q(\varepsilon) = \begin{cases} 0, & \varepsilon \geq E_M/E_b, \\ \exp[-(f_b/f)\varepsilon], & \varepsilon < 0 \end{cases}$$

и  $Q(\varepsilon) \rightarrow P_M$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

В лапласовском представлении уравнение (8) имеет решение

$$\tilde{Q}(s) = \int_0^\infty e^{-s\varepsilon} Q(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{s + f_b/f} + \frac{P_M - 1}{s + \gamma e^{-s}}. \quad (9)$$

Обратное преобразование Лапласа дает

$$Q(\varepsilon) = \exp[-(f_b/f)\varepsilon] - (1 - P_M)F(\varepsilon), \quad (10)$$

где функция  $F(\varepsilon)$  дается выражением

$$F(\varepsilon) = \sum_{k=0}^{[\varepsilon]} (\varepsilon - k)^k \frac{(-\gamma)^k}{k!}. \quad (11)$$

Здесь  $[\varepsilon]$  обозначает целую часть числа  $\varepsilon$ .

Из условия  $Q(E_M/E_b) = 0$  находим

$$P_M = 1 - \frac{\exp(-E_M/f_l)}{F(E_M/E_b)}.$$

Подставляя это значение в уравнение (10) и возвращаясь к первоначальным переменным, получаем

$$P(E, \tau) = 1 - \exp\left(-\frac{E}{f_l}\right) \frac{F((E_M - E)/E_b)}{F(E_M/E_b)}. \quad (12)$$

Интересующая нас величина есть  $P_b(\tau) = P(E_b, \tau)$ :

$$P_b(\tau) = 1 - \exp\left(-\frac{f_b}{f}\right) \times \\ \times F\left(\frac{kT}{E_b} \ln\left(\frac{\tau}{\tau_*}\right) - 1\right) / F\left(\frac{kT}{E_b} \ln\frac{\tau}{\tau_*}\right). \quad (13)$$

Поведение вероятности встретить барьер с временем задержки, превышающим  $\tau$ , проиллюстрировано на рис. 4 для различных значений приложенной силы. Изломы кривых обусловлены изменением числа слагаемых в сумме (11) при целых значениях величины  $(kT/E_b) \ln(\tau/\tau_*)$ . При  $\tau \rightarrow \tau_* \exp(E_b/kT)$  кривые  $P_b(\tau)$  начинаются со

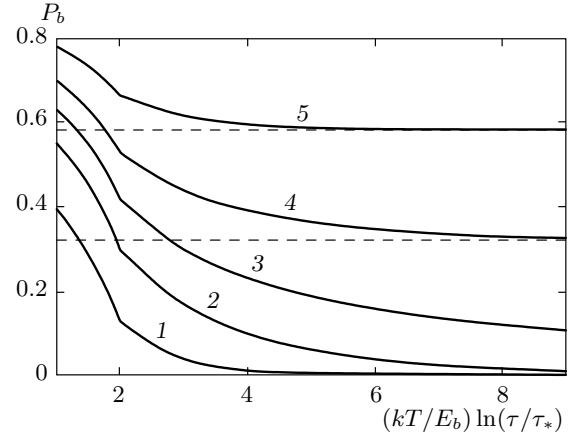


Рис. 4. Функция распределения  $P_b(\tau)$  времен задержки для движения кинков в случайном поле адсорбированных дислокацией примесей при различных значениях приложенной силы:  $f_b/f = 0.5$  (1), 0.8 (2), 1 (3), 1.2 (4), 1.5 (5)

значения  $1 - \exp(-f_b/f)$ , соответствующего вероятности того, что скопление содержит кроме начальной хотя бы еще одну примесь.

Обсудим теперь поведение спектра при больших временах задержки. В предельном случае  $(kT/E_b) \ln(\tau/\tau_*) \gg 1$  можно использовать асимптотическое выражение для  $F(\varepsilon)$  при больших  $\varepsilon$ ,

$$F(\varepsilon) \approx \frac{\exp(s_0\varepsilon)}{1 + s_0} + \frac{\exp[-(f_b/f)\varepsilon]}{1 - f_b/f}, \quad (14)$$

следующее из учета двух главных вкладов от полюсов лапласовского образа  $F(\varepsilon)$ . Эти полюсы находятся из решения уравнения

$$s + \gamma e^{-s} = 0. \quad (15)$$

Одно решение,  $s = -f_b/f > -1$ , очевидно из определения  $\gamma$ . Для нахождения второго,  $s_0 < -1$ , следует решать трансцендентное уравнение (15). В дальнейшем, а также для сравнения с предыдущими работами, будет более удобно вместо величины  $s_0$  использовать величину  $\varphi = -s_0 - f_b/f$ , удовлетворяющую следующему из (15) уравнению

$$\frac{e^\varphi - 1}{\varphi} = \frac{f}{f_b}, \quad (16)$$

причем  $\varphi > 0$  при  $f > f_b$ ,  $\varphi < 0$  при  $f < f_b$  и  $\varphi \approx 2(f/f_b - 1)$  при  $f \rightarrow f_b$ . Подстановка выражения (14) в уравнение (12) дает

$$P(E, \tau) \approx \\ \approx \frac{1 - \exp(\varphi E/E_b)}{1 + [(1 - f_b/f - \varphi)/(1 - f_b/f)] (\tau/\tau_*)^\delta}, \quad (17)$$

где  $\delta = T/T_g$ ,  $T_g = E_b/k\varphi$ . Распределение времен задержки есть

$$P_b(\tau) \approx \frac{1 - e^\varphi}{1 + [(1 - f_b/f - \varphi)/(1 - f_b/f)](\tau/\tau_*)^\delta}. \quad (18)$$

Это выражение справедливо по обе стороны от порога  $f_b$ , переходя для больших значений времен задержки при  $f > f_b$  ( $\delta > 0$ ) в

$$P_b(\tau) \approx \frac{\varphi(f/f_b - 1)}{\varphi + f_b/f - 1} \left(\frac{\tau_*}{\tau}\right)^\delta, \quad (19)$$

а при  $f < f_b$  ( $\delta < 0$ ) — в

$$P_b(\tau) \approx -\varphi f/f_b. \quad (20)$$

В области  $f > f_b$  вероятность встретить барьер для движения кинка с временем задержки, превышающим  $\tau$ , степенным образом убывает до нуля с ростом  $\tau$ . Показатель экспоненты согласуется с найденным ранее [10]. В области  $f < f_b$  эта вероятность стремится к конечному значению, что проиллюстрировано на рис. 4 и означает возможность распространения кинка лишь на конечное расстояние. Таким образом, значение движущей силы  $f = f_b$  отвечает порогу протекания.

### 3. ДИНАМИЧЕСКИЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

Перейдем к приложению рассчитанного спектра времен задержки  $P_b(\tau)$  к описанию миграции кинков на большие расстояния. Простейшей характеристикой кинетики кинка в случайном потенциале является среднее время задержки на препятствиях,  $\langle\tau\rangle$ , позволяющее найти среднюю скорость кинка  $v_k = l_{av}/\langle\tau\rangle$  при известном среднем расстоянии  $l_{av}$  между препятствиями:

$$\langle\tau\rangle = \int_0^\infty \tau \frac{dP_b(\tau)}{d\tau} d\tau. \quad (21)$$

Уравнение (19) показывает, что функция  $dP_b(\tau) d\tau$  убывает с ростом  $\tau$  как  $\tau^{-1-\delta}$  и, следовательно, интеграл в (21) имеет конечное значение лишь при  $\delta > 1$ , или  $T > T_g$ , неограниченно нарастая при  $T \rightarrow T_g$ :

$$\langle\tau\rangle \approx \frac{\tau_*\varphi(f/f_b - 1)}{(\varphi + f_b/f - 1)(T/T_g - 1)}. \quad (22)$$

При  $T \leq T_g$  интеграл в (21) расходится и среднее время задержки кинка на случайных препятствиях обращается в бесконечность, а скорость движения  $v_k$  обращается в нуль. Это является проявлением предсказанного ранее [8] динамического фазового перехода с качественным изменением характера подвижности кинков. Более высокие моменты функции распределения  $\langle\tau^n\rangle$  расходятся в более широкой области температур  $T \leq nT_g$ . Физический интерес, в частности, может представлять изменение определяемого вторым моментом функции распределения характера диффузионного распыливания фронта движения вокруг среднего дрейфового смещения в области температур  $T_g < T < 2T_g$  [3].

### 4. КИНЕТИКА ДВИЖЕНИЯ КИНКОВ ПРИ $T < T_g$

Опишем закономерности движения кинков в аномальной фазе при  $T < T_g$ . При перемещении кинка под действием внешней силы на большое расстояние ему приходится последовательно преодолевать ряд препятствий и времена задержки на каждом препятствии суммируются. Тот факт, что среднее время задержки на одном препятствии обращается в бесконечность, означает, что главный вклад в полное время движения определяется не типичными препятствиями в массе, а наибольшими слагаемыми. Качественная картина длиннопробежной миграции состоит в следующем [8]. Длина пробега за время  $t$  в основном определяется средним расстоянием  $l$  между препятствиями с временем задержки, равным или превышающим  $t$ . С помощью асимптотики функции распределения времен задержки (19) это среднее расстояние в надпороговой области  $f > f_b$  оценивается как

$$l \approx l_{av}/P_b(t) = \Delta l(t/\tau_*)^\delta, \quad (23)$$

где

$$\Delta l = \frac{l_{av}(\varphi + f_b/f - 1)}{\varphi(f/f_b - 1)},$$

$l_{av}$  — среднее расстояние между всеми препятствиями.

Более полное описание дается с помощью статистической теории распределения сумм случайных слагаемых [34, 35]. Расстояние между препятствиями складывается из ширины барьера и свободного промежутка до следующей примеси. Можно показать, что средний размер случайного барьера при  $f > f_b$  ведет себя как  $\bar{l}/(1 - f_b/f)$ . Таким образом, величина  $l_{av} = \bar{l}[1 + 1/(1 - f_b/f)]$  является

конечной, в отличие от среднего времени задержки. В силу закона больших чисел на достаточно большой длине пробега  $x$  встречается приблизительно  $N \approx x/l_{av}$  препятствий. Согласно [34] (см. также [3, 35]), плотность распределения нормированной суммы  $N$  случайных положительных слагаемых,  $t = \tau_1 + \tau_2 + \dots + \tau_N$ , распределение каждого из которых имеет асимптотику  $B/\tau^\delta$  ( $\tau \rightarrow \infty$ ), дается функцией Леви

$$L_{\delta,1} \left( \frac{t}{N^{1/\delta}} \right) = \frac{1}{2\pi i} \times \\ \times \int_{d-i\infty}^{d+i\infty} \exp \left[ \frac{st}{N^{1/\delta}} - \frac{\pi B}{\sin(\pi\delta)\Gamma(\delta)} s^\delta \right] ds = \\ = -\frac{N^{1/\delta}}{\pi t} \sum_{k=1}^{\infty} \left( -\frac{\pi B N}{\Gamma(\delta) \sin(\pi\delta) t^\delta} \right)^k \times \\ \times \frac{\Gamma(1+k\delta) \sin(\pi\delta k)}{k!}, \quad (24)$$

где  $\Gamma(x)$  — гамма-функция. Функция (24) дает достаточно полное описание распространения фронта движения кинков в поле случайно распределенных примесей. Как видно из (24), характерные масштабы времени движения  $t$  и длины пробега  $x$  действительно связаны соотношением (23), следующим из качественной картины.

## 5. СКОРОСТЬ ДИСЛОКАЦИИ

Обобщение на случай наличия локального пика  $E_{ki}$  во взаимодействии кинка с примесью проводится путем замены  $\tau_*$  на  $\tau_1 \approx \tau_* \exp(E_{ki}/kT)$  в выражении для длины пробега кинка. Время перехода дислокации в следующую долину кристаллического рельефа,  $t_{tr}$ , может быть оценено самосогласованным образом путем приравнивания средней длины пробега кинка  $x(t_{tr}) \approx \Delta l (t_{tr}/\tau_1)^\delta$  среднему расстоянию  $1/\Gamma t_{tr}$  между парами кинков, рожденными ко времени  $t_{tr}$  ( $\Gamma$  — средняя частота рождения пар кинков на единице длины дислокации). Скорость дислокации  $V$  затем вычисляется как  $V = h/t_{tr}$  и равна

$$V \approx \frac{h}{\tau_1} (\Gamma \tau_1 \Delta l)^{1/(1+\delta)}. \quad (25)$$

Характерная длина дислокации, начиная с которой следует учитывать множественное рождение пар кинков, есть

$$L_{tr} \approx x(t_{tr}) \approx \left( \frac{\Delta l^\delta}{\Gamma \tau_1} \right)^{1/(1+\delta)}. \quad (26)$$

Уравнения (25), (26) обобщают хорошо известные результаты теории Лоте и Хирта [12] для чистых материалов на случай сильного влияния примесей и переходят в них при  $\delta \rightarrow 1$ .

В подпороговой области  $f < f_b$  длины пробега кинков конечны и движение дислокаций происходит за счет образования многоэтажных конфигураций с экспоненциально малой вероятностью.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье развита теория движения дислокационных кинков в хаотическом потенциале, образованном адсорбированными на дислокации примесями. Отметим наиболее важные результаты.

Рассчитан спектр времен задержки кинков на случайных скоплениях примесей при достаточно большой энергии взаимодействия примесей с дислокациями,  $E_b \gg kT$ , когда потенциал миграции кинков не сводится к случайному гауссову потенциалу. Явный вид этого спектра дается формулой (13) и может быть полезен, например, при описании асимметричного уширения пиков внутреннего трения в примесных полупроводниках, ОЦК-металлах и других материалах.

Медленное степенное убывание вероятности больших времен задержки приводит к наличию динамического фазового перехода при температуре  $T = T_g$ , ниже которой движение кинков приобретает характер нелинейного дрейфа с зависимостью длины пробега  $x$  от времени  $t$  вида  $x \propto t^{T/T_g}$ . В работе рассчитаны зависимости положения границы перехода и характеристик аномальной подвижности от физических параметров, таких как движущая сила, температура эксперимента, концентрация примесей и энергия их взаимодействия с дислокацией.

Дано явное описание расплывания фронта движения кинков с помощью функции Леви. В итоге показано, что влияние примесей качественно изменяет кинетику миграции кинков и ее зависимость от напряжения и температуры.

Отметим также, что хотя в работе для наглядности использовался образ дислокационного кинка, изучаемый потенциал миграции (см. выражение (1)) имеет достаточно общий вид и значительно более широкую область применимости, позволяя перенести результаты на объекты другой природы.



## ЛИТЕРАТУРА

1. S. Alexander, J. Bernasconi, W. R. Schneider et al., *Rev. Mod. Phys.* **53**, 175 (1981).
2. J. W. Haus and K. W. Kehr, *Phys. Rep.* **150**, 263 (1987).
3. J.-P. Bouchaud and A. Georges, *Phys. Rep.* **195**, 127 (1990).
4. B. D. Hughes, *Random Walks and Random Environments*, Vol. 2, Clarendon Press, Oxford (1996).
5. R. Metzler and J. Klafter, *Phys. Rep.* **339**, 1 (2000).
6. G. M. Zaslavsky, *Phys. Rep.* **371**, 461 (2002).
7. F. Igloi and C. Monthus, *Phys. Rep.* **412**, 277 (2005).
8. Б. В. Петухов, *ФТТ* **13**, 1445 (1971).
9. M. V. Feigel'man and V. M. Vinokur, *J. de Phys.* **49**, 1731 (1988).
10. Б. В. Петухов, *ФТТ* **30**, 2893 (1988).
11. J.-P. Bouchaud and A. Georges, *Comm. Cond. Matter Phys.* **15**, 125 (1991).
12. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций*, Атомиздат, Москва (1972).
13. Б. В. Петухов, В. Л. Покровский, *ЖЭТФ* **63**, 634 (1972).
14. D. Caillard and J.-L. Martin, *Thermally Activated Mechanisms in Crystal Plasticity*, Pergamon Press, Amsterdam (2003).
15. М. В. Бадылевич, Ю. Л. Иунин, В. В. Кведер и др., *ЖЭТФ* **124**, 664 (2003).
16. V. I. Alshits, E. V. Darinskaya, M. V. Koldaeva et al., in *Dislocations in Solids*, Vol. 14, ed. by J. P. Hirth, North-Holland, Amsterdam (2008), p. 333.
17. I. E. Bondarenko, V. G. Eremenko, V. I. Nikitenko et al., *Phys. St. Sol. (a)* **69**, 341 (1980).
18. I. Yonenaga, *Sol. St. Phenom.* **95–96**, 423 (2004).
19. S. Senkader, A. Guannattasio, R. J. Falster et al., *Sol. St. Phenom.* **95–96**, 43 (2004).
20. H. Alexander, in *Dislocations in Solids*, Vol. 7, ed. by F. R. N. Nabarro, North-Holland, Amsterdam (1986), p. 113.
21. T. S. Gross, V. K. Mathews, R. J. De Angelis et al., *Mat. Sci. Eng. A* **117**, 75 (1989).
22. I. Yonenaga and K. Sumino, *J. Appl. Phys.* **71**, 4249 (1992).
23. H. Siethoff and H. G. Brion, *Phil. Mag. A* **81**, 145 (2001).
24. Б. В. Петухов, *Кристаллография* **54**, 68 (2009).
25. V. Celli, M. Kabler, T. Ninomiya et al., *Phys. Rev.* **132**, 58 (1963).
26. Я. Г. Синай, *Теория вероятностей и ее применения* **27**, 247 (1982).
27. Б. В. Петухов, *Кристаллография* **38**, 4 (1993).
28. Yu. L. Iunin, V. I. Nikitenko, V. I. Orlov et al., *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3137 (1997).
29. B. V. Petukhov, *Phys. Rev. E* **77**, 026601 (2008).
30. В. Ю. Забурдаев, П. В. Попов, А. С. Романов, К. В. Чукбар, *ЖЭТФ* **133**, 140 (2008).
31. S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* **5**, 1 (1943).
32. H. Matsumoto and M. Yor, *Prob. Surv.* **2**, 348 (2005).
33. D. Dufresne, *Scand. Actuarial J.* **39–79** (1990).
34. Б. В. Гнеденко, А. Н. Колмогоров, *Предельные теоремы для сумм независимых случайных величин*, Изд-во техн.-теор. лит., Москва (1949).
35. V. V. Uchaikin and V. M. Zolotarev, *CHANCE and STABILITY. Stable Distributions and their Applications*, VSP, Moscow (1999).