

07,12

## Активационно-туннельная динамика протяженных систем в периодическом потенциальном рельефе

© Б.В. Петухов

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ „Кристаллография и фотоника“ РАН, Москва, Россия

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

Поступила в Редакцию 15 сентября 2020 г.

В окончательной редакции 21 октября 2020 г.

Принята к публикации 21 октября 2020 г.

Динамика объектов различной физической природы в барьерных структурах сверхпроводников, магнитных материалах, квантовых кристаллах и других твердых тел определяется скоростью флуктуационного распада метастабильных состояний в промежуточных минимумах потенциального рельефа. В важной для многих нанотехнологических приложений низкотемпературной области тепловые флуктуации вымораживаются и сменяются квантовыми, что приводит к своеобразному фазовому переходу в динамике. Характер такого перехода в различных системах является аналогом либо перехода второго, либо первого рода. Температура перехода зависит от степени метастабильности, и может управляться внешней нагрузкой. Произведен расчет этой зависимости для протяженной наносистемы в наклонном периодическом рельефе типа „стиральной доски“ в широком интервале изменения нагрузки, обобщающий известные прежде результаты.

**Ключевые слова:** динамика протяженных систем, метастабильные состояния, активационно-туннельный переход, коллективные координаты.

DOI: 10.21883/FTT.2021.02.50476.197

### 1. Введение

Динамика протяженных многомерных объектов в различных материалах в настоящее время активно изучается как экспериментально, так и теоретически [1,2]. Фундаментальный интерес представляет граница, разделяющая температурные области классического и квантовомеханического поведения систем [3]. Существует большое количество материалов, ярко проявляющих при достаточно низких температурах квантовое поведение. В первую очередь можно указать кристаллы He и Ne, молекулярные твердые материалы  $H_2$  и  $CH_4$ , некоторые ионные (LiH), ковалентные (графит) и металлические (Li) кристаллы, а также вигнеровские кристаллы, решетки вихрей и ряд других (в качестве недавнего обзора см. [4]). Многие свойства таких материалов определяются подвижностью дефектов, в частности, дислокаций, преодолевающих препятствия с помощью квантовых механизмов [5]. Важным фактором является тот факт, что потенциальный рельеф кристаллической решетки материалов создает периодическое чередование энергетических минимумов и максимумов, во многом определяющих закономерности поведения различных протяженных систем. Другими популярными примерами являются движение волн зарядовой плотности, явление проскальзывания фаз в джозефсоновских контактах или в сверхпроводящих нанопроволоках (см., например, [6,7,8,9]). Сходные черты наблюдаются также в динамике доменных границ [10,11], а также в цепочках спинов [12] или атомов с водородными связями [13].

Значительный интерес представляет реакция протяженной системы на воздействие внешней нагрузки, делающей долины потенциального рельефа неэквивалентными. Положение подобной системы в минимуме возмущенного нагрузкой периодического потенциального рельефа является метастабильным состоянием, так как, преодолевая барьер посредством тепловых или квантовых флуктуаций, объект может переходить в соседние энергетически предпочтительные минимумы. Согласно принятым представлениям, эволюция протяженной системы осуществляется образованием локальных зародышей нового состояния, их разрастанием и слиянием. Часто кинетику такого процесса описывают на языке образования и движения границ зародышей, являющихся доменными стенками или кинк-солитонами (далее просто кинки) [14]. В джозефсоновских контактах вместо терминов кинк или антикинк иногда используют термины флуксон или антифлуксон.

Динамика доменных стенок или кинков хорошо изучена для относительно низких нагрузок, при которых они могут рассматриваться как слабо возмущенные своеобразные квазичастицы, характеризующиеся одной степенью свободы — положением кинка как целого [15]. Сложнее обстоит дело при повышении нагрузки, приводящей к деформации кинков, при которой проявляются их внутренние степени свободы. При этом возможность одномерного описания утрачивается и необходимо использовать более полные представления о конфигурационном пространстве систем. Целью настоящей работы является описание динамики протяженных метастабильных систем в расширенном диапазоне нагрузок, для чего

будет применен эффективный метод коллективных координат, включающий дополнительную степень свободы — изменяющую ширину доменной стенки. Основы такого подхода были заложены в работах [16,17].

## 2. Энергетический рельеф в конфигурационном пространстве

Преодоление барьеров протяженной системой происходит с искривлением ее конфигурации, и для описания этого процесса требуется знать энергетику конфигурационного пространства. Архетипической моделью, используемой при описании переключения состояний разнообразных квазиодномерных систем, является модель упругой струны. Энергия струны, покоящейся в плоском потенциальном рельефе  $U_0(y)$  под действием внешней силы  $f$ , описывается выражением

$$E\{y(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \frac{\kappa}{2} y'^2(x) + U_0(y) - fy(x) \right\}. \quad (1)$$

Здесь  $y(x)$  — конфигурация струны,  $y'(x) = dy/dx$ ,  $x$  — координата вдоль долин потенциала  $U_0(y)$ , имеющего несколько минимумов, отвечающих метастабильным состояниям системы,  $\kappa$  — жесткость струны. Роль внешней силы в разных системах играют различные физические величины. Например, в динамике волн зарядовой плотности это электрическое поле, в сверхпроводниках — протекающий ток или магнитное поле, при движении дислокаций — механическое напряжение. Часто в качестве  $U_0(y)$  рассматривается периодический потенциал [18], приводящий к динамике популярной модели синус-Гордона

$$U_0(y) = \frac{U_m}{2} \left[ 1 - \cos\left(\frac{2\pi}{h} y\right) \right]. \quad (2)$$

Здесь  $h$  — период потенциала. Вывод модели синус-Гордона, физический смысл и значения входящих в нее параметров для различных систем приведены в [14,18,19]. Для материалов, в которых наблюдаются эффекты квантового туннелирования, типичные значения параметров таковы, что характерная энергия  $h(\kappa U_m)^{1/2}$  составляет величины порядка  $10^{-3} - 10^{-2}$  eV, характерная квантовая температура  $T_q = \frac{\hbar}{k\hbar} (U_m/\rho)^{1/2} \sim 1 - 10$  K ( $\rho$  — линейная плотность массы струны). При наличии внешней движущей силы  $f$  возникает неэквивалентность минимумов  $U_0(y)$ , даваемых выражением (2), и метастабильные состояния системы в минимумах имеют конечное время жизни. Распад метастабильных состояний происходит вследствие флуктуаций через локально неоднородные конфигурации струны. Время распада определяется высотой барьеров в конфигурационном пространстве, рассчитываемых с помощью выражения (1).

Достоинством модели струны является возможность описывать энергетику неоднородных флуктуаций системы в бесконечномерном конфигурационном пространстве, в том числе коллективные моды. В работе [16] было строго доказано, что среди таких мод в невозмущенной внешней силой системе с потенциалом (2) существуют так называемые кинк-солитоны. Эти своеобразные одномерные квазичастицы играют важную роль также и в динамике слабо возмущаемой системы. Еще ранее в работе [20] то же самое было качественно продемонстрировано путем исследования геометрии бесконечномерного потенциального рельефа (1) для продольных и поперечных мод движения. Далее в настоящей работе относительная роль продольных и поперечных мод будет проиллюстрирована более наглядно на простой двумерной модели в духе метода коллективных мод, заменяющего бесконечное число степеней свободы конечным их числом [21].

Будем измерять  $y$  в единицах  $h$ , а  $x$  в  $d_0 = h(\kappa/U_m)^{1/2}$ . Энергия струны с потенциалом (2) примет вид

$$E\{y(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \frac{1}{2} y'^2(x) + \frac{1}{2} [1 - \cos(2\pi y)] - fy(x) \right\}, \quad (3)$$

где переменные безразмерны:  $E \rightarrow \frac{E}{h\sqrt{\kappa U_m}}$ ,  $f \rightarrow fh/U_m$ . Пусть струна первоначально находится в минимуме потенциала  $U_0(y) - fy$ , отвечающего  $y_0 = \frac{1}{2\pi} \arcsin(f/\pi)$ . Будем далее отсчитывать  $y(x)$  от  $y_0$  и произведем перенормировку потенциала  $U_0(y) - fy$  так, чтобы минимуму отвечала нулевая энергия

$$U(y) \rightarrow U(y) = U_0(y) - fy - U_0(y_0) + fy_0 = \frac{1}{2} \left\{ [1 - (f/\pi)^2]^{1/2} [1 - \cos(2\pi y)] + \frac{f}{2\pi} \sin(2\pi y) \right\} - fy,$$

здесь  $y$  отсчитывается от 0.

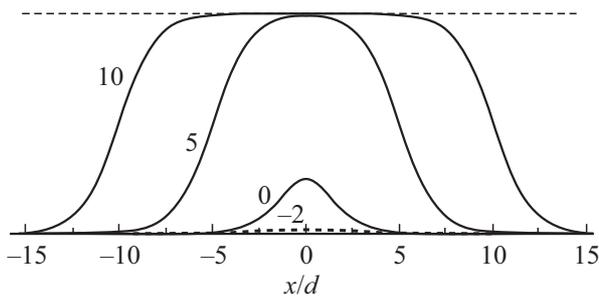
Главной задачей является описание процесса образования зародыша нового состояния, соответствующего наиболее легкому пути преодоления барьера. К отысканию этого пути подойдем вариационным образом, используя для описания конфигураций струны пробную функцию, зависящую от 2 параметров:  $d$  и  $x_0$

$$y(x) = y_0 + \frac{\exp[(x + x_0)/d]}{[1 + \exp[(x - x_0)/d]][1 + \exp[(x + x_0)/d]]} = y_0 + \frac{e \exp(x/d)}{[1 + e_s \exp(x/d) + \exp(2x/d)]}. \quad (4)$$

Здесь и далее  $e = \exp(x_0/d)$ ,  $e_s = e + 1/e$ . Физический смысл параметров проясняется при  $x_0 \rightarrow \infty$ , когда

$$y(x) \rightarrow y_0 + \frac{1}{1 + \exp[(x - x_0)/d]} - \frac{1}{1 + \exp[(x + x_0)/d]},$$

что выглядит как пара кинк-антикинк (см. рис. 1). В этом случае  $x_0/2$  соответствует расстоянию между кинками,



**Рис. 1.** Вид пробной функции  $y(x) - y_0$  при различных значениях параметра  $x_0/d$ , указанных цифрами у кривых. Пунктиром изображена пробная функция при отрицательном значении параметра  $x_0/d = -2$ . Штриховая линия отвечает минимуму потенциального рельефа.

$d$  — ширине кинка. Учитывая эту интерпретацию, будем ради удобства называть  $x_0$  продольной координатой, а  $d$  — поперечной. При малых или отрицательных  $x_0$ , соответствующих небольшим отклонениям струны от первоначального положения, этот наглядный смысл утрачивается, и  $x_0, d$  считаются лишь вариационными параметрами. Выбранная пробная функция (4) дает возможность описывать широкий спектр промежуточных состояний от малых подбарьерных флуктуаций до вполне сформировавшихся зародышей за барьером.

Подставим пробную функцию (4) в функционал энергии (3) для получения двумерного потенциального рельефа  $E(x_0, d)$ . Изменяя масштаб переменной интегрирования и заменяя переменную  $x_0$  на  $e$ , представим  $E(e, d)$  в виде

$$E(e, d) = \frac{e^2}{2d} I_1 + \frac{d}{2} \left\{ [1 - (f/\pi)^2]^{1/2} I_2 - f [2eI_3 - (1/\pi)I_{22}] \right\}. \quad (5)$$

Здесь  $I_1, I_2, I_{22}$  и  $I_3$  — функции одной переменной  $e$ :

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\exp(2x)[1 - \exp(2x)]^2}{[1 + e_s \exp(x) + \exp(2x)]^4} = \frac{1}{e^2} \left( \frac{e^2}{e^2 - 1} \right)^2 \left\{ \frac{1}{3} + \frac{4e^2}{(e^2 - 1)^2} - 4 \frac{e^4 + e^2}{(e^2 - 1)^3} \ln(e) \right\}. \quad (6)$$

При  $e \rightarrow \infty$

$$I_1 \rightarrow \frac{1}{e^2} \left\{ \frac{1}{3} - (4/e^2)[\ln(e) - 7/6] \right\}.$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ 1 - \cos \left[ 2\pi e \frac{\exp(x)}{1 + e_s \exp(x) + \exp(2x)} \right] \right\}. \quad (7)$$

При  $e \rightarrow \infty$

$$I_2 \approx -4\text{ci}(2\pi) + 4\gamma + 4\ln(2\pi) + \{8\pi^2[\text{ci}(2\pi) - \gamma - \ln(2\pi/e) + 1] - 4\pi\text{si}(2\pi)\}/e^2,$$

$\text{ci}(2\pi)$  и  $\text{si}(2\pi)$  — значения интегрального косинуса и интегрального синуса при аргументе  $2\pi$ ,  $\gamma = 0.5772\dots$  — постоянная Эйлера.

$$I_{22} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sin \left[ 2\pi e \frac{\exp(x)}{1 + e_s \exp(x) + \exp(2x)} \right]. \quad (8)$$

При  $e \rightarrow \infty$

$$I_{22} \approx 4\pi [\text{ci}(2\pi) - \gamma - \ln(2\pi/e) + 2\pi\text{si}(2\pi)]/e^2 - (8/9)\pi^3/e^3.$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\exp(x)}{1 + e_s \exp(x) + \exp(2x)} = \frac{1}{\sqrt{e^2 - 4}} \ln \frac{e + \sqrt{e^2 - 4}}{e - \sqrt{e^2 - 4}}. \quad (9)$$

При  $e \rightarrow \infty$

$$I_3 = (2/e) \ln(e)(1 + 1/e^2).$$

С целью найти оптимальный путь преодоления барьера найдем минимум  $E(e, d)$  в (5) по  $d$

$$\frac{\partial E}{\partial d} = -\frac{1}{2d^2} e^2 I_1 + \frac{1}{2} \left\{ [1 - (f/\pi)^2]^{1/2} I_2 - f [2eI_3 - (1/\pi)I_{22}] \right\} = 0,$$

откуда оптимальное  $d$  есть

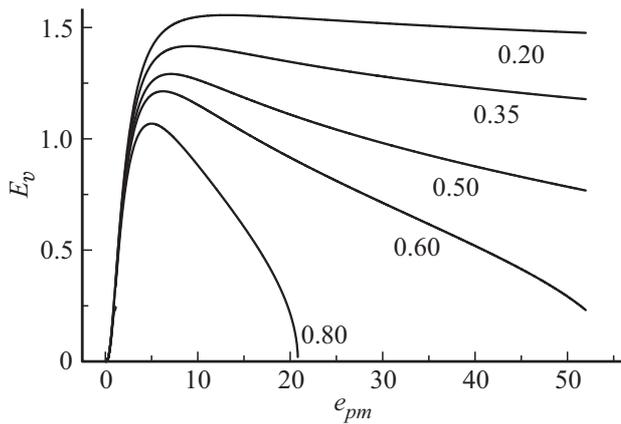
$$d = \left[ \frac{e^2 I_1}{[1 - (f/\pi)^2]^{1/2} I_2 - f [2eI_3 - (1/\pi)I_{22}]} \right]^{1/2}. \quad (10)$$

Подставляя это значение в  $E(e, d)$  (5), находим изменение энергии вдоль координаты  $e$  в долине двумерного рельефа

$$E_v(e) = e \left\{ I_1 [(1 - (f/\pi)^2)^{1/2} I_2 - f (2eI_3 - (1/\pi)I_{22})] \right\}^{1/2}. \quad (11)$$

Эту линию будем называть дном долины потенциального (двумерного) рельефа. При изменении продольной координаты вдоль долины встречается максимум энергии  $E_M$  (см. рис. 2). С точки зрения двумерного рельефа этой точке отвечает перевал или „седло“ с понижением энергии при удалении от нее вдоль одной координаты  $e$  и ростом энергии по другой  $d$ .

При малой движущей силе  $f$  и большом размере оптимальной конфигурации ее верхушке выгодно располагаться вблизи минимума потенциального рельефа, как



**Рис. 2.** Изменение энергии вдоль продольной координаты в долине двумерного энергетического рельефа при различных значениях движущей силы  $f$ , указанных цифрами у кривых. Здесь  $e_{pm} = e$  при  $x_0 > 0$  и  $e_{pm} = 1/e$  при  $x_0 < 0$ .

это иллюстрируется рис. 1. Задача оптимизации пробной функции при этом сводится к нахождению оптимальной формы границ флуктуации и их взаимного расположения. В рассматриваемом случае форма границы, связывающей два соседних минимума потенциала, определяется параметром  $d$ . При достижении им оптимального значения граница превращается в относительно устойчивое образование, которое может рассматриваться как некоторая квазичастица — кинк. Для количественной оценки точности используемого приближения можно сравнить получаемую из уравнения (10) при  $x_0 \rightarrow \infty$ ,  $f \rightarrow 0$  энергию кинка

$$E_k = \frac{1}{2} E_M = \frac{1}{2} \{4/3[-\text{ci}(2\pi) + \gamma + \ln(2\pi)]\}^{1/2} \approx 0.90142 \dots$$

с известным результатом для кинка синус-Гордона  $E_k = 2^{3/2}/\pi \approx 0.900316$  и увидеть, что погрешность составляет всего около 0.1%.

Метод, учитывающий несколько, в простейшем варианте двух коллективных координат, дает возможность найти зависимость частоты туннельного перехода от движущей силы в широком диапазоне ее изменения.

### 3. Туннельный механизм распада метастабильного состояния протяженной системы

В квазиклассическом приближении с экспоненциальной точностью вероятность квантово-механического туннельного преодоления барьера дается выражением

$$\Gamma \approx \exp(-S/\hbar), \quad (12)$$

где  $S$  — действие, вычисляемое вдоль траектории подбарьерного перехода. Для его расчета к потенциальной

энергии струны (1) следует добавить кинетическую энергию

$$T_k = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho}{2} \left[ \frac{\partial y(x, t)}{\partial t} \right]^2. \quad (13)$$

Здесь  $\rho$  — плотность массы на единицу длины системы. Переходя в (13) к безразмерным переменным с использованием в качестве масштаба времени  $\hbar(\rho/U_m)^{1/2}$ , получаем выражение для энергии струны в виде

$$E\{y(x, t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial y(x, t)}{\partial t} \right]^2 + \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial y(x, t)}{\partial x} \right]^2 + \frac{1}{2} [1 - \cos(2\pi y)] - f y(x, t) \right\}. \quad (14)$$

Подставим в (14) пробную функцию (4), считая  $x_0$  и  $d$  зависящими от времени

$$y(x, t) = y_1 + \frac{\exp[(x + x_0(t))/d(t)]}{1 + \{\exp[x_0(t)/d(t)] + \exp[-x_0(t)/d(t)]\} \times \exp[x/d(t)] + \exp[2x/d(t)]}.$$

Получаем кинетическую энергию в виде

$$T_k = \frac{e^2}{2d} I_{kx} x_0^2 + \frac{e^2}{2d} I_{kd} d^2 + I_{kxd} \dot{x}_0 \dot{d}, \quad (15)$$

где

$$I_{kx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(2x) \frac{[1 + \exp(2x) + 2 \cdot 1/e \exp(x)]^2}{[1 + (e + 1/e) \exp(x) + \exp(2x)]^4} = \frac{1}{3} \frac{e^2}{(e^2 - 1)^2} - \frac{8e^4 + 12e^2}{(e^2 - 1)^4} + \frac{4e^6 + 28e^4 + 8e^2}{(e^2 - 1)^5} \ln(e),$$

$$I_{kd} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(2x) \frac{\{(x_0/d)[1 + 2 \exp(x)/e + \exp(2x)] + x[1 - \exp(2x)]\}^2 [1 + 2 \exp(x)/e + \exp(2x)]}{[1 + (e + 1/e) \exp(x) + \exp(2x)]^4},$$

$$I_{kxd} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(2x) \frac{\{(x_0/d)[1 + 2 \exp(x)/e + \exp(2x)] + x[1 - \exp(2x)]\} [1 + 2 \exp(x)/e + \exp(2x)]}{[1 + (e + 1/e) \exp(x) + \exp(2x)]^4}.$$

Эвклидов лагранжиан (с перевернутым потенциалом)  $L = T_k + E(x_0, d)$ , дает возможность стандартным способом рассчитать действие  $S = \int L dt$  решением системы двух уравнений Эйлера–Лагранжа.

#### 4. Активационно-туннельный режим

При конечной температуре в преодолении барьера дают вклад и квантовые, и тепловые флуктуации. Возможен и комбинированный процесс: туннелирование не из основного, а из термически возбужденного состояния системы. Рассмотрим подбарьерное движение с предварительной активацией на некоторую энергию  $E$ . Высота барьера для последующего туннелирования при этом понижается на величину  $E$ , и действие является убывающей функцией энергии преактивации  $S(E)$ .

Вероятность перехода равна произведению вероятности активации на энергию  $E$ , даваемую больцмановским фактором  $\exp(-E/kT)$ , и вероятности туннельного перехода в пониженном на  $E$  барьере, что составляет  $\exp\{-E/kT - S(E)/\hbar\}$ . Оптимальная энергия преактивации соответствует максимуму показателя экспоненты по  $E$  и находится из уравнения

$$\frac{d}{dE} [E/kT + S(E)/\hbar] = 1/kT + \frac{1}{\hbar} \frac{dS}{dE} = 0. \quad (16)$$

Максимально возможное решение этого уравнения при энергии преактивации, равной высоте барьера  $E = E_M$ , отвечает температуре перехода от классического термоактивируемого преодоления барьера к его преодолению с участием квантового туннелирования.

#### 5. Температура смены режимов преодоления барьера

Для изучения перехода с понижением температуры от классического активационного перескока через барьер к преодолению барьера с участием квантово-механического туннелирования следует изучить динамику системы вблизи максимума потенциального рельефа  $E_M$ . Разложим выражения для потенциальной и кинетической энергий по малым отклонениям вблизи точки перевала  $x_M$  и  $d_M$ :  $x_0 \approx x_M + x$ ,  $d \approx d_M + \delta$ . Потенциальная энергия примет вид

$$E(x_0, d) \approx E_M + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial e^2} (e - e_M)^2 + \frac{\partial^2 E}{\partial e \partial d} (e - e_M) \delta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial d^2} \delta^2 \approx E_M + \frac{1}{2} K_x x^2 + K_{xd} x \delta + \frac{1}{2} K_d \delta^2. \quad (17)$$

Здесь

$$K_x = \frac{1}{d_M} \left( I_1 + 2e_M \frac{dI_1}{de} + \frac{e_M^2}{2} \frac{d^2 I_1}{de^2} \right) + \frac{d_M}{2} \left\{ [1 - (f/\pi)^2]^{1/2} \frac{d^2 I_2}{de^2} - f \left[ 4 \frac{dI_3}{de} + 2e_M \frac{d^2 I_3}{de^2} - (1/\pi) \frac{d^2 I_{22}}{de^2} \right] \right\} e_M^2,$$

$$K_{xd} = \left\{ -\frac{e_M}{d_M^2} I_1 - \frac{e_M^2}{2d_M^2} \frac{dI_1}{de} + \frac{1}{2} \left\{ [1 - (f/\pi)^2]^{1/2} \frac{dI_2}{de} - f \left[ 2I_3 + 2e_M \frac{dI_3}{de} - (1/\pi) \frac{dI_{22}}{de} \right] \right\} \right\} e_M,$$

$$K_d = \frac{e_M^2}{d_M^3} I_1.$$

Индекс  $M$  отмечает, что все параметры берутся при своих значениях в точке перевала. Кинетическая энергия будет даваться квадратичной формой

$$T_k = \frac{1}{2} M_x \dot{x}^2 + M_x \dot{x} \dot{\delta} + \frac{1}{2} M_d \dot{\delta}^2. \quad (18)$$

Здесь компоненты анизотропной массы есть

$$M_x = \frac{e_M^2}{d_M} I_{kx}, \quad (19)$$

$$M_{xd} = -\frac{e_M^2}{d_M} [\ln(e_M) I_{kx} + I_{kxd}], \quad (20)$$

$$M_d = \frac{e_M^2}{d_M} [\ln^2(e_M) I_{kx} + 2 \ln(e_M) I_{kxd} + I_{kd}], \quad (21)$$

$$I_{kx} = \int dx e^{2x} \frac{[1 + 2e^x/e + e^{2x}]^2}{[1 + (e + 1/e)e^x + e^{2x}]^4} = \frac{1}{3} \frac{e^2}{(e^2 - 1)^2} - \frac{8e^4 + 12e^2}{(e^2 - 1)^4} + \frac{4e^6 + 28e^4 + 8e^2}{(e^2 - 1)^5} \ln(e), \quad (22)$$

$$I_{kd} = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{2x} \frac{(e^{2x} - 1)^2}{[1 + (e + 1/e)e^x + e^{2x}]^4}, \quad (23)$$

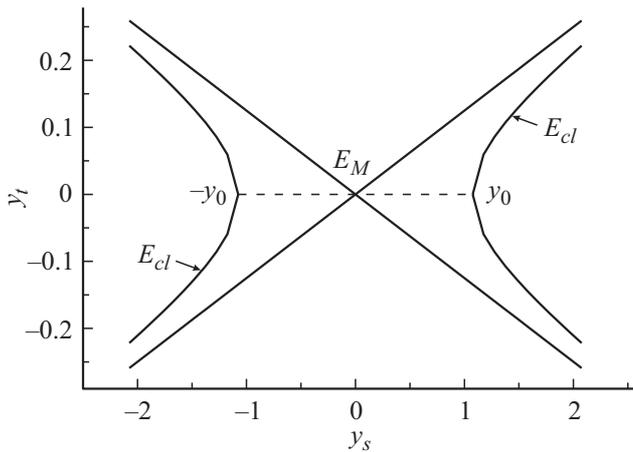
$$I_{kxd} = \int dx x e^{2x} \frac{(1 - e^{2x})[1 + 2e^{2x}/e + e^{2x}]}{[1 + e^x(e + 1/e) + e^{2x}]^4}. \quad (24)$$

Потенциальный рельеф (17) вблизи максимума имеет вид седла с отрицательной кривизной вдоль одного направления (перевального)  $y_s$  и положительной кривизной вдоль другого  $y_t$ , поперечного к перевальному. Этот рельеф иллюстрируется на рис. 3 изображением линий уровня энергии  $E(y_s, y_t) = E_{cl}$ , разделяющих классически доступную  $E(y_s, y_t) < E_{cl}$  и подбарьерную  $E(y_s, y_t) > E_{cl}$  области. Оптимальной траектории преодоления барьера соответствует движение вдоль перевального направления без возбуждения поперечной моды. Минимизируя потенциальную энергию (17), например, по  $\delta$ , получаем, что вдоль перевала  $\delta = -(K_{xd}/K_d)x$ . Подставляя это соотношение в потенциальную и кинетическую энергии (17) и (18) находим, что движение по перевальному направлению описывается уравнением Эйлера–Лагранжа

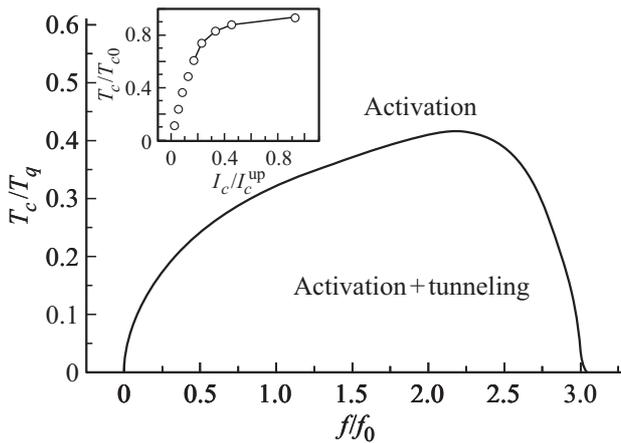
$$\ddot{y}_s = -\omega^2 y_s, \quad (25)$$

где

$$\omega = \left\{ -(K_x - K_{xd}^2/K_d) / [M_x + M_d(K_{xd}/K_d)^2 - 2M_{xd}K_{xd}/K_d] \right\}^{1/2}.$$



**Рис. 3.** Линии уровня энергии вблизи максимума потенциального рельефа. Значения безразмерных параметров:  $f = 0.5$ ;  $E_M = 1.2913 \dots$ ; границы классически доступных областей отвечают энергии преактивации  $E_{cl} = 1$ . Оптимальная траектория туннельного преодоления барьера изображена штриховой линией.



**Рис. 4.** Зависимость от движущей силы температуры смены режимов между классической термоактивацией и активационно-туннельным преодолением барьеров ( $f_0 = U_M/h$ ,  $T_q = \frac{\hbar}{k_B} (U_M/\rho)^{1/2}$ ). На вставке показана экспериментально наблюдаемая в Sn нанопроволоке граница между двумя режимами, один из которых соответствует множественным событиям проскальзывания фазы вследствие термоактивации, а второй соответствует индивидуальным проскальзываниям фазы вследствие квантового туннелирования по перестроенным данным работы [27].

Действие для такого движения легко вычисляется. Интегрирование уравнения (25) дает

$$\frac{1}{2} \dot{y}_s^2 = -\frac{1}{2} \omega^2 y_s^2 + \text{const.} \quad (26)$$

Начальным условиям соответствует старт с нулевой скоростью  $\dot{y}_s = 0$  от границы классически разрешенной области  $y_s = -y_0$  при данной энергии преактивации  $\frac{1}{2} \omega^2 y_0^2 = E_M - E_{cl} = \Delta E$ .

Отсюда  $\text{const} = \Delta E = \frac{1}{2} \omega^2 y_0^2$  и уравнение (26) принимает вид

$$\frac{1}{2} \dot{y}_s^2 = \frac{1}{2} \omega^2 (y_0^2 - y_s^2). \quad (27)$$

Действие для движения по полупериоду  $t_{tr}$ , вычисляемое с использованием уравнения (27), есть

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} S &= \int_0^{t_{tr}} dt \left( \frac{1}{2} \dot{y}_s^2 + \Delta E - \frac{1}{2} \omega^2 y_s^2 \right) \\ &= \omega \int_{-y_0}^{y_0} dy (y_0^2 - y^2)^{1/2} = \frac{\pi}{2} (2\Delta E)/\omega. \end{aligned} \quad (28)$$

Решение уравнения для энергии преактивации (16) существует лишь при  $T_q/T > \min \left| \frac{dS}{dE} \right| = 2\pi/\omega$  в соответствии с известными результатами [20,22] для фазового перехода второго рода. Отметим, что в работах [23–26] дано более полное описание переходной области и рассмотрены варианты перехода первого рода. Итак, температура появления туннельного вклада есть

$$\begin{aligned} T_c &= \omega/2\pi = \frac{1}{2^{3/2}\pi} \left\{ -(K_x - K_{xd}^2/K_d) / \right. \\ &\quad \left. [M_x + M_d(K_{xd}/K_d)^2 - 2M_{xd}K_{xd}/K_d] \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (29)$$

Результат рассчитанной с помощью этого выражения зависимости температуры перехода от движущей силы  $f$  изображен на рис. 4. Представленная картина может служить фазовой диаграммой областей с различными механизмами динамики протяженных квазиодномерных систем. На вставке показан измеренный в работе [27] участок такой диаграммы для Sn нанопроволоки, демонстрирующий качественное подобие с начальным участком теоретической кривой. Укажем для наглядности количественные параметры, сходные с имеющими место в многочисленных других материалах [8]: диаметр нанопроволоки  $20 \text{ nm} \approx (1/10)\xi$ ,  $\xi$  — длина когерентности объемного олова,  $T_{c0} \approx 4.1 \text{ K}$  — температура свехпроводящего перехода,  $I_c^{up} \approx 17 \mu\text{A}$  — критический ток проволоки при самой низкой температуре эксперимента  $0.47 \text{ K}$ ,  $I_{c0} \approx 9.5 \mu\text{A}$  — ток перехода к индивидуальным проскальзываниям фазы при этой же температуре.

## 6. Заключение

В работе изучен переход с понижением температуры от классического термоактивационного механизма движения протяженной системы через потенциальные барьеры к движению с участием квантово-механического туннелирования. Ранее такой переход изучался, в частности, в работе [28] и для области низких значений движущей силы  $f$  была найдена зависимость температуры перехода  $T_c \propto f^{1/2}$ . Ранее в работе [20] было установлено, что для любого протяженного (не только гармонического) потенциального рельефа, при движущей

силе, приближающейся к критическому значению  $f_c$ , температура перехода ведет себя как  $T_c \propto (f_c - f)^{1/4}$ . В этих двух случаях область проявления квантовых эффектов довольно ограничена. В настоящей работе рассчитана зависимость температуры перехода  $T_c$  от внешней нагрузки в широком интервале ее изменения, в том числе в той области, в которой  $T_c$  существенно возрастает с увеличением нагрузки. Этот факт обосновывает расширение доступной экспериментальному наблюдению области проявления низкотемпературных квантовых эффектов в динамике протяженных систем различной природы.

Обнаруженная в области низких температур  $\sim 1$  К атермичность пластичности ряда материалов интерпретируется как переход к квантово-механическому туннелированию дислокаций в рельефе Пайерлса. В обычных металлах квантовые эффекты заметны в области нагрузок близких к критическому напряжению, так называемому напряжению Пайерлса  $\tau_p$ , когда барьеры значительно скомпенсированы. Так, например, при движении дислокаций по системе скольжения (100)(010) в  $\beta$ -Sn, согласно данным работы [29] критическое напряжение составляет  $\tau_p = 1.2 \cdot 10^7$  Па, температура перехода  $T_c = 3.3$  К при напряжении  $\tau_p - \tau \approx 10^6$  Па. Наблюдение подобных эффектов при промежуточных нагрузках, к которым относится расчет настоящей работы, в большей степени возможно в так называемых квантовых кристаллах, таких как твердый гелий [30,31], LiH [32] (с интерпретацией в [33]) и ряд других [4].

Дополнительный интерес к изучению границы смены режимов придает различная зависимость динамики протяженных систем от движущей силы в классической активационной и квантовой температурной областях. В известных случаях в квантовой области такая зависимость сильнее [20,28,34]. Этот факт имеет значение для управления динамикой флюксонов в барьерных структурах в качестве единиц информации (кубитов) [35–37]. При использовании токонесущих сверхпроводящих нанопроволок в качестве однофотонных детекторов [8] усиление протекающего в них тока приводит к повышению их чувствительности. В то же время соответствующее понижение барьера для ухода из метастабильного состояния увеличивает вероятность флуктуационного срабатывания детектора вследствие фоновых процессов проскальзывания фазы и образования так называемых „темных пятен“ (dark spots). Для отыскания компромисса может быть полезна рассчитанная в настоящей работе фазовая диаграмма различных механизмов распада метастабильных состояний квазиодномерных наносистом.

## Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] One-Dimensional Nanostructures / Ed. Z.M. Wang. Springer, N.Y. (2007).
- [2] C. Coulon, V. Pianet, M. Urdampilleta, R. Clérac. Single-chain magnets and related systems. In: Molecular Nanomagnets and Related Phenomena. Springer, Berlin, Heidelberg (2014). 143 p.
- [3] Exploring the Quantum/classical Frontier: Recent Advances in Macroscopic Quantum Phenomena / Eds J.R. Friedman, S. Han. Nova Science Publishers, Inc. (2003).
- [4] C. Cazorla, J. Boronat. Rev. Mod. Phys. **89**, 035003 (2017).
- [5] Б.В. Петухов. Динамика дислокаций в кристаллическом рельефе. Дислокационные кинки и пластичность кристаллических материалов. Lambert Academic Publishing, Saarbrücken (2016). 385 с.
- [6] R.D. Parmentier. Solitons and long Josephson junctions. In: The new superconducting electronics. Springer, Dordrecht (1993). 221 p.
- [7] P. Monceau. Adv. Phys. **61**, 325 (2012).
- [8] F. Altomare, A.M. Chang. One-dimensional superconductivity in nanowires. John Wiley & Sons (2013).
- [9] Я.С. Лехтинен, Б.Г. Львов, К.Ю. Арутюнов. ФТТ **60**, 2096 (2018).
- [10] В.В. Добровицкий, А.К. Звездин, А.Ф. Попков. УФН **166**, 439 (1996).
- [11] В.В. Махро. ФТТ **40**, 1855 (1998).
- [12] D. Gatteschi, A. Vindigni. Single-Chain Magnets. In: Molecular Magnets. Physics and Applications/Eds Ju. Bartolomé, F. Luis, J.F. Fernández. Springer Heidelberg, N.Y., Dordrecht, London (2014). 191 p.
- [13] А.В. Савин, О.И. Савина. ФТТ **62**, 1968 (2020).
- [14] 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).
- [15] Y.S. Kivshar, B.A. Malomed. Dynamics of solitons in nearly integrable systems. Rev. Mod. Phys. **61**, 763 (1989).
- [16] D.W. McLaughlin, A.C. Scott. Perturbation analysis of fluxon dynamics. Phys. Rev. A **18**, 1652 (1978).
- [17] M.J. Rice. Phys. Rev. B **28**, 3587 (1983).
- [18] J. Cuevas-Maraver, P.G. Kevrekidis, F. Williams. The sine-Gordon model and its applications. From Pendula and Josephson Junctions to Gravity and High-Energy Physics. Nonlinear Systems and Complexity. Springer, Switzerland (2014).
- [19] A. Bezryadin. Superconductivity in Nanowires: Fabrication and Quantum Transport. John Wiley & Sons (2013).
- [20] Б.В. Петухов, В.Л. Покровский. ЖЭТФ **63**, 634 (1972).
- [21] P.G. Kevrekidis, J. Cuevas-Maraver. A Dynamical Perspective on the  $\phi^4$  model. Past, present and future. Nonlinear Systems and Complexity, 26. Springer Nature, Switzerland AG (2019).
- [22] A.I. Larkin, Yu.N. Ovchinnikov. J. Stat. Phys. **41** 425 (1985).
- [23] E.M. Chudnovsky. Phase transitions in the problem of the decay of a metastable state. Phys. Rev. A **46**, 8011 (1992).
- [24] E.M. Chudnovsky, D.A. Garanin. Phys. Rev. Lett. **79**, 4469 (1997).
- [25] D.A. Gorokhov, G. Blatter. Phys. Rev. B **56**, 3130 (1997).
- [26] M.A. Skvortsov. Phys. Rev. B **55**, 515 (1997).
- [27] M. Tian, J. Wang, J.S. Kurtz, Y. Liu, T.S. Mayer, T.E. Malouk, M.H.W. Chan. Phys. Rev. B **71** 104521 (2005).
- [28] B.I. Ivlev, V.I. Mel'nikov. Phys. Rev. B **36**, 6889 (1987).

- [29] В.Д. Нацик, В.П. Солдатов, Г.И. Кириченко, Л.Г. Иванченко. ФНТ **32**, 1566 (2006).
- [30] Л.А. Алексеева, Д.Н. Казаков. ФТТ **49**, 2005 (2007).
- [31] A. Lisunov, V. Maidanov, V. Rubanskyi, S. Rubets, E. Rudavskii, S. Smirnov, V. Zhuchkov. Phys. Rev. B **92**, 140505(R) (2015).
- [32] T. Kataoka, T. Yamada. In: Dislocations in Solid / Ed. H. Suzuki, T. Ninomiya, K. Sumino, S. Takeuchi. University of Tokyo Press (1985). 165 p.
- [33] B.V. Petukhov, H. Koizumi, T. Suzuki. Phil. Mag. A **77**, 1041 (1998).
- [34] L.M. Toma, R. Lescouëzec, J. Pasán, C. Ruiz-Pérez, J. Vaissermann, J. Cano, R. Carrasco, W. Wernsdorfer, F. Lloret, M. Julve. J. Amer. Chem. Soc. **128**, 4842 (2006).
- [35] K.K. Likharev. Phys. C **482**, 6 (2012).
- [36] R.D. Parmentier. Solitons and Long Josephson Junctions. Dordrecht: Springer Netherlands (1993). 221 p.
- [37] J. Kunert, O. Brandel, S. Linzen, O. Wetzstein, H. Toepfer, T. Ortlepp, H.G. Meyer. IEEE Trans. Appl. Supercond. **23**, 1101707 (2013).

*Редактор Т.Н. Василевская*