

УДК 536.97:538.977

## ЭФФЕКТИВНАЯ СКОРОСТЬ ДВИЖЕНИЯ ДОМЕННОЙ СТЕНКИ В 1D-НАНОСИСТЕМЕ ПРИ МНОЖЕСТВЕННОМ РОЖДЕНИИ ДОМЕНОВ НА АКТИВНЫХ ЦЕНТРАХ

© 2019 г. Б. В. Петухов\*

Федеральное государственное учреждение “Федеральный научно-исследовательский центр  
“Кристаллография и фотоника” Российской академии наук”, Москва, Россия

\*E-mail: [petukhov@ns.crys.ras.ru](mailto:petukhov@ns.crys.ras.ru)

Поступила в редакцию 10.01.2019 г.

После доработки 13.05.2019 г.

Принята к публикации 27.06.2019 г.

Процессы переключения состояний играют важную роль в управлении наноустройствами и свойствами многих квазиодномерных объектов в физике, химии и биологии. В работе рассматривается распространение фронта переключения состояния от границы образца с поглощением рождающихся доменов новой фазы на активных центрах в объеме. Решается соответствующая статистико-кинетическая задача с расчетом производящей функции распределения положений границы краевого домена, с помощью которой вычисляются средние величины “эстафетных” пробега.

DOI: 10.1134/S0367676519100223

### ВВЕДЕНИЕ

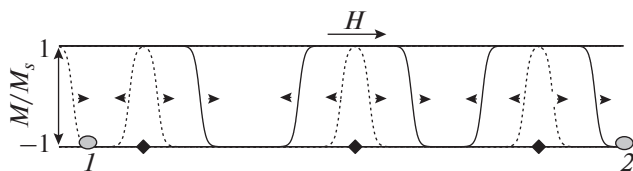
При изменении внешних условий состояние многих систем часто становится неоптимальным и может сохраняться лишь как метастабильное при наличии барьера для перехода в более предпочтительное состояние [1, 2]. Все же из-за флуктуаций исходное состояние распадается и имеет конечное время жизни. В достаточно совершенных протяженных системах распад осуществляется посредством спонтанного рождения локальных зародышей или, иначе, доменов нового состояния, их разрастания и слияния, как это описывается статистической теорией Колмогорова–Мела–Джонсона [3, 4]. Похожая ситуация имеет место и при наличии дефектов, служащих активными центрами зарождения доменов [5].

В ограниченных системах определяющий вклад в кинетику переключения состояния может давать зарождение домена на границах материала с последующим распространением его на весь образец. Такую ситуацию описывает хорошо развитая теория движения фронтов состояний [6, 7], описывающая широкий круг явлений от распространения пламени или генетических мутаций до движения цивилизационных границ и т. п. В более общей ситуации имеет место конкуренция между вкладами гетерогенного и гомогенного зарождения доменов. Например, взаимодействию между фронтом состояния, возникающего или искусственно создаваемого на границе системы с флуктуационными доменами нового состояния в

объеме, уделяется большое внимание при изучении распространения сигналов в линиях передач [8]. Цель настоящей работы – расчет статистических характеристик кинетики переключения состояний протяженных квазиодномерных систем при совместном действии гетерогенного и гомогенного механизмов возникновения доменов новой фазы.

### 1. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

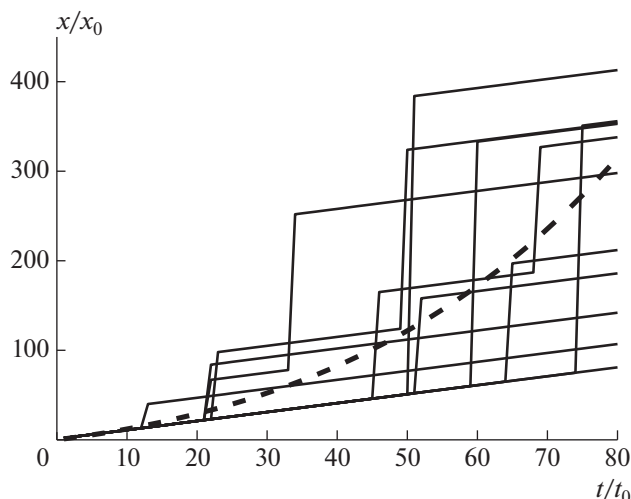
Рассматривается одномерная система, поддерживаемая в однородном состоянии. Для наглядности можно представлять себе цепочку спинов, ориентированных магнитным полем в одном направлении. Затем изменение внешних условий в момент времени  $t = 0$  приводит к возникновению иного, более предпочтительного состояния, которое, однако, отделено от исходного барьером, отсутствующим лишь на границе системы. В используемом наглядном примере магнитное поле меняет знак, но сцепление каждого спина с двумя соседями препятствует их мгновенному перевороту. На границе это сцепление слабее и граничный спин переворачивается относительно быстро. Для примыкающего спина силы сцепления с соседями компенсируют друг друга, а магнитное поле вынуждает к перевороту с подстраиванием под новое направление. Последовательные перевороты соседних спинов приводят к образованию



**Рис. 1.** Схема эксперимента по исследованию движения доменной границы, введенной на левом конце образца, между измерительными катушками, расположенными в позициях 1 и 2.  $H$  — переключаемое поле,  $M$  — намагниченность,  $M_s$  — намагниченность насыщения. Символы обозначают активные центры, на которых зарождаются домены новой фазы. Штриховые линии — начальное состояние, сплошные линии — конфигурация доменов спустя какое-то время с учетом поглощения фронтом переключения состояния домена новой фазы, образованного на ближайшем активном центре.

краевого домена с перемещающейся в глубь образца доменной стенкой.

Возвращаясь к общему типу квазиодномерных систем, будем характеризовать перемещение доменной стенки некоторой скоростью  $v$ . Кинетике перемещения фронтов при наличии флуктуаций или шумов уделялось много внимания [9]. Рассчитывались как детерминистический вклад в перемещение границы, так и более тонкие эффекты диффузионного типа. В настоящей работе рассматривается случай относительно небольшой плотности центров зарождения объемных доменов, так что длины пробегов доменных стенок велики, и детерминистические вклады преобладают. На той стадии процесса, когда начинаются столкновения фронта с объемными доменами, коалесценция доменов дает определяющий вклад в разброс положений фронта переключения, и диффузионные вклады в смещения доменных стенок можно не учитывать. Это приближение соответствует теориям Колмогорова и др. [3–5], в которые также закладывается постоянная скорость движения доменных границ. Вопрос, который мы изучаем, заключается в том, как на расширение краевого домена влияют флуктуации, приводящие к спонтанному образованию доменов нового состояния в глубине протяженной системы на случайно расположенных активных центрах. В роли таких активных центров могут выступать определенного типа локальные дефекты, хаотически распределенные с некоторой средней плотностью  $I$  на единицу длины системы. Для простоты и наглядности рассматривается полубесконечная система, условно расположенная горизонтально с одной границей, находящейся на левом краю ( $x = 0$ ), как это изображено на рис. 1. Пространственно-временная картина развития нового состояния в бесконечной системе детально изучалась в работах [10–12], и мы воспользуемся некоторыми полученными там результатами.



**Рис. 2.** Зависимость от времени длины пробега фронта переключения состояния. Ломаные линии — результат моделирования для различных конкретных случайных расположений дефектов, гладкая штриховая линия — средняя длина пробега ( $x_0 = 1/I$  — среднее расстояние между дефектами,  $t_0 = 1/vI$ ).

Будем называть доменную стенку, наследующую границу краевого домена, возможно после коалесценции с объемными доменами, фронтом переключения состояния. Ввиду случайного расположения центров зарождения доменов новой фазы перемещение фронта переключения с учетом коалесценции доменов представляет собой стохастический процесс, как это иллюстрируется результатами моделирования методом клеточных автоматов на рис. 2. Этот процесс должен, вообще говоря, характеризоваться некоторой функцией распределения  $p_b(x, t)$  — вероятностью нахождения границы в момент  $t$  в интервале между  $x$  и  $x + dx$ .

В имеющихся публикациях большое внимание уделялось расчетам кинетики размеров доменов новой фазы в неограниченной среде на единицу длины системы, характеризуемой плотностью вероятности  $g(x, t)$  [10–12]. Отметим, что минимальное смещение границы ко времени  $t$  есть  $vt$ , поэтому  $p_b(x, t) = 0$  при  $x < vt$ . Аналогично, минимальный размер домена новой фазы, растущего в две стороны, есть  $2vt$ , поэтому  $g(x, t) = 0$  при  $x < 2vt$ . В настоящей работе рассматривается полубесконечная среда с существенным вкладом границы в переключение состояния.

## 2. КИНЕТИКА ПЕРЕМЕЩЕНИЯ ФРОНТА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Вероятность домену, растущему от границы образца, к моменту времени  $t$  не столкнуться с объемным доменом и иметь невозмущенную длину пробега  $vt$  равна вероятности отсутствия активного центра на расстоянии суммарного пробе-

га двух доменных стенок  $2vt$ . При хаотическом распределении центров эта вероятность есть  $\exp(-2vIt)$ . Соответственно, в плотности вероятности положения фронта переключения состояния имеется сингулярный вклад  $\exp(-2vIt)\delta(x - vt)$ . Получаем, что несингулярная составляющая вероятности положения фронта при  $x > vt$ , возникающая в результате столкновений с объемными доменами, удовлетворяет условию нормировки  $\int_{vt}^{\infty} dx' p_b(x', t) = 1 - \exp(-2vIt)$ . Для плотности вероятности  $p_b(x, t)$  краевой доменной стенке быть в момент  $t$  в интервале  $dx$  можно написать кинетическое уравнение

$$\frac{\partial p_b(x, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial p_b(x, t)}{\partial x} - 2v I p_b(x, t) + v \exp(2vIt) \int_{vt}^x dx' g(x - x', t) p_b(x', t) + 2v g(x - vt, t). \quad (1)$$

Первое слагаемое в правой части (1) описывает расширение краевого домена, второе слагаемое представляет уход домена данного размера в большие размеры из-за столкновений с объемными доменами, интеграл описывает образование домена данного размера вследствие коалесценции краевого и объемного доменов меньших размеров. Последнее слагаемое представляет вклад от единственного столкновения первоначального краевого домена, находящегося в точке  $x_0 = vt$ , с объемным. Здесь  $g(x, t)$  – плотность объемных доменов нового состояния с размерами от  $x$  до  $x + dx$ . Начальное условие есть  $p_b(x, t = 0) = 0$ . Граничное условие  $p_b(x = 0, t) = I \exp(-2vIt)$  получается из условия баланса в результате интегрирования уравнения (1) по всем допустимым значениям  $x$ . Очевидно также, что  $p_b(x, t) = 0$ , если  $x$  меньше детерминированного предела  $vt$  распространения краевого домена ко времени  $t$ .

Заменим в уравнении (1)  $x$  на  $x_1 = x - vt$  и преобразуем его по Лапласу

$$\frac{dp_b(p, t)}{dt} = 2vI \exp(-2vIt) + v \exp(2vIt) p_b(p, t) g(p, t) + v g(p, t). \quad (2)$$

Решение ищем в виде

$$p_b(p, t) = C \exp \left[ -2vIt + 2v \int_0^t dt' \exp(2vIt') g(p, t') \right],$$

где  $C(p, t)$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{dC}{dt} = 2v g(p, t) \exp \left[ 2vIt - 2v \int_0^t dt' \exp(2vIt') g(p, t') \right],$$

Используя полученное в [12] выражение для  $g(p, t)$  – лапласовского образа от  $g(x, t)$

$$g(p, t) = \frac{(p + I) \exp(-2vIt)}{1 + (p/I) \exp(2vIt)},$$

находим

$$p(x, t) = \exp(-2vIt) \times \left\{ I \theta(x) \sum_{n=1}^{[x/2vt]} \frac{1}{\gamma^n} \frac{(x - 2vtn)^{n-1}}{(n-1)!} + I \sum_{n=1}^{[x/2vt]} \frac{1}{\gamma^n} \frac{(x - 2vtn)^n}{n!} \right\}. \quad (3)$$

### 3. СРЕДНЯЯ ДЛИНА ПРОБЕГА ФРОНТА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Полученное решение для  $p_b(p, t)$  является производящей функцией для нахождения различных моментов случайных пробегов фронта переключения состояния системы. Вычислим с ее помощью среднее смещение фронта переключения состояния, распространяющегося от границы системы

Вклад в среднее смещение от доли не претерпевших столкновений фронтов есть

$$\langle x_0 \rangle = \int_0^{\infty} dx x \exp(-2vIt) \delta(x - vt) = vt \exp(-2vIt). \quad (4)$$

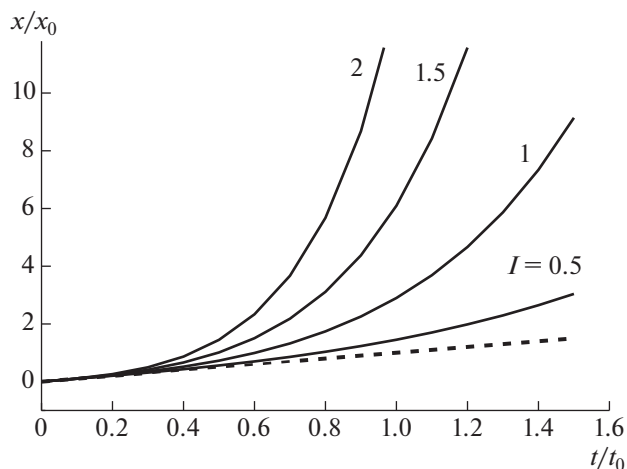
Вклад претерпевших столкновения фронтов выражается через рассчитанную производящую функцию  $p_b(p, t)$  как

$$\langle x_+ \rangle = \int_{vt}^{\infty} dx x p_b(x, t) = vt [1 - \exp(-2vIt)] - \left. \frac{dp_{b0}(p, t)}{dp} \right|_{p=0} = vt [1 - \exp(-2vIt)] + \frac{1}{2I} [\exp(2vIt) + \exp(-2vIt)] - \frac{1}{I}. \quad (5)$$

Таким образом, полное среднее смещение фронтов есть

$$\langle x \rangle = \langle x_+ \rangle + \langle x_0 \rangle = vt + \frac{1}{2I} [\exp(2vIt) + \exp(-2vIt)] - \frac{1}{I}. \quad (6)$$

При малом времени  $\langle x \rangle \approx vt$ , при большом  $t$   $\langle x \rangle \approx \frac{1}{2I} \exp(2vIt)$ . Общее поведение длин пробегов в зависимости от времени для различных плотностей активных центров зарождения доменов нового состояния иллюстрирует рис. 3. Наглядно видно, как зарождение доменов новой фазы в объеме материала повышает длины пробега фронта, что, соответственно, уменьшает время переключения состояния системы.



**Рис. 3.** Зависимость средней длины пробега фронта переключения состояния от времени для различных концентраций центров зарождения доменов  $I$ , указанных цифрами у кривых (условные единицы),  $x_0 = 1/I$ ,  $t_0 = 1/vI$ . Штриховая линия отвечает свободному распространению фронта в отсутствие активных центров.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный расчет показал, что переключение состояний квазиодномерных систем может быть значительно ускорено в условиях наличия активных центров зарождения дополнительных доменов новой фазы. Это может быть полезным в приложениях для повышения быстродействия наноустройств записи и хранения информации. Такой цели, как показывают эксперименты, могут служить определенные дефекты материала.

Качественное объяснение наблюдаемому повышению эффективной скорости переключения состояний может дать предложенный в работе [13] “тандемный” механизм движения доменной стенки. Модельный вариант подобного механизма с передачей “эстафеты” положения фронта переключения при столкновениях с доменами, образующимися в объеме материала, рассчитан в настоящей работе. Близкий по духу эффект влияния нелинейных возмущений, возникающих перед движущейся доменной границей и приводящих к возрастанию скорости перемещения фронта, изучался в многочисленных рабо-

тах, посвященных так называемому стохастическому резонансу. Это контринтуитивное явление заключается в том, что увеличение уровня непредсказуемых флуктуаций, например, хаотического шума, вызывает повышение качества прохождения сигнала, а не понижение (см. обзоры в [9, 14]). Обсуждаются интересные перспективы для приложений стохастического резонанса в биологии, в частности, при передаче нервных импульсов. В то же время наблюдаемая существенная стохастичность кинетики переключения состояний для надежной расшифровки лежащих в основе механизмов требует получения значительного объема статистических данных, чтобы сделать возможным количественное сопоставление с теоретическими моделями, принимающими во внимание неупорядоченность исследуемых материалов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Кристиан Д.* Теория превращений в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978. 806 с.
2. *Atay F.M.* Complex Time-Delay Systems. Theory and Applications. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2010.
3. *Колмогоров А.Н.* // Изв. АН СССР. Сер. мат. 1937. Т. 3. № 1. С. 355.
4. *Johnson W.A., Mehl P.A.* // Trans. AIMME. 1939. V. 135. № 11. P. 416.
5. *Avramy M.* // J. Chem. Phys. V. 7. № 12. P. 1103.
6. *Mikhailov A.S., Schimansky-Geier L., Ebeling W.* // Phys. Lett. A. 1983. V. 96. № 9. P. 453.
7. *Fort J., Pujol T.* // Rep. Progr. Phys. 2008. V. 71. № 8. Art. № 086001.
8. *Löcher M., Cigna D., Hunt E.R.* // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. № 23. P. 5212.
9. *Garcfa-Ojalvo J., Sancho J.M.* Noise in Spatially Extended Systems. New York: Springer Science + Business Media, 1999.
10. *Sekimoto K.* // Phys. 1984. V. 128. № 1–2. P. 132.
11. *Sekimoto K.* // Phys. A. 1984. V. 125. № 1. P. 261.
12. *Ben-Naim E., Krapivsky P.L.* // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. № 4. P. 3562.
13. *Ipatov M., Zhukova V., Zvezdin A.K., Zhukov A.* // J. Appl. Phys. 2009. V. 106. № 10. Art. № 103902.
14. *McDonnell M.D., Abbott D.* // PLoS Computational Biol. 2009. V. 5. № 5. Art. № e1000348.