

АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

На правах рукописи

ЗЕЛЕНСКАЯ Ирина Ильинична

УДК 539.211

**СТРУКТУРА И ПЕРЕНОС ЭЛЕМЕНТАРНЫХ  
ВОЗБУЖДЕНИЙ В ЦЕПОЧКЕ  
АДСОРБИРОВАННЫХ АТОМОВ  
В НЕЛОКАЛЬНОЙ МОДЕЛИ  
ФРЕНКЕЛЯ-КОНТОРОВОЙ**

Специальность 01.04.07 — физика твердого тела

Автореферат  
диссертации на соискание  
ученой степени  
кандидата физико-математических наук

КИЕВ—1993



00778915 (.)

Робота виконана в Інституті ф

**Научний керівник:**

Доктор фізико-математических наук О.М.Браун

**Офіційні опоненти:**

Доктор фізико-математических наук професор Э.А.Пашвішкі

Доктор фізико-математических наук А.С.Ковалев

**Ведущая організація :**

Інститут теоретической фізики АН України

Защита состоится "17" июня 1993 г. в 15 час. на заседании  
Спеціалізованного Ученого Совета Д 016.04.01 при Інституті фізики АН  
України по адресу: 252028, г.Киев, Проспект Науки 46, Спеціалізований  
Совет при ИФ АН України

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Інститута фізики АН  
України

Автореферат разослан "17" мая 1993 г.

Учений секретарь

Спеціалізованного Совета

кандидат фіз.-мат.наук Ищук В.А.

ЛННБ ім. В. Стефаніка  
АН України

## 1.1 Актуальность темы.

В последнее время исследование нелинейных явлений в пленках, адсорбированных на кристаллических поверхностях, вызывает все возрастающий интерес. Например, хорошо известны эксперименты по исследованию поверхностной диффузии металлов на металлических подложках, демонстрирующие важную роль коллективного движения адатомов.

Одним из частных случаев адсорбции на поверхности является квазиодномерная пленка. Такие пленки встречаются, например, при адсорбции на ступенчатых (вицинальных) поверхностях полупроводников и на "бороздчатых" гранях металлов. В этих случаях пленки можно рассматривать как состоящие из квазинезависимых цепочек адсорбированных атомов (адатомов). Существующие теоретические модели имеют ограничения, не позволяющие расширить круг описываемых адсорбционных систем (адсистем). Например, часто используемая модель решеточного газа, предполагает, что, во-первых, тепловая энергия системы должна быть намного меньше энергии активации диффузии одиночного атома  $E_A$ , а во-вторых, взаимодействие между адсорбированными частицами предполагается очень слабым, так что атомы локализируются лишь в определенных адсорбционных местах. Такая модель может быть использована только для описания систем с адсорбцией газов и, следовательно, она неприменима для адсистем металл-металл, где энергия взаимодействия между адатомами порядка энергии активации одиночного атома.

В последнем случае необходима модель, позволяющая бы адсорбированным атомам двигаться более или менее свободно вдоль поверхности. Такую возможность дает известная модель Френкеля-Конторовой, описывающая поведение одномерной гармонической цепочки атомов, помещенной во внешний периодический потенциал. В случае адсистем роль периодического потенциала играет потенциальный рельеф подложки. Эта модель является практически единственной, позволяющей аккуратно описать согласованное движение частиц и тем самым объяснить некоторые диффузионные характеристики. В длинноволновом пределе возбуждения в модели Френкеля-Конторовой (ФК) описываются известным нелинейным дифференциальным уравнением - синус-уравнением Гордона (SG).

С теоретической точки зрения актуальность проблемы заключается в необходимости исследования нелинейных моделей, описывающих динамику адсорбированных пленок с учетом реальных законов взаимодействия между атомами.

С практической точки зрения результаты исследования нелинейных моделей, типа рассматриваемой в настоящей работе, важны для выяснения механизмов поверхностной диффузии, роста кристаллов, катализа, и т.д.

Изучение поверхностной диффузии адчастиц имеет большое значение для микроэлектроники (например, для описания процесса старения микросхем), эмиссионной электроники, технологии выращивания монокристаллов, гетерогенного катализа (поверхностная диффузия является одной из стадий каталитической реакции), пайки, сварки, порошковой металлургии (процессы растекания и спекания), коррозии металлов. Более того, явление поверхностной диффузии интересно с общезначимой точки зрения, так как диффузия происходит в двумерном слое (а на анизотропной подложке - в квазидвумерных каналах), причем относительная концентрация адчастиц может меняться в широком диапазоне ( $\theta = 0 - 1$ ), так что адпленка проходит через множество различных структур. Кроме этого, изученная модель используется для описания дислокаций в твердых телах, плоских доменных стенок в магнитных материалах, вихрей в длинных джозефсоновских контактах, волн зарядовой плотности в квазидвумерных проводниках.

## 1.2 Цель работы

Целью работы является аналитическое и численное исследование статических и динамических характеристик цепочки ангармонически взаимодействующих адсорбированных атомов в рамках обобщенной модели Френкеля-Конторовой.

## 1.3 Научная новизна

Научная новизна заключается в том, что в работе впервые:

- Вычислены параметры кинков и антикинков (эффективная масса  $m$  и амплитуда рельефа Пайерлса  $E_p$ ) в модели ФК с ангармоническим взаимодействием.
- Определен закон взаимодействия кинков в модели ФК с экспоненциальным и дальним (степенным) взаимодействием между атомами для покрытий  $\theta = 1$  ( $\theta$  - отношение числа атомов к числу минимумов внешнего потенциала).

- Вычислена зависимость  $m$  и  $E_p$  от степени покрытия.
- Найлены параметры связанных пар кинк-антикинк (бризеров) большой амплитуды в нелокальной модели ФК.
- Используя феноменологический подход проведена оценка коэффициента химической диффузии системы.

#### 1.4 Защищаемые положения

На защиту выносятся следующие положения:

- Изучено поведение одномерной цепочки адатомов в модели ФК с учетом ангармонизма взаимодействия между ними и показано, что учет ангармонизма приводит к различию параметров кинка и антикинка.
- Выведено интегро-дифференциальное уравнение движения, описывающее динамику цепочки ФК в континуальном приближении, и найден закон взаимодействия кинков.
- Рассчитана зависимость высоты рельефа Пайерлса  $E_p$  и эффективной массы  $m$  от концентрации адатомов  $\theta$  и показано, что функции  $E_p(\theta)$  и  $m(\theta)$  испытывают скачки при каждом рациональном покрытии  $\theta$ , т.е. имеют вид обратной "чертовой лестницы".

#### 1.5 Апробация работы

Результаты работы докладывались на Рабочем совещании "Теория солитонов и приложения" (Юрмала, 1986), 7-й Всесоюзной конференции по росту кристаллов (Москва, 1988), 6-м Международном симпозиуме "Континуальные модели и дискретные системы" (Дижон, 1989), 2-й Всесоюзной конференции "Поверхность - 89" (Черноголовка, 1989), Международной конференции "Фононы - 89" (Хейдельбург, 1989), 4-й Международной рабочей школе по нелинейным и турбулентным процессам в физике (Киев, 1989), Международной конференции "Нелинейная наука: следующее десятилетие" (Лос-Аламос, 1990), Международной рабочей школе по физике конденсированного состояния, атомной и молекулярной физике (Триест, 1990), 21-й Всесоюзной конференции по эмиссионной электронике (Ленинград, 1990), Международной школе "Фазовые переходы и релаксация в системах с конкурирующими энергиями" (Гейло, 1993).

## 1.6 Публикации

Основной материал диссертации изложен в 5 печатных работах, опубликованных в советских и зарубежных журналах.

## 1.7 Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы из 126 наименований.

# 2 Содержание диссертации

---

## 2.1 Введение

Во введении дана общая характеристика диссертации, краткие содержания всех глав работы, обсуждена ее актуальность и сформулирована цель. Здесь также обосновано применение одномерной модели Френкеля-Контаровой к описанию такого физического явления, как поверхностная диффузия в адсорбированных пленках.

## 2.2 Первая глава

В первой главе проведен обзор литературы, посвященной теоретическим представлениям о модели ФК. Здесь рассмотрена классическая цепочка ФК, которая в континуальном пределе описывается хорошо известным уравнением SG, характеризующим распространение волны в присутствии "захватывающего" потенциала

$$\ddot{u} - u' + \sin u = 0,$$

где  $u$  - смещение атома из минимума потенциального рельефа. Известно, что решением уравнения SG является суперпозиция элементарных возбуждений - кинков, "бризеров" и фононов (линейных волн). Решение типа кинка имеет вид

$$u = 4 \arctg \left[ \exp \left[ \frac{\pm (x - vt)}{a_0} \right] \right], \text{ где } v - \text{скорость кинка, } a_0 - \text{ширина кинка.}$$

В разделе 1.3 диссертации рассмотрен случай учета дискретности цепочки, что необходимо при рассмотрении адсорбции на кристаллических поверхностях. Тогда свободное движение кинка, соответствующее континуальному уравнению SG, заменяется его движением в периодическом потенциальном рельефе Пайерлса-Набарро. Двигаясь в рельефе Пайерлса, кинк периодически

изменяет свои параметры, его ширина уменьшается по сравнению с континуальным кинком и выражается формулой

$$d = d_0 \left[ 1 - \frac{h^2}{12(1-v^2)^{(3/2)}} \right],$$

где  $d_0$  - ширина SG кинка,  $h = \partial_S \omega_0 / c_0$ ,  $c_0$  - скорость звука,  $\omega_0$  - частота колебаний атомов в минимуме потенциального рельефа,  $\partial_S$  - период внешнего потенциала. По мере уменьшения ширины кинка происходит его радиационное торможение с последующим пиннингом, т.е. кинки не могут распространяться свободно, как в непрерывной системе.

В разделе 1.4 исследовано изменение характеристик кинка при нарушении синусоидальности потенциала подложки. Учет несинусоидальной формы внешнего потенциала приводит к изменению параметров кинка. Используя форму внешнего потенциала, предложенную Нейгаром и Ремуасе

$$V_S = \frac{1}{2} \cdot \varepsilon_A \cdot \frac{(1-r^2)[1 - \cos(2\pi N' \partial_S)]}{[1 + r^2 + 2r \cos(2\pi N' \partial_S)],}$$

где  $|r| < 1$ , в континуальном приближении отклонение формы внешнего потенциала  $V_S(x)$  от синусоидальной приводит к изменению формы кинка и его эффективной массы и к резкому возрастанию высоты рельефа Пайерлса.

Раздел 1.5 диссертации посвящен влиянию ангармонического взаимодействия между ближайшими соседями в цепочке ФК. Из рассмотренных работ следует, что учет ангармонизма приводит к сужению кинка по сравнению с антикинком, что не характерно для гармонической цепочки ФК. Кроме этого в случае учета ангармонизма кинк приобретает большую, чем антикинк, эффективную массу.

## 2.3 Вторая глава

Во второй главе проведено численное исследование нелокальной модели ФК с подробным описанием модели и методики вычислений.

Раздел 2.1 посвящен описанию используемой модели, приведен гамильтониан с учетом разного типа взаимодействия между атомами, а именно: экспоненциальный  $V(x) = V_0 \exp[-\beta(|N' \partial_S| - 1)]$  (где  $\beta$  - параметр нелинейности), моделирующий "прямое" взаимодействие между адсорбированными атомами и степенной  $V(x) = V_0 |N' \partial_S|^n$ ,  $n \geq 1$ , учитывающий дальний характер взаимодействия частиц между собой. Поведение частиц, адсорбированных на металлической подложке моделировалось с по-

мощью степенного типа взаимодействия: при  $n = 3$  - диполь-дипольное и кулоновское - на полупроводниковой подложке при  $n = 1$ .

Дано определение кинка (антикинка) как минимально возможного топологически устойчивого сжатия (растяжения) соизмеримой структуры атомов. Приведены примеры кинка (антикинка) для покрытия  $\theta = 1$  (кинку соответствует лишний атом, антикинку - вакансия) и для более сложных структур, а также метод определения параметров кинка (антикинка), его эффективной массы  $m$  и высоты рельефа Пайерлса. Эффективная масса кинка рассчитывалась по формуле

$$m = m_A \sum_k \left( \frac{\partial u_k}{\partial x} \right)^2$$

где  $m_A$  - масса адсорбированного атома, а  $u_k = u_k - u_k^{(0)}$  - смещение атома относительно минимума потенциального рельефа, а амплитуда рельефа Пайерлса определялась как разность между энергией системы  $E(x)$  и ее минимальным значением  $E(0)$  (основным состоянием системы).

Учет далекодействующего характера взаимодействия между атомами приводит к дальнему взаимодействию и между кинками.

Модель имела следующие независимые параметры:

концентрацию исходного покрытия  $\theta_0$ , на фоне которой изучалось движение кинков,

амплитуду и характер взаимодействия (экспоненциальный или степенной) между атомами,

при изучении взаимодействия между кинками вводилась величина  $Q$  определяющая расстояние  $x$  между кинками,  $x = Qa$ , где  $a = q/a_s$ ,

параметр  $q$ , характеризующий форму периодического рельефа подложки.

Методика расчета адиабатического движения кинка представлена в разделе 2.2, где стационарное состояние системы находилось из решения системы уравнений

$$\frac{\partial V(x_1, \dots, x_N)}{\partial x_1} = 0,$$

в которой  $V(x_1, \dots, x_N)$  - потенциальная энергия системы. В работе использовался подход, состоящий в решении уравнений движения:

$$m_A \ddot{x}_1 = - \frac{\partial V}{\partial x_1} - \eta m_A \dot{x}_1.$$

в которые введена сила трения  $F_t = -\eta m_A \dot{X}$ , где  $F_t$  - сила тормозящая движение атомов,  $\eta$  - коэффициент трения.

В результате расчета были получены следующие характеристики кинков: потенциальный рельеф Пайерлса  $E_p$  и его параметры амплитуда и параметр  $L_p$ , введенный по аналогии с параметром  $L$ , входящим в формулу Пейрара-Ремуасне:

эффективная масса кинка  $m(K)$ , являющейся функцией координаты кинка  $X$

энергия образования пары кинк-антикинк  $E_{pair}$

энергия взаимодействия кинков.

В следующем разделе (2.3) приведены основные результаты численного моделирования, которые показывают, что с учетом ангармонизма взаимодействия между атомами (например, для экспоненциального типа взаимодействия) происходит нарушение симметрии между кинком и антикинком, которая присуща классической модели ФК с гармоническим потенциалом взаимодействия частиц. Причем, по мере увеличения параметра нелинейности  $\beta$  "расщепление" характеристик увеличивается. Аналогичные кривые получены и для других типов взаимодействия атомов - кулоновского и диполь-дипольного, а также для диполь-дипольного взаимодействия при разных покрытиях  $\theta = \rho/\sigma$ , имеющих простую ( $\rho = 1$ ) и сложную ( $\rho > 1$ ) элементарную ячейку (где  $\rho$  - число атомов в элементарной ячейке,  $\sigma$  - размер элементарной ячейки). По мере увеличения числа атомов в элементарной ячейке "расщепление" характеристик  $E_p(L)$  и  $m(L)$  убывает, поскольку взаимодействие между элементарными ячейками обуславливает некомплементарность характеристик кинка и антикинка.

Зависимости  $E_p(L)$  и  $m(L)$  изменяются, если учесть несинусоидальность рельефа подложки, т.е. отклонение параметра  $L$  (параметр, характеризующий несинусоидальность рельефа) в формуле Пейрара и Ремуасне для внешнего потенциала от нуля. Для  $L > 0$  максимум потенциальной энергии системы всегда соответствует такой конфигурации в расположении атомов цепочки когда "лишний атом находится на вершине" одного из максимумов внешнего потенциального рельефа, а минимум - конфигурации "два атома, расположенных симметрично в одном минимуме" потенциального рельефа. А для случая  $L < 0$  расположения атомов, соответствующие максимальному и

минимальному значению потенциальной энергии системы меняются местами и функция  $E_p(l)$  становится немонотонной.

И, наконец, зависимости параметров кинка и антикинка от степени покрытия  $\theta$  для диполь-дипольного взаимодействия, например,  $E_p(\theta)$  и  $m(\theta)$ , имеют вид обратной "чертовой лестницы".

## 2.4 Третья глава

В третьей главе проведено аналитическое исследование обобщенной модели ФК. Первый раздел этой главы рассматривает случай слабой связи, когда  $V_0 \ll E_A$  (где  $V_0$  - энергия взаимодействия атомов, занимающих соседние адсорбционные места). Интересно, что в этом приближении эффективная масса кинка,  $m$ , энергия рождения пары кинк-антикинк,  $E_{\text{pair}}$ , а также разница амплитуд рельефа Пайерлса для кинка и антикинка,  $\delta E_p$ , зависят только от размера элементарной ячейки  $a$ .

Другой предельный случай,  $V_0 \gg E_A$ , т.е. приближение сильной связи, описан во втором разделе. В этом приближении, когда относительные смещения атомов цепочки малы, можно использовать континуальное приближение. Однако, континуальное приближение может быть введено лишь для простой элементарной ячейки. Поэтому аналитическое рассмотрение проводилось лишь для систем с покрытием  $\theta = 1/a$ .

Было учтено два типа взаимодействия атомов цепочки: экспоненциальный и степенной. В случае экспоненциального взаимодействия модель сводилась к локальной, а для степенного взаимодействия - к нелокальной.

В локальной модели поведение системы описывалось уравнением типа SG 
$$\psi + \sin \psi - \psi' (1 - \alpha \psi') = 0,$$
 однако с поправкой

$$\alpha = - (a/\sigma) [ V''(\sigma) / V'(\sigma) ].$$

В этом случае, также как и в приближении слабой связи, учет ангармонизма приводил к тому, что  $\delta E_p \neq 0$ .

Таким образом, полученные результаты аналитического рассмотрения говорят о том, что учет ангармонизма взаимодействия атомов в цепочке ФК приводит к расщеплению параметров кинка и антикинка, а  $E_{\text{pair}}$  и  $\delta E_p$  определяются взаимодействием между элементарными ячейками исходной структуры, а не взаимодействием между ближайшими атомами.

Поэтому, чем сложнее элементарная ячейка (т.е., чем больше  $\rho$  и  $\phi$ , тем больше ее размеры и тем меньше взаимодействие между элементарными ячейками и, следовательно, тем меньше  $\epsilon_{pair}$  и  $\delta E_p$ .

Рассмотрению нелокальной модели в приближении сильной связи посвящен следующий раздел диссертации.

В случае степенного потенциала межатоминого взаимодействия континуальный предел приводит к интегродифференциальному уравнению:

$$\ddot{u} - u'' + \sin u - A \frac{\partial}{\partial x(x')} \int \frac{dx'}{(x')^n} [u'(x+x') + u'(x-x')] = 0$$

(где  $a/d = \hbar \mathcal{P}_0$ ), которое описывает динамику цепочки с нелокальным взаимодействием амплитудой  $A = (a/d)^{(n-1)}/n(n+1)$ . Аналитическое решение интегродифференциального уравнения найти сложно. Это можно сделать лишь численно. Однако, оказалось, что статическое решение этого уравнения типа кинка всегда существует, а его асимптотика является степенной  $u(x) \approx 2\pi n A / |x|^{n+1}$ ,  $x \rightarrow \infty$  что существенно отличается от асимптотики SG кинка, которая экспоненциальна ( $u(x) \approx \exp(-x/d)$ ).

Степенная асимптотика обуславливает также степенной характер взаимодействия кинков в системе с нелокальным взаимодействием частиц, что подробнее рассмотрено в следующем, четвертом, разделе.

Действительно, если рассматривать кинки на фоне соизмеримой структуры с  $\theta = 1$ , то они представляют собой лишние атомы. Мы же предполагаем, что атомы в нашей модели взаимодействуют по степенному (дальнодействующему) закону. Следовательно, таким же образом должны взаимодействовать и кинки. Однако, то обстоятельство, что кинки являются "мягкими" квазичастицами, приводит к изменению их формы при их взаимодействии и, следовательно, к вкладу в энергию системы, т.е. возникает дополнительное взаимодействие между кинками, т.е.  $V_{in}(x) = V_{in}^{(0)}(x) + V_{in}^{(1)}(x)$ . Таким образом, учет дальнего характера взаимодействия частиц приводит к тому, что закон взаимодействия кинков обуславливается вкладами от двух механизмов:

$$\text{дальнодействия } V_{in}^{(0)}(x) = \tilde{V}_0 |x|^n; \quad \tilde{V}_0 = V_0 / q^{n+2} \text{ и}$$

перекрывания их "хвостов"  $V_{in}^{(1)}(x) \approx |x|^{-(n+2)}$ . Это существенно отличается от взаимодействия кинков, для которых допущение взаимодействия

ближайших соседей приводит к тому, что  $\psi_{in}^{(0)}(x) = 0$ , а перекрытие "хвостов" носит экспоненциальный характер:  $\psi_{in}^{(1)}(x) \approx \exp(-x/\sigma)$ .

В результате, с учетом дипольного взаимодействия ( $n = 3$ ) установлено, что взаимодействие кинков определяется законом:  $\Delta E_{\sigma}(Q) \approx Q^{-5}$ , а для кулоновского потенциала ( $n = 1$ ) получена зависимость  $\Delta E_{\sigma}(Q) \approx \exp(-\gamma Q)$ , где  $Q$  определяет расстояние между кинками. Таким образом, взаимодействие между кинками меняет форму кинка и его характеристики - эффективную массу и высоту рельефа Пайерлса. Однако, расчет показал, что эти изменения малы для  $\zeta \approx -5$ , поэтому ими можно пренебречь.

Кроме того, были оценены амплитуда  $M_{\max}$  и энергия бризера  $E_{\text{breather}}$  (связанной пары кинк-антикинк) большой амплитуды. Оказалось, что в этом случае  $M_{\max} \approx \omega^{2/(n+2)}$  больше амплитуды бризера SG, которая пропорциональна  $|\ln \omega|$  (где  $\omega$  - частота внутренних колебаний бризера), а энергия такого бризера  $E_{\text{breather}} \approx \omega^{2n/(n+2)}$  меньше энергии SG бризера, которая пропорциональна  $\omega^2$ .

Следовательно, поведение системы в случае с простой элементарной ячейкой ( $\theta = 1/q$ ) в приближении сильной связи будет описываться интегрированным дифференциальным уравнением. К сожалению, для структур со сложной элементарной ячейкой ( $\theta = p/q$ ,  $p \neq 1$ ) мы получим систему интегрированных дифференциальных уравнений, что значительно усложнит поиск решения.

Для упрощения описания системы использовалась процедура перенормировки. Эта операция позволяет приближенно преобразовать структуру со сложной элементарной ячейкой (например, с  $\theta_0 = 4/3$ ) в структуру кинков с простой элементарной ячейкой (например, с  $\theta_k = 1/3$ ). Полученную структуру кинков  $\theta_k$  можно также рассматривать как цепочку ФК, однако, роль атомов в ней будут выполнять кинки (которые можно рассматривать как квазичастицы), взаимодействующие по закону взаимодействия кинков и помещенные во внешний периодический потенциал Пайерлса-Набарро с амплитудой  $E_p$ , меньшей, чем амплитуда исходного потенциала  $E_A$ . В такой цепочке кинков возможны возбуждения в виде суперкинков и суперантикинков со своими характерными параметрами. Процедура перенормировки может быть повторена столько раз сколько это будет необходимо.

Численные расчеты совместно с процедурой "перенормировки" позволили построить зависимость высоты рельефа Пайерлса  $E_P$  от концентрации адатомов  $\theta$  при постоянном параметре  $V_0$  степенного закона взаимодействия адатомов, которая имеет вид обратной "чертовой лестницы".

## 2.5 Четвертая глава

Все описанные выше результаты относятся к статическим характеристикам кинков при нулевой температуре. Нам же интересны диффузионные характеристики адсорбированного слоя, для описания которых важны динамические характеристики при ненулевой температуре. Этим вопросам и посвящена четвертая глава настоящей диссертации, которая называется "Массоперенос в цепочке Френкеля-Конгоровой".

В первом разделе этой главы (4.1) вводятся определения (в зависимости от изучаемого процесса) трех различных коэффициентов диффузии: коэффициента самодиффузии и коэффициентов коллективной и химической диффузии. Для системы взаимодействующих частиц эти три коэффициента не совпадают. Таким образом:

коэффициент самодиффузии

$$D_s = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \int_0^{\infty} \langle \dot{y}_j(t) \dot{y}_j(0) \rangle dt,$$

т.е. он определяет среднеквадратичное смещение выделенного атома за длительный промежуток времени:  $\langle [y_j(t) - y_j(0)]^2 \rangle \approx 2D_s t, t \rightarrow \infty$ ;

коэффициент коллективной диффузии

$$D_\mu = D_s + \frac{1}{N} \sum_{j \neq j'} \int_0^{\infty} \langle \dot{y}_j(t) \dot{y}_{j'}(0) \rangle dt,$$

который описывает диффузию центра масс системы  $\langle [Y(t) - Y(0)]^2 \rangle \approx 2D_\mu t, t \rightarrow \infty$  где  $Y$  - координата центра масс;

коэффициент химической диффузии

$$D_c = D_\mu / \chi,$$

где  $\chi$  - статическая восприимчивость системы. Коэффициент  $D_c$  определяет атомный поток  $J$  в неравновесном состоянии, когда концентрация атомов отклоняется от равновесной величины  $n$

$$\langle J \rangle = -D_c \frac{\partial}{\partial x} \langle n(x) \rangle$$

Очевидно, что для расчета коэффициента диффузии необходимо получить корреляционную функцию системы при ненулевой температуре. Описание же системы при ненулевой температуре требует учета энергообмена между подложкой и цепочкой атомов. Динамика системы в этом случае будет описываться не уравнениями движения Ньютона, а уравнениями Ланжевена.

В простейшем случае, когда в системе находится один кинк, систему уравнений движения для атомов удастся свести к уравнению типа Ланжевена для кинка

$$m\ddot{X} + m\eta\dot{X} + V'_{PN}(X) = \delta F(t)$$

$$\langle \delta F(t)\delta F(t') \rangle = 2\eta m k_B T \delta(t-t')$$

где  $X$  - координата кинка,  $m$  - его масса,  $\eta$  - коэффициент трения для кинка,  $V_{PN}$  - потенциальная энергия Пайерлса-Набарро для кинка,  $\delta F$  - флуктуирующая случайная сила, действующая со стороны термостата на кинк. Решение этого уравнения описывает диффузионное движение кинка с коэффициентом диффузии  $D_K$ , который определяется с помощью теории Крамерса.

Важную роль в процессе массопереноса играет восприимчивость системы. Статическая восприимчивость системы может быть определена с помощью одного из следующих выражений

$$\chi = \left[ \frac{N}{k_B T} \left( \frac{\partial \mu}{\partial N} \right)_{T,P} - k_B T \left( \frac{\partial N}{\partial P} \right)_{T,\mu} \right]^{-1}$$

где  $\mu$  - химический потенциал,  $P$  - давление. Восприимчивость характеризует "порядок" в системе, поскольку  $\chi = 0$  для упорядоченного состояния (для одномерных моделей при  $T = 0$ ) и  $\chi = 1$  в состоянии полного разупорядочения (например, при  $T \rightarrow \infty$ ).

Используя идеологию идеального газа кинков основное состояние системы при ненулевой температуре можно рассматривать как исходную структуру атомов с небольшим числом термически возбужденных пар кинк-антикинк. Температурная зависимость  $\chi(T)$  для простых структур с  $\theta = 1/g$  в интервале температур  $k_B \ll \epsilon_K$  экспоненциально возрастает и по мере роста стремится к асимптотическому выражению. С помощью процесса

перенормировки можно описать температурную зависимость для более сложных структур с  $\rho \neq 1$ ,  $q = 1$ . Рассматривая систему ФК как иерархию последовательно плавающих решеток суперкинков, температурный интервал  $0 \leq T < E_k$  можно разделить на субинтервалы, где более сложная структура уже расплылась, а более простая - еще существует, имея соответствующие суперкинки и суперантикинки, которые приблизительно не взаимодействуют. Таким образом, функция  $\chi(T)$  имеет целый ряд плато в низкотемпературной области этих субинтервалов и экспоненциально изменяется между ними.

Для исследования диффузии в низкотемпературном пределе использовалось феноменологическое приближение. Именно, рассматривая кинки (антикинки) как стабильные квазичастицы, обладающие массой и энергией и помещенные во внешний потенциал Пайерлса-Набарро, с помощью теории Крамерса был оценен коэффициент химической диффузии. Было показано, что коэффициент химической диффузии системы должен совпадать с коэффициентом диффузии кинков (антикинков) для данного температурного интервала. Действительно, если в соизмеримой структуре существует небольшой градиент концентрации атомов, то должен быть и градиент концентрации кинков, что вызывает возникновение потоков атомов и кинков. Очевидно, что отношения потоков атомов и кинков к соответствующим градиентам должны совпадать. При изменении концентрации атомов перенос массы будет осуществляться кинками  $k$  (антикинками  $\bar{k}$ ), а коэффициент диффузии  $D_c$  будет совпадать с коэффициентом диффузии кинков (антикинков)  $D_k$  ( $D_{\bar{k}}$ ).

Как было упомянуто ранее, зависимость высоты рельефа Пайерлса от концентрации атомов имеет вид обратной "чертовой лестницы". Поскольку высота скачка рельефа Пайерлса в этой зависимости совпадает с энергией активации диффузии, подобные зависимости должны наблюдаться в диффузионных экспериментах. В настоящее время такие результаты отсутствуют. Косвенным свидетельством, однако, может являться наблюдаемое резкое возрастание коэффициента диффузии атома на металлической подложке вблизи точки соизмеримости. Подобное увеличение коэффициента диффузии отмечалось при увеличении концентрации ступеней на полупроводниковых подложках. В частности, наблюдалось скачкообразное уменьшение энергии активации поверхностной диффузии атомов серебра вдоль ступенек поверхности (111) германия при покрытии, соответствующем согласованной структуре  $(4 \times 2)$ .

### 3 Основные результаты и выводы работы

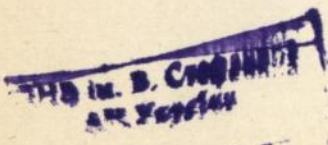
Изучено поведение одномерной цепочки адатомов в модели ФК с учетом ангармонизма взаимодействия между ними, приводящего к "расщеплению" параметров элементарных возмущений (кинка и антикинка).

- Выведено интегро-дифференциальное уравнение движения, описывающее динамику нелокальной цепочки ФК в континуальном приближении и найден закон взаимодействия кинков.
- Рассчитана зависимость высоты рельефа Пайерлса  $\varepsilon_p$  и  $m$  от  $\theta$  и показано, что они испытывают скачки при каждом рациональном покрытии  $\theta$ , т.е. имеют вид обратной "чертовой лестницы", что позволяет предсказать особенности механизма переноса массы в квазиодномерных системах.

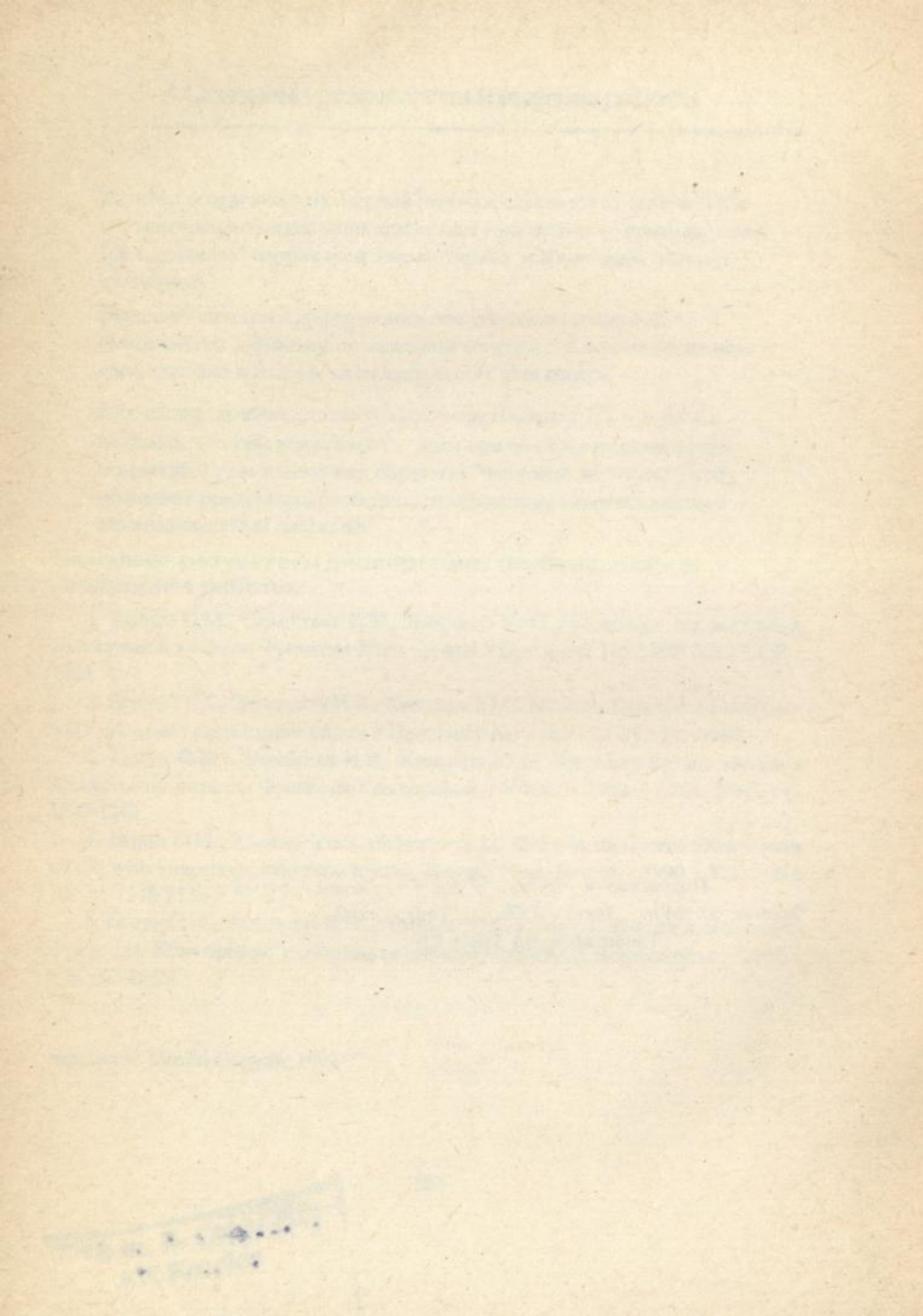
Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Браун О.М., Зеленская И.И., Кившарь Ю.С. Численное исследование нелокальной модели Френкеля-Конторовой // Препринт No 1 ИФ АН УССР. - 1989.
2. Браун О.М., Зеленская И.И., Кившарь Ю.С. Модель Френкеля-Конторовой с дальним взаимодействием // Препринт No 2 ИФ АН УССР. - 1989.
3. Браун О.М., Зеленская И.И., Кившарь Ю.С. Взаимодействие кинков в нелокальной модели Френкеля-Конторовой // УФЖ. - 1990. - Т.35. - No 8. - С. 1235-1240.
4. Braun O.M., Kivshar Yu.S., Zelenskaya I.I. Kinks in the Frenkel-Kontorova model with long-range interparticle interactions // Phys. Rev. E. - 1990. - V.41. - No 10. - P. 7118-7138.
5. Браун О.М., Зеленская И.И., Кившарь Ю.С. Рельеф Пайерлса для модели Френкеля-Конторовой с дальним взаимодействием. // Поверхность. - 1991. - Т.8. - С. 22-27.

верстка © Dimitri Danyuk, 1993



Подписано к печати 13 05 93 Объем 10 л. л.  
Формат 60X84<sup>1</sup>/<sub>2</sub>к. Заказ 1097 Тираж 100  
Типография ВА ПВО СВ.



465086

AB 27.453