

ОДНОМЕРНАЯ СВЕРХРЕШЕТКА ИЗ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ НА РЕКОНСТРУИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

Н.В. Фомин

Произведено объединение двух различных подходов, предлагавшихся ранее в качестве обобщения модели Френкеля и Конторовой для сверхструктур на кристаллической поверхности, образованных рядами из дополнительных атомов или вакансий (т. е. дислокациями, выведенными на поверхность). Во-первых, это допущение флуктуаций при конечной температуре, когда дислокации могут испытывать небольшие изгибы, но не могут пересекаться, во-вторых, учет взаимодействия между дислокациями вследствие упругих деформаций от них в объеме кристалла. Суперпозиция этих двух механизмов неаддитивна и дает нетривиальный результат.

Предметом исследования в этой статье являются сверхструктуры на поверхности кристаллов, возникающие при адсорбции на них тонких пленок из инородного материала или при реконструкции их поверхностей. Причиной фазового перехода от свободной поверхности с периодом структуры, равным объемному кристаллическому, к сверхструктуре с периодом несоизмерным и часто много большим служит поверхностное натяжение, возникающее из-за рассогласования «собственных» периодов подложки и адсорбата (в случае реконструкции поверхности роль адсорбированных атомов могут играть собственные поверхностные атомы с оборванными связями).

Изящная математическая модель такого фазового перехода была предложена Френкелем и Конторовой [1] (ФК) и Франком и Ван дер Мерве [2] (континуальная версия модели ФК). В этой одномерной модели подложка заменяется жесткой гребенкой — косинус потенциалом для атомов адсорбата, в свою очередь упруго взаимодействующих между собой. Функционал плотности энергии системы на единицу площади поверхности имеет вид

$$F = \frac{1}{d^2} \int \left[V_a (u' - \delta)^2 - V_b \left(1 - \cos \frac{2\pi u}{a} \right) \right] dy, \quad (1)$$

где координата y задана вдоль поверхности, $u(y)$ — смещения атомов адсорбата относительно минимумов гребенки, штрихом обозначена производная, a — период гребенки, $\delta = \Delta a/a$ — рассогласование «собственных» периодов, V_a и V_b — энергетические параметры, определяющие взаимодействие атомов адсорбата между собой и с подложкой соответственно. Уравнением Эйлера—Лагранжа для F является уравнение синус-Гордона

$$\frac{2\pi}{d} u'' = \frac{1}{a^2} \sin \left(\frac{2\pi u}{a} \right), \quad d = \frac{a}{2\pi} \sqrt{V_a/V_b}. \quad (2)$$

Его периодические решения описывают несоизмерную фазу. Переход в несоизмерную фазу происходит в том случае, если функционал энергии (1) на решении (2) принимает отрицательное значение (т. е. энергия пони-

жаются по отношению к нулевому значению в соразмерной фазе). В окрестности точки фазового перехода (задаваемой для определенности параметром δ), когда период сверхструктуры $l \gg d$ — размера солитона, решение представляет собою решетку из солитонов, каждый из которых описывается функцией

$$u(y) = \frac{2a}{\pi} \arctg \exp[(y - y_0)/d], \quad (3)$$

где y — положение центра солитона. В изложенной модели эта область экспоненциально мала по параметру l/d из-за экспоненциально слабого перекрытия хвостов солитонов. В дальнейшем рядом авторов было показано, что в реальной ситуации следует ожидать более сильного взаимодействия между дефектами, спадающего по степенному закону.

Первый цикл работ, начатый Покровским и Талаповым [3] (ПТ), был связан с двумерным обобщением модели Френкеля и Конторовой [1]. При этом солитоны перестают быть строго прямолинейными (вдоль координаты x , не присутствующей в модели ФК), а могут изгибаться, но не пересекаться. В предположении малости изгибов при преимущественной ориентации всех солитонов в одном направлении (вдоль координаты x) энтропийный вклад в свободную энергию задается выражением

$$F_T = -T \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\ln Z(y_1(x), \dots, y_n(x), x)}{x \ln}, \quad (4)$$

где статсумма Z для системы из n солитонов, начинающихся в точках $y_i(0)$ и заканчивающихся в точках $y_i(x)$, определяется интегралом по конфигурационному пространству всех траекторий $y_1 < y_2 < \dots < y_n$:

$$Z(y_1, \dots, y_n, x) = \int D[y] \exp \left[-\frac{\varepsilon_{\text{cor}}}{2Ta} \sum_i \int_0^x (y_i')^2 dx \right], \quad (5)$$

а ε_{cor} — энергия кора солитона (области сильных деформаций) длины a ; в модели ФК [1]

$$\varepsilon_{\text{cor}} = 2\pi \sqrt{V_a V_b}. \quad (6)$$

Варьированием по x можно из (5) вывести дифференциальное уравнение для Z так же, как это делается в фейнмановском подходе при выводе уравнения Шредингера из интеграла по траекториям [4], однако координата x при этом играет роль мнимого времени

$$\frac{aT}{\varepsilon_{\text{cor}}} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 Z(y_1, \dots, y_n, x)}{\partial y_i^2} = \frac{\partial Z}{\partial x}. \quad (7)$$

В пределе (4) «выживает» лишь состояние с минимальным спектральным параметром $q = q_F$, где q определяет зависимость от x ,

$$Z(y_1, \dots, y_n, x) = \sum_q Z_q(y_1, \dots, y_n) \exp(-qx). \quad (8)$$

Таким образом, мы приходим к задаче, аналогичной задаче определения энергии основного состояния системы невзаимодействующих фермионов.

Действительно, запрет на пересечения солитонов можно учесть, выбирая функцию Z в виде

$$Z_q(y_1, \dots, y_n) = \begin{vmatrix} Z_{i_1}(y_1), \dots, Z_{i_1}(y_n) \\ \dots, \dots, \dots \\ Z_{i_n}(y_1), \dots, Z_{i_n}(y_n) \end{vmatrix}, \quad (9)$$

аналогичном детерминанту Слэттера для многочастичной фермионной волновой функции, составленной из одночастичных состояний $Z_k(y)$.

Тогда, учитывая, что $Z_k(y) = \sin(ky)$ и переходя в (7) от суммирования к интегрированию, получаем

$$q_F = \frac{L_y T a}{\pi \epsilon_{\text{cor}}} \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{a \ln k_F^3}{3\pi} \frac{T}{\epsilon_{\text{cor}}}, \quad (10)$$

где $k_F = \frac{n\pi}{nl} = \frac{\pi}{l}$. Подстановка q_F в (4) приводит к результату

$$F_{\text{int}} = \frac{\pi^2 T^2}{3\epsilon_{\text{cor}}} \frac{a}{l^3}. \quad (11)$$

Другим важным наблюдением, впервые высказанным в [5] и позволяющим установить степенное взаимодействие поверхностных линейных дефектов, был учет перекрывающихся полей упругой деформации в подложке (объеме кристалла). Как было показано в [6, 7], парная энергия взаимодействия двух параллельных поверхностных дефектов в случае упруго-изотропного кристалла определяется выражением

$$\epsilon_{\text{int}} = \frac{2}{\pi} \frac{1 - \sigma^2}{E l^2} P^2 a^3, \quad (12)$$

где E — модуль Юнга, σ — коэффициент Пуассона, σ_{ij} — тензор напряжений, а $Pa = \int y \sigma_{yz}(y) dy$ — дипольный момент силы дефекта. Для солитона в модели ФК [6]

$$Pa = \frac{2V_a}{\pi a}, \quad \epsilon_{\text{int}} = \frac{8V_a^2}{\pi^3} \frac{1 - \sigma^2}{E a l^2}, \quad (13)$$

что дает следующий вклад в энергию системы

$$F_{\text{int}} = \frac{\epsilon_{\text{int}}}{l} = \frac{8V_a^2}{\pi^3} \frac{1 - \sigma^2}{a^3 E} \frac{a}{l^3}. \quad (14)$$

В этой работе решается задача одновременного учета вклада в энергию взаимодействия как от изгибов дефектов, так и от деформаций в объеме.

Одномерная решетка поверхностных линейных дефектов на упругой подложке при конечной температуре

Естественно обобщить модель ПТ [4] на случай дефектов, взаимодействующих на расстоянии. Предполагая, что как и прежде, малость изгибов (т. е. $y' \ll 1$), взаимодействие дефектов по продольной координате x можно считать локальным и описывать функцией $V(y_1, \dots, y_n, x)$. После этого выражение для статсуммы (5) следует заменить на

$$Z = \int D[y] \exp \left\{ -\frac{1}{Ta} \int_0^x \left[\frac{\epsilon_{\text{cor}}}{2} \sum_{i=1}^n (y_i')^2 + V(y_1, \dots, y_n, x) \right] dx \right\}. \quad (15)$$

Варьирование по x приводит к уравнению Шредингера с мнимым временем, но теперь «частицы» взаимодействуют посредством потенциала V [4]

$$\frac{Ta}{\epsilon_{\text{cor}}} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 Z}{\partial y_i^2} - \frac{VZ}{Ta} = \frac{\partial Z}{\partial x}. \quad (16)$$

В пределе $T \gg V/q_F$ добавленное взаимодействие несущественно, и справедливо решение, приведенное Покровским и Талаповым (11). Рассмотрим противоположную асимптотику, когда температурные флуктуации невелики и можно ограничиться гармоническим приближением, записав

$$V_i(y_1, \dots, y_n) = \sum \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial y_i^2} (y_{i+1} - y_i - l)^2 = \sum \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \epsilon_{\text{int}}}{\partial l^2} (y_{i+1} - y_i - l)^2. \quad (17)$$

После подстановки этого потенциала в (16), мы получаем уравнение Шредингера (с мнимым временем) для одномерной цепочки с гармоническим взаимодействием между ближайшими соседями. Возбужденные состояния такой системы — фононы — хорошо известны из теории твердого тела [8]. Таким образом, если система невзаимодействующих солитонов была аналогична системе свободных фермионов, и минимальный спектральный параметр q_F имел смысл энергии Ферми, то теперь мы имеем фононный спектр с минимальным параметром, соответствующим энергии нулевых колебаний

$$q_0 = \left[\frac{\partial^2 \varepsilon_{int}}{2\partial l^2} \frac{1}{\varepsilon_{cor}} \right]^{1/2} = \left[\frac{1 - \sigma^2}{\pi E} \frac{6P^2 a^3}{L^4 \varepsilon_{cor}} \right]^{1/2}. \quad (18)$$

Соответственно для плотности свободной энергии получаем

$$F_{int} = F_0 + F_F = \frac{\varepsilon_{int}}{la} + \frac{q_0}{l} T. \quad (19)$$

Обратим внимание на то, что квадратичная зависимость от температуры в теории ПТ (формула (11)) в рассмотренном пределе меняется на линейную.

Условие применимости использованного нами гармонического приближения (17) состоит в том, что среднее смещение дефектов относительно положений равновесия y_0 много меньше расстояния между дефектами. Выраженное через параметры задачи оно имеет вид

$$\left[\frac{y_0}{l} \right]^4 = \left[\frac{F_T}{F_0} \right]^2 = \frac{T^2}{\varepsilon_{cor} \varepsilon_{int}} \frac{a^2}{l^2} \ll 1. \quad (20)$$

В модели ФК, согласно (6) и (12), это условие записывается:

$$\frac{\pi T^2 E a}{8(1 - \sigma^2) V_a^2 \sqrt{V_a V_b}} \ll 1. \quad (21)$$

В проведенном нами рассмотрении температурный вклад F_T во взаимодействие является малой поправкой к энергии основного состояния F_0 . Однако полученный результат можно использовать в качестве оценки условий, при которых он начинает играть существенную роль, а именно это происходит, когда неравенство (20) приближается к равенству. В случае сильной связи поверхностных атомов между собой и с подложкой, когда V_a и V_b порядка характерной электронной энергии (1 эВ), температурная поправка к энергии взаимодействия дефектов имеет порядок T (эВ), и для реальных температур мала. При достаточно слабом взаимодействии поверхностных атомов между собой и с подложкой неравенство (21) перестает выполняться, флуктуации нарастают, и при определении свободной энергии необходимо учитывать ангармонизм.

Возникновение обсуждаемых нами структур на поверхности может быть описано в рамках общей теории фазовых переходов второго рода Гинзбурга—Ландау. Роль параметра порядка в данном случае играет линейная концентрация дефектов $n=1/l$. Разложение свободной энергии по n имеет вид

$$F = F_1 + F_{int} = -\alpha n + \beta n^3, \quad (22)$$

где, согласно (12), (18) и (19),

$$\beta = \left[\frac{1 - \sigma^2}{\pi E} \frac{6P^2 a^3}{\varepsilon_{cor}} \right]^{1/2} T + \frac{8V_a^2}{\pi^3} \frac{1 - \sigma^2}{a^3 E}, \quad (23)$$

а α в точке фазового перехода принимает нулевое значение. Минимизируя F по n , определяем период структуры

$$l = (3\beta/\alpha)^{1/2}. \quad (24)$$

Таким образом, рассмотренное нами взаимодействие между дефектами дает вклад в температурную зависимость периода структуры от температуры.

Итак, мы рассмотрели одномерную сверхрешетку на поверхности кристалла, образованную линейными дефектами типа дислокаций и учли одновременно вклад в энергию взаимодействия дефектов как от полей упругих деформаций в кристалле, так и от их изгибов и перемещений вследствие флуктуаций. Свободная энергия такой системы может быть выражена через параметр «энергия основного состояния» дифференциального уравнения (14), аналогичного уравнению Шредингера с мнимым временем для одномерной системы фермионов. Мы нашли явный вид низкотемпературной асимптотики для свободной энергии (формула (19)).

Список литературы

- [1] Френкель Я. И., Конторова А. А. // ЖЭТФ. 1938. Т. 8. № 1. С. 89—95.
- [2] Frank F. C., Van der Merwe J. H. // Proc. Roy. Soc. London. 1949. V. 198. P. 205—216.
- [3] Покровский В. Л., Талапов А. Л. // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. С. 269—293.
- [4] Фейнман Р. Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Наука, 1982. С. 187—675.
- [5] Cordon R., Villian S. // J. Phys. C. 1979. V. 6. P. L151—L154.
- [6] Соинин Э. Б., Фомин Н. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 4. С. 1219—1221.
- [7] Марченко В. И., Паршин А. Я. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. № 7. С. 257—260.
- [8] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Физматгиз, 1963.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
16 марта 1990 г.
В окончательной редакции
16 июля 1990 г.