

Несоизмеримые структуры на поверхности упругого полупространства

А.С. Ковалев, Е.С. Соколова

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: kovalev@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 12 января 2005 г.

Рассмотрена статическая несоизмеримая структура у поверхности упругого полупространства, покрытого монослоем другого вещества с отличной жесткостью и другим равновесным межатомным расстоянием, и выведена система одномерных нелинейных интегро-дифференциальных уравнений, описывающих такую структуру. В случае абсолютно жесткого монослоя (противоположном обычно рассматриваемому в модели Френкеля–Конторовой пределу мягкого монослойного покрытия абсолютно жесткой подложки) найдены новые классы периодических решений уравнения Пайерлса для несоизмеримых поверхностных структур, которые существенно отличаются от известных ранее. При учете слабой податливости жесткого монослоя над мягким полупространством и слабой податливости жесткого полупространства с мягким монослойным покрытием получено приближенное описание структуры неоднородных поверхностных состояний, т.е. зависимости периода этих структур от параметра несоизмеримости (различия периодов решетки полупространства и монослоя) и их жесткостей. Полученные результаты позволяют качественно описать трансформацию несоизмеримых поверхностных структур во всем интервале указанных выше параметров.

Розглянуто статичну несумірну структуру біля поверхні пружного півпростору, що вкритий моношаром іншого матеріалу з відмінною пружністю та іншою рівноважною міжатомною відстанню, та виведено систему одновимірних нелінійних інтегро-диференціальних рівнянь, що описують таку структуру. У випадку абсолютно твердого моношару (протилегному звичайно розглядаемому у моделі Френкеля–Конторової випадку м'якого моношарового покриття абсолютно твердої підкладки) знайдено нові класи періодичних рішень рівняння Пайерлса для несумірних поверхневих структур, що суттєво відрізняються від відомих раніше. З урахуванням слабкої пружності твердого моношару над м'яким півпростором та слабкої пружності твердого півпростору з м'яким моношаровим покриттям отримано наближений опис структури неоднорідних поверхневих станів, тобто залежності періода цих структур від параметра несумірності (відмінності періодів ґратки півпростору і моношару) та їхніх пружностей. Отримані результати дозволяють якісно описати трансформацію несумірних поверхневих структур у всьому інтервалі зазначених вище параметрів.

PACS: 68.35.–p

В последнее время основной интерес в физике нелинейных явлений перемещается в область исследования нелинейных возбуждений (и, в частности, солитонов) в реальных физических системах, при учете, например, ограниченности размеров образца, низкоразмерности системы и ее дискретности. Учет этих обстоятельств, а также нелинейных эффектов, существенно необходим при исследовании поверх-

ности кристалла, покрытой тонкой пленкой другого вещества. Наличие поверхности и пленочного покрытия приводит к существованию большого разнообразия поверхностных волн, которые модернизируются при учете нелинейности в нелинейные сдвиговые и рэлеевские волны, а также в соответствующие локализованные поверхностные волны — динамические солитоны [1,2]. С другой стороны,

нелинейность взаимодействия пленочного покрытия с подложкой (полупространством) приводит к возможности существования локализованных возбуждений другого типа — топологических солитонов или «поверхностных дислокаций». Если при этом равновесное межатомное расстояние между атомами подложки и атомами покрытия (адатомного слоя) различны, то возможно существование периодической структуры поверхностных дислокаций, которой отвечает минимум энергии системы. Поскольку период этой структуры, вообще говоря, несоизмерим с периодом подложки, такие структуры получили название *несоизмеримых поверхностных структур* (НПС) [3]. Хорошо известным примером НПС является структура атомов Ga на поверхности кремния [4]. Более того, НПС может образовываться и на идеальной (без пленочного покрытия) поверхности кристалла, например, золота, когда зарядовое состояние поверхностных атомов отличается от такового для объемных атомов [5]. Обычно НПС теоретически исследуется в простейшем случае абсолютно жесткой подложки, где она описывается в рамках модели Френкеля–Конторовой (МФК), т.е. синусоидальным уравнением Клейна–Гордона (SGE) [6], и соответствующее аналитическое решение для нее хорошо известно [7]. Учет податливости упругого полупространства приводит к существенному усложнению задачи, и поэтому она обычно рассматривается в пределе, когда жесткость подложки намного превосходит жесткость покрытия или поверхностного слоя атомов [8–11]. Очевидно, что это не всегда справедливо. Поэтому в настоящей работе задача сформулирована в общем случае произвольного соотношения жесткостей упругого полупространства и покрывающего его поверхность монослоя и решена точно в пределе, противоположном рассматривавшемуся ранее, т.е. при жесткости покрывающего монослоя много большей жесткости полупространства подложки.

1. Формулировка модели

Из-за сложности задачи, прежде всего, ограничимся простейшей «скалярной моделью», в которой допускаются смещения атомов как подложки, так и адатомного слоя лишь в одном направлении в плоскости поверхности (для определенности в направлении оси X), вдоль которого и возникает несоизмеримая структура. Ось Z выбирается в направлении, перпендикулярном поверхности, и упругому полупространству отвечает область $z > 0$ (см. рис. 1).

Кроме того, как обычно [8–11], взаимодействие как поверхностных атомов между собой, так и атомов полупространства учитывается в гармоническом приближении, в то время как взаимодействие между

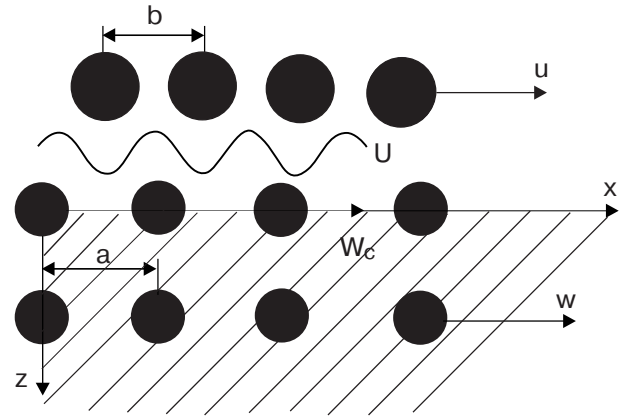


Рис. 1. Геометрия задачи.

атомами монослоя и подложки считается существенно нелинейным. Основным моментом является то, что равновесное межатомное расстояние a в материале полупространства в отсутствие покрытия предполагается не равным равновесному расстоянию b в монослое без подложки. Введем координаты атомов полупространства X_{nm} и атомов монослоя \tilde{X}_s так, что в основном состоянии при отсутствии взаимодействия между монослоем и подложкой $X_{nm}^{(0)} = (an, am)$ и $\tilde{X}_s^{(0)} = bs$ соответственно. (Индексы n и m нумеруют атомы вдоль осей X и Z).

При этом энергии деформированного монослоя и деформированного полупространства имеют вид

$$E_s = \sum_s \frac{\alpha}{2} (\tilde{X}_s - \tilde{X}_{s-1} - b)^2, \quad (1)$$

$$E_b = \sum_{nm} \frac{\beta}{2} [(X_{nm} - X_{n-1,m} - a)^2 + (X_{nm} - X_{n,m-1})^2], \quad (2)$$

где α и β соответствующие упругие модули (упругое полупространство предполагается изотропным). Сложнее написать энергию взаимодействия деформированного монослоя с деформированной подложкой (см., например, [12]). В случае абсолютно жесткого монослоя легко показать, что при разумных предположениях о характере парного взаимодействия поверхностного атома подложки со всеми атомами монослоя эта энергия в основном приближении будет иметь вид

$$E_{\text{int}} = U \left[1 - \cos \frac{2\pi}{b} (X_{n0} - \tilde{X}_0^{(0)}) \right]. \quad (3)$$

В случае сжимаемого монослоя выражение (3) модернизируется с учетом локальной деформации монослоя в точке расположения поверхностного атома упругого полупространства — перенормируется период b , который в пределе абсолютно жесткого полупространства заменяется на a .

Ниже будем пользоваться длинноволновым приближением, считая связь монослоя с полупространством слабой: $U \ll \alpha b^2, \beta a^2$. Удобно выбрать систему координат, связанную с недеформированной решеткой полупространства $an \rightarrow x, am \rightarrow z$, и ввести смещения в этой системе координат. При этом $X_{nm} = (an + w_{nm}, am) \rightarrow (an + w(x, z), am)$ и $\tilde{X}_s = as + u_s \rightarrow bs + u(x) + x(a - b)/a$. Возникающий при этом параметр $\xi = (a - b)/a$, характеризующий различие межатомных расстояний в слое и подложке, назовем параметром несоизмеримости (ПН).

В длинноволновом приближении выражение (2) для упругой энергии полупространства преобразуется естественным образом:

$$E_b = \frac{1}{a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_0^{+\infty} dz \frac{\beta a^2}{2} [\nabla w(x, z)]^2. \quad (4)$$

Выражение для упругой энергии монослоя (1) в длинноволновом приближении в выбранной системе координат преобразуется так:

$$E_s = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\alpha a^2}{2} (u_x^2 + 2u_x \xi). \quad (5)$$

В этом выражении нижний индекс обозначает пространственное дифференцирование по координате x . Наконец, выражение (3) преобразуется следующим образом:

$$E_{\text{int}} = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} dx U \left\{ 1 - \cos \frac{2\pi}{b} (w_0 - u) \right\}, \quad (6)$$

где w_0 — смещения поверхностных атомов полупространства (как указывалось выше, в случае жесткой подложки надо в качестве периода брать период подложки a). В выражении (6) учтено лишь среднее смещение монослоя относительно полупространства. Учет деформации монослоя приводит к замене постоянной решетки монослоя b на величину $b(1 + u_x(x))$. Но, считая все деформации небольшими, в дальнейшем будем пренебрегать этими малыми добавками. Если ввести смещения атомов монослоя из их равновесных положений в отсутствие взаимодействия с подложкой $v(x) = u(x) + \xi x$ ($\tilde{X}_s = as + u_s = bs + v_s = bs + as(a - b)/a + u_s$), то упругая энергия системы может быть записана в следующем виде:

$$E = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left\{ \frac{\alpha a^2}{2} v_x^2 + U \left[1 - \cos \frac{2\pi}{b} (w_0 - v + \xi x) \right] \right\} +$$

$$+ \frac{1}{a} \int_0^{+\infty} dz \frac{\beta a^2}{2} (\nabla w)^2 \}. \quad (7)$$

(Сравнение этой формулы с соответствующими формулами в [4,11] показывает, что в последних выражение для энергии было выписано не вполне корректно.)

Полная энергия включает дополнительно кинетическую энергию, но мы ниже ограничимся рассмотрением лишь статических конфигураций.

2. Уравнения, описывающие статические несоизмеримые структуры

Из выражения (7) для полной энергии следуют такие уравнения для деформаций в монослое и полупространстве:

$$\sin \frac{2\pi}{b} (w_0 - v + \xi x) = -\frac{\alpha a^2 b}{2\pi U} v_{xx}, \quad (8)$$

$$\Delta_2 w = 0. \quad (9)$$

Последнее уравнение должно быть дополнено граничным условием:

$$w_z \Big|_{z=0} = -\frac{2\pi U}{\beta b a} \sin (w_0 - v + \xi x). \quad (10)$$

Уравнение Лапласа (9) легко решается в полупространстве с плоской границей [13], и связь различных компонент деформаций на границе выглядит так:

$$w_z \Big|_{z=0} = H w_x \Big|_{z=0}, \quad (11)$$

где преобразование Гильберта H определяется как

$$Hf(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{p - x} f(p).$$

Таким образом, окончательная замкнутая система одномерных уравнений выглядит следующим образом:

$$\sin \frac{2\pi}{b} (w_0 - v + \xi x) = -\frac{\alpha a^2 b}{2\pi U} v_{xx}, \quad (12)$$

$$\sin \frac{2\pi}{b} (w_0 - v + \xi x) = -\frac{\beta b a}{2\pi U} H w_{0x}. \quad (13)$$

Напомним, что в случае жесткой подложки b в последних двух формулах заменяется на a . Система (12,13) представляет собой систему нелинейных (но одномерных!) интегродифференциальных уравнений, и ее решение представляет сложную математическую проблему. Поэтому особое внимание должно быть уделено преде-

льным случаем, когда возможно получить асимптотические выражения для решений системы (12,13), отвечающим НС.

3. Мягкий монослой на поверхности жесткого полупространства

Прежде всего остановимся на случае мягкого монослоя на поверхности жесткого полупространства, допускающем переход в пределе абсолютно жесткой подложки к МФК. Удобно ввести относительные смещения атомов монослоя и подложки

$$\psi = \frac{2\pi}{a}(w_0 - v + \xi x) = \frac{2\pi}{a}(w_0 - u) \quad (14)$$

и переписать систему (12,13) в виде

$$\sin \psi = \frac{\alpha}{U} \left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^2 \frac{1}{a} u_{xx}, \quad (15)$$

$$\psi_x = \frac{2\pi}{a} \left(a \frac{\alpha}{\beta} H u_{xx} - u_x \right), \quad (16)$$

$$w_{0,x} = a \frac{\alpha}{\beta} H u_{xx}. \quad (17)$$

В случае жесткой подложки смещения поверхностных атомов полупространства существенно меньше смещений атомов монослоя в НС, т.е. $w_0 \ll u \approx -a\psi/2\pi$. При этом уравнение (15) сводится к следующему:

$$\sin \psi = \frac{\alpha}{U} \left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^2 \psi_{xx} + \frac{\alpha^2}{U\beta} a \left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^2 H \psi_{xxx}. \quad (18)$$

Поскольку в НС $\sin \psi \sim \psi \sim 1$, то из (18) следует, что

$$a \frac{\partial}{\partial x} \sim \frac{2\pi}{a} \sqrt{\frac{U}{\alpha}} \ll 1.$$

(Последнее усиленное неравенство необходимо для выполнения длинноволнового приближения, в котором справедливо все наше рассмотрение.) При этом из соотношения (17) следует, что $w_0 \sim a\alpha u_x/\beta$ (надо учитывать, что преобразование Гильберта не приводит к изменению пространственного масштаба). Следовательно, условие $w_0 \ll -a\psi/2\pi$ сводится к следующему неравенству:

$$\frac{\sqrt{U\alpha}}{\beta} \frac{2\pi}{a} = \varepsilon \ll 1. \quad (19)$$

В рассматриваемом пределе ε играет роль малого параметра, в меру которого случай с податливой,

но жесткой подложкой отличается от ситуации с абсолютно жестким полупространством.

1. В случае абсолютно жесткой подложки ($\beta = \infty$ или $\varepsilon = 0$) задача о НС сводится к модели ФК. Если ввести безразмерную координату

$$\kappa = x \sqrt{\frac{U}{a^2}} \left(\frac{2\pi}{a} \right), \quad (20)$$

то уравнение (18) сводится к статической редукции SGE:

$$\sin \psi = \psi_{\kappa\kappa}. \quad (21)$$

Решение уравнения (21) для НС хорошо известно (см. [7]):

$$\psi_0 = \pi + 2\text{am} \left(\frac{\kappa}{k}, k \right), \quad (22)$$

где $\text{am}(z, k)$ — эллиптическая амплитуда Якоби и k — модуль этой эллиптической функции. Решение (22) описывает периодическую цепочку « 2π -кинков» (поверхностных дислокаций) с расстоянием между ними $L_0 = 2kK(k)\sqrt{\alpha/U}(a^2/2\pi)$, где $K(k)$ — полный эллиптический интеграл первого рода, а его модуль k зависит от параметра несоизмеримости ξ . Такому решению соответствует ненулевая средняя деформация в монослое при конечной (для одного периода несоизмеримой структуры) энергии системы. При этом относительные смещения ψ совпадают со смещениями в монослое, а полная энергия системы состоит лишь из энергии монослоя и энергии его связи с подложкой. Эта энергия становится меньше величины энергии недеформированного монослоя (с $\psi = 0$) $E_* = (\alpha/2)a\xi_*^2 L_0$, от которой обычно отсчитывается энергия деформированного покрытия, при критическом значении параметра несоизмеримости (в наших обозначениях $\xi = \xi_* = (4/\pi a)\sqrt{U/\alpha}$, см. [14]). В критической точке период НС равен $L_0 = \infty$.

2. В случае податливой, но жесткой подложки ситуация меняется: уравнение и решение должны быть записаны с большей точностью. Мы будем учитывать основные поправки порядка ε к уравнениям и решениям. В правой части уравнения (18) необходимо учитывать малое второе слагаемое, и в терминах безразмерной координаты κ она принимает вид $\psi_{\kappa\kappa} + \varepsilon H \psi_{\kappa\kappa\kappa}$.

Решение уравнения (18) также должно быть записано с большей точностью и может быть представлено в виде

$$\psi = \psi_0 - \varepsilon H \psi_{0\kappa}. \quad (23)$$

Для нахождения полной энергии НС, используя выражение (23) для ψ , необходимо вычислить смещения в монослое u и в подложке w . В рассматриваемом пределе $w_0 \ll u$ для смещений атомов монослоя имеем $u \approx -b\psi_0/2\pi$ (или $v \approx \xi x - b\psi_0/2\pi$). Как можно показать, добавки к смещениям атомов монослоя малы в меру ε^2 . Сложнее найти смещения в податливой подложке. Из уравнения (17), которое можно приближенно (с точностью до ε^2) переписать в виде $w_{0\kappa} = \varepsilon H u_{\kappa\kappa} = -\varepsilon a \psi_{0\kappa\kappa}/2\pi$, следует, что

$$w_0 = -\varepsilon \frac{a}{2\pi} H \psi_{0\kappa} + C_{\kappa}, \quad (24)$$

где C — константа интегрирования, которая из условия конечности энергии полупространства на длине периода несоизмеримой структуры L_0 равна нулю. К сожалению, в явном виде найти выражение для w_0 не удастся, но можно представить его в виде следующего ряда:

$$w_0 = -\varepsilon \frac{2a}{kK(k)} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{q^s}{1+q^{2s}} \sin\left(\frac{\pi\kappa}{kK(k)} s\right) = \sum_{s=1}^{\infty} C_s(k) \sin\left(\frac{2\pi s}{L_0} x\right), \quad (25)$$

где $q = \exp(-\pi K'(k)/K(k))$ — параметр Якоби, $K'(k) = K(\sqrt{1-k^2})$.

Решение для смещений во всем объеме полупространства подложки при этом имеет вид

$$w(x, z) = \sum_{s=1}^{\infty} C_s(k) \exp\left(-\frac{2\pi s}{L_0} z\right) \sin\left(\frac{2\pi s}{L_0} x\right). \quad (26)$$

Подставляя полученное выражение (26) в формулу для энергии полупространства (4), получаем энергию полупространства на один период несоизмеримой структуры

$$E_b^{(L_0)} = \frac{\pi\beta}{2} \sum_{s=1}^{\infty} s C_s^2(k),$$

или

$$E_b^{(L_0)} = \varepsilon^2 \beta \frac{\pi a^2}{2k^2 K^2(k)} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{s}{\text{ch}^2 \mu(k)s}, \quad \mu(k) = \pi \frac{K'(k)}{K(k)}. \quad (27)$$

Как будет показано ниже, в пределе большой жесткости подложки ($\beta \gg \alpha$) вблизи критического значения параметра несоизмеримости период структуры принимает большие значения ($L_0 \gg a$), и модуль k близок к 1. При этом, как видно из (27),

$\mu(k) \ll 1$, и суммирование по s в формуле (27) может быть заменено интегрированием. В результате получается следующая зависимость энергии полупространства (на период несоизмеримой структуры) от модуля эллиптической функции, а следовательно, от периода структуры:

$$E_b^{(L_0)} = \varepsilon^2 \beta \frac{\pi a^2}{2k^2 K^2(k)} \int_1^{\infty} \frac{s ds}{\text{ch}^2 \mu(k)s} = \varepsilon^2 \beta \frac{\pi a^2}{2k^2 K^2(k)} \times \frac{1}{\mu^2(k)} [\ln 2 - \mu(k) \text{th} \mu(k) + \ln \text{ch} \mu(k)]. \quad (28)$$

Энергии деформированного монослоя и его взаимодействия с подложкой легко находятся: воспользовавшись выражением для ψ (23) и связью $u \approx -b\psi/2\pi$, получим соотношение $\cos \psi = \cos \psi_0 + \varepsilon \sin \psi_0 H \psi_{0\kappa}$ и, подставив соответствующие выражения в формулы (5) и (6), находим

$$E_{\text{int}}^{(L_0)} = \varepsilon \beta a^2 \frac{1}{\pi^2} (E(k)k - \pi(1+k^2)K^2(k)) - \varepsilon^2 \beta a^2 4\pi \frac{1}{k^2 K^2(k)} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{q^{2s}}{(1+q^{2s})^2}, \quad (29)$$

$$E_s^{(L_0)} = \varepsilon \beta a^2 \frac{1}{\pi^2} \frac{E(k)}{k} - \alpha a^2 \xi + \frac{\alpha}{2} a \xi^2 L_0. \quad (30)$$

В формуле (30) опущены малые слагаемые порядка $\varepsilon^2 \alpha a^2$, которые при большой жесткости подложки ($\beta \gg \alpha$) существенно меньше малых поправок ($\sim \varepsilon^2 \beta a^2$) в формулах (28) и (29). Как указывалось выше, при большой жесткости подложки, суммирование по s в формуле (29) может быть заменено интегрированием и в результате можно получить такую зависимость энергии $E_{\text{int}}^{(L_0)}$ от модуля эллиптической функции:

$$E_{\text{int}}^{(L_0)} = \varepsilon \beta a^2 \frac{1}{\pi^2} [E(k)k - \pi(1+k^2)K^2(k)] - \varepsilon^2 \beta \frac{4\pi a^2}{k^2 K^2(k)} \int_1^{\infty} \frac{q^{2s}}{(1+q^{2s})^2} ds = \varepsilon \beta a^2 \frac{1}{\pi^2} [E(k)k - \pi(1+k^2)K^2(k)] - \varepsilon^2 \beta a^2 \frac{1 - \text{th} \mu}{k^2 K(k) K'(k)}. \quad (31)$$

Окончательное выражение для плотности полной энергии системы в несоизмеримом состоянии может быть переписано в виде

$$E_{\text{tot}}^{(L_0)} \frac{a}{L_0} = U \left\{ 2 \left(\frac{2E(k)}{k^2 K(k)} - \frac{1-k^2}{k} \right) - \sqrt{\frac{\alpha}{U}} \pi \frac{(a-b)}{kK(k)} \right\} - \varepsilon \left[2\pi^2 \frac{1 - \text{th} \mu}{k^3 K^2(k) K'(k)} - \pi \frac{(\ln 2 - \mu \text{th} \mu + \ln \text{ch} \mu)}{k^3 K(k) K'^2(k)} \right] + \frac{\alpha}{2} a^2 \xi^2. \quad (32)$$

Слагаемое в первых квадратных скобках и последнее слагаемое этого выражения совпадают с известным результатом для энергии НС в модели ФК (абсолютно жесткая подложка). Слагаемое во вторых квадратных скобках ($\sim \varepsilon$) связано с податливостью подложки. Видно, что в пределе $\beta \rightarrow \infty$ (абсолютно жесткая подложка) результат переходит в известное ранее выражение [14].

Однако при любом конечном значении β в узкой области значений параметра несоизмеримости вблизи его критического значения поправка к энергии, связанная с податливостью подложки, становится не малой, и рассмотрение задачи в рамках теории возмущений теряет смысл. Таким образом, не удается найти перенормированное значение критического значения параметра несоизмеримости. Но вне этой узкой области параметра ξ поправки к энергии малы, и можно найти модификацию несоизмеримой структуры, связанную с податливостью полупространства.

Зависимость плотности полной энергии $\varepsilon_{\text{tot}}^{(L_0)}$ от параметра k при значениях параметра несоизмеримости больше и меньше критического представлена на рис. 2, а соответственно нижней и верхней кривой. Минимуму нижней кривой соответствует значение k_* , определяющее период несоизмеримой структуры $L_{0*} = 2k_* K(k_*) \sqrt{\alpha/U} (a^2/2\pi)$. При приближении параметра несоизмеримости к критическому значению этот минимум смещается в сторону больших значений k , а период несоизмеримой структуры возрастает. Однако, как указывалось выше, в узкой области вблизи ξ_* используемая теория возмущений неприменима, поэтому открытым остается вопрос, возникает ли несоизмеримая структура в критической точке с бесконечным или конечным периодом.

Зависимости периода несоизмеримой структуры от параметра несоизмеримости для абсолютно жесткого и податливого полупространства приведены на рис. 2, б. Видно, что учет податливости подложки приводит к увеличению периода несоизмеримой структуры. Для используемых на рисунке значений параметров модели α, β, U, a численно найденное критическое значение параметра несоизмеримости $\xi_* \approx 0,4$.

4. Жесткий монослой на поверхности мягкого полупространства

В случае жесткого монослоя на поверхности мягкого полупространства основную систему исходных уравнений (12) и (13) удобно переписать в виде

$$\sin \psi = \frac{\beta}{U} \left(\frac{ab}{2\pi} \right) H w_{0x}, \quad (33)$$

$$\psi_x = \frac{2\pi}{b} \left(w_{0x} + \frac{1}{a} \frac{\beta}{\alpha} H w_0 - d + \xi \right), \quad (34)$$

$$u_x = -\frac{1}{a} \frac{\beta}{\alpha} H w_0 + d - \xi. \quad (35)$$

Уравнение (35) и константа интегрирования d , которая будет определена ниже, возникают после однократного интегрирования уравнения (17).

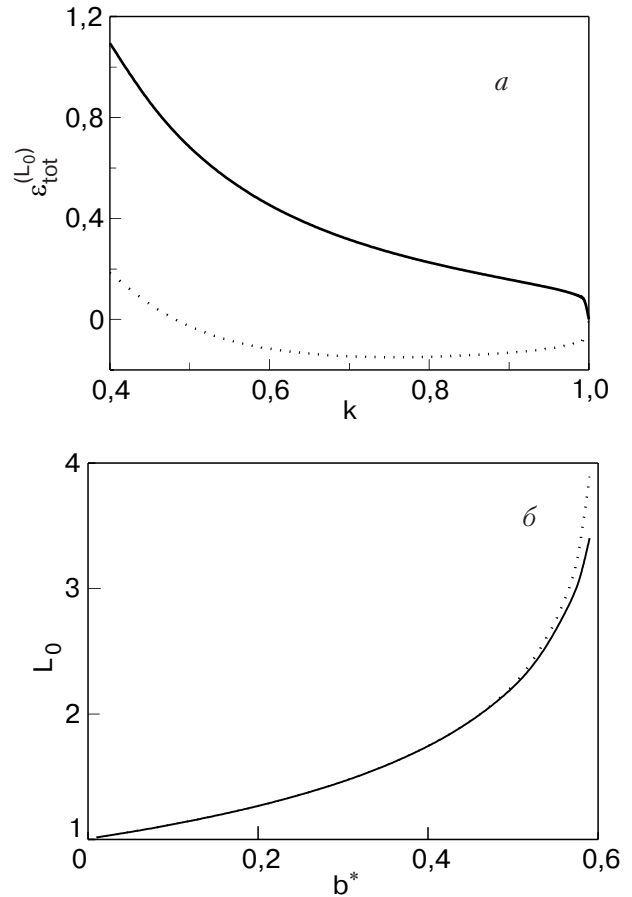


Рис. 2. Зависимость плотности энергии НС $\varepsilon_{\text{tot}}^{(L_0)} = E_{\text{tot}}^{(L_0)}/L_0$ от модуля эллиптической амплитуды для случая $\alpha = 1; \beta = 50; U = 0,1; a = 1$. Отсчет производится от плотности энергии недеформированного монослоя E_*/L_0 ; $b = 0,3 < b_*$ (точки), $b = 0,9 > b_*$ (сплошная линия) (а). Зависимости периода несоизмеримой структуры от параметра несоизмеримости для абсолютно жесткой и податливой подложки; $\beta = 50$ (точки), $\beta = \infty$ (линия) (б).

В случае жесткого монослоя смещения поверхностных атомов полупространства существенно больше смещений атомов монослоя в НС, т.е. $v \ll w_0 \approx b\psi_0/2\pi - \xi x$. При этом уравнение (33) может быть приближенно сведено к следующему уравнению, содержащему только функцию ψ :

$$\sin \psi = \frac{1}{a} \frac{\beta}{U} \left(\frac{ab}{2\pi} \right)^2 H\psi_x + \delta \left\{ \psi - 2\pi \xi \frac{x}{b} \right\}, \quad (36)$$

где $\delta = \frac{\beta^2}{\alpha U} \frac{b^2}{(2\pi)^2}$.

Поскольку в НС $\sin \psi \sim \psi \sim 1$, то из уравнения (36) следует, что

$$a \frac{\partial}{\partial x} \sim \frac{(2\pi)^2}{ab^2} \frac{U}{\beta} \ll 1.$$

(Последнее усиленное неравенство необходимо для выполнения длинноволнового приближения, в котором справедливо все наше рассмотрение.) При этом из соотношения (17) следует, что $w_0 \sim \alpha \alpha u_x / \beta$ (надо учитывать, что преобразование Гильберта не приводит к изменению пространственного масштаба). Следовательно, условие $v \ll w_0$ сводится к следующему неравенству:

$$\delta \ll 1. \quad (37)$$

В рассматриваемом пределе (жесткость монослоя существенно превышает жесткость полупространства подложки) параметр δ играет роль малого параметра, в меру которого случай с податливым, но жестким монослоем отличается от ситуации с абсолютно жестким покрытием. Видно, что в уравнении (36) учтены первые поправки по малому параметру δ (второе слагаемое в правой части).

1. В случае абсолютно жесткого монослоя ($\alpha = \infty$, $\delta = 0$) уравнение (36) сводится к известному уравнению, возникающему в модели Пайерлса для дислокации в двумерной упругой системе (УП):

$$\sin \psi = H\psi_{\tilde{\kappa}}, \quad \tilde{\kappa} = x \frac{U}{\beta} \frac{1}{a} \left(\frac{2\pi}{b} \right)^2 = \frac{x}{\lambda}, \quad (38)$$

где $\lambda = (\beta/U) a(b/2\pi)^2$ — характерная ширина поверхностной дислокации. Хорошо известны точные решения УП для уединенной дислокации и пары дислокаций разного знака [15,16]:

$$\psi_1 = 2\text{arctg} \tilde{\kappa} - \pi, \quad \psi_2 \approx 2\text{arctg} \left[\frac{2l}{\tilde{\kappa}^2 - l^2} \right] + \frac{1}{l}, \quad (39)$$

где l — расстояние между дислокациями в пределе малых сдвиговых напряжений (в пределе большого размера дислокационной пары).

Нами найдены два новых класса точных периодических решений УП, имеющих следующий вид:

$$\psi_0 = 2\text{arctg} \left[\frac{1}{f} \text{tg} (g\tilde{\kappa}) \right] - \pi,$$

где $g = \frac{f}{1-f^2}$, $0 < f < 1$; (40)

$$\psi'_0 = \pi - 2\text{arctg} [f \sin (g\tilde{\kappa})], \quad \text{где } \tilde{g} = \frac{f}{(1+f^2)^{1/2}}. \quad (41)$$

Решение (40) описывает несоизмеримую структуру, т.е. периодическую цепочку « 2π -кинков» (дислокаций на поверхности полупространства на фоне «компенсирующей» средней деформации) с расстоянием между ними $L_0 = \pi/g$ и является обобщением решения Пайерлса для дислокации в двумерном кристалле на случай периодической цепочки объемных дислокаций. Решение (40) параметризуется значением f (или периодом L_0), которое определяется параметром несоизмеримости ξ . Решение (41) описывает периодическую систему дислокаций разного знака с расстоянием между ними $2\pi/\tilde{g}$ и в некотором смысле обобщает решение Набарро. Это решение, по-видимому, является неустойчивым в случае изучаемых несоизмеримых структур, и ниже нами не будет рассматриваться.

В случае возникновения несоизмеримой структуры, описываемой решением (40), смещения на поверхности подложки равны

$$w_0 = \frac{b}{2\pi} \psi_0 - \xi x = \sum_{k=1}^{\infty} b_k \sin [(2\pi/\lambda L_0)x] - b/2, \quad (42)$$

где

$$b_k = \left(-\frac{b}{\pi} + L_0 \lambda \frac{a-b}{b} \frac{1}{\pi} \right) \frac{(-1)^k}{k} + \frac{\tilde{q}^k}{k} \frac{b}{\pi}, \quad \tilde{q} = \frac{1-f}{1+f}, \quad (43)$$

Слагаемое $-\xi x$ в уравнении (42) соответствует «компенсирующей» деформации, при наличии которой энергия системы (на период несоизмеримой структуры) остается конечной. Выражение (42) представляет собой граничное условие для двумерного уравнения (9), описывающего смещения в подложке. При указанных смещениях на поверхности полупространства смещения в объеме запишутся в виде

$$w = \sum_{k=1}^{\infty} b_k \exp [(-2\pi/L_0\lambda)kz] \sin [(2\pi/L_0\lambda)x] - b/2. \quad (44)$$

В этом случае полная энергия подложки, приходящаяся на один период НС, равна:

$$E_b = \frac{\beta}{2} \pi \sum_{k=1}^{\infty} b_k^2 k = \frac{\beta}{2} \frac{b^2}{\pi} \ln \left[\frac{(1+f)^2}{4f} \right]. \quad (45)$$

Эта энергия конечна только при условии нулевой средней деформации (что соответствует периодичности функции w_0). Это условие определяет единственное значение параметра $f = f_0$ и, следовательно, зависимость периода несоизмеримой структуры L_0 от параметра несоизмеримости ξ :

$$f_0 = \sqrt{(L_0/2\pi)^2 + 1} - L_0/2\pi, \quad (46)$$

$$L_0 = \frac{1}{\xi(1-\xi)} \frac{U}{\beta} \frac{(2\pi)^2}{a^2} = \frac{L_0^*}{1-\xi},$$

где L_0^* — асимптотика периода НС при $\xi \rightarrow 0$.

Энергия взаимодействия монослоя с подложкой определяется только функцией ψ и равна

$$E_{\text{int}} = \frac{U}{a} \frac{2f_0}{f_0 + 1} L_0 \lambda. \quad (47)$$

Выражение для полной энергии системы (на один период несоизмеримой структуры) выглядит следующим образом:

$$E_{\text{tot}}^{(L)} = U \frac{\lambda}{a} \left\{ \frac{2f_0}{f_0 + 1} + \frac{2f_0}{1-f_0^2} \ln \left[\frac{(1+f_0)^2}{4f_0} \right] \right\} L_0. \quad (48)$$

Зависимость плотности энергии от параметра несоизмеримости задается формулой (48). В пределе малых ξ ее асимптотика имеет следующий вид:

$$\frac{E_{\text{tot}}^{(L)}}{L} = \varepsilon_{\text{tot}}^{(0)} = \beta \frac{a^2}{2\pi} \frac{1}{L_0^*} \left[1 + \ln \left(\frac{L_0^*}{4\pi} \right) \right].$$

Соответствующая плотность энергии (на единицу длины) как функция параметра несоизмеримости представлена на рис. 3.

Эта найденная зависимость имеет смысл при не слишком больших значениях параметра несоизмеримости ξ , при которых выполняется длинноволновое приближение. В однородном состоянии, в котором упругое полупространство не деформировано, возникает поверхностная структура, связанная с несоответствием положений атомов монослоя и подложки и имеющая период b/ξ . Энергия, приходящаяся на единицу длины «однородного состояния», равна U/a и не зависит от параметра несоизмеримости. В частном случае выбранных на рисунке значений параметров эта энергия равна $U/a = 0,01$ и превышает энергию несоизмеримой структуры.

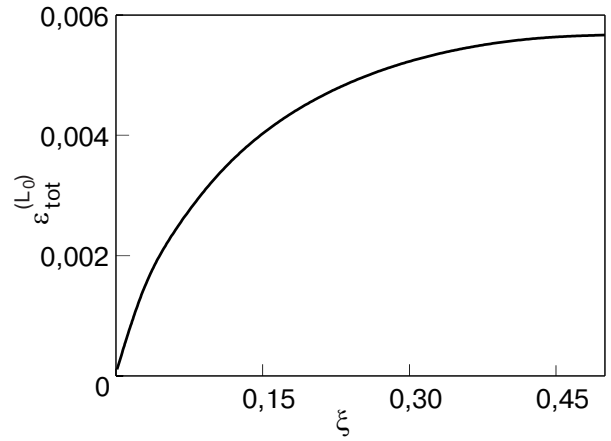


Рис. 3. Зависимость плотности энергии системы в НС от ПН для случая $a = 1$; $\alpha = \infty$; $\beta = 0,1$; $U = 0,01$.

Зависимость периода несоизмеримой структуры от параметра несоизмеримости задается формулой (46) и при малых значениях ξ имеет асимптотику

$$L_0 \approx L_0^* = \frac{1}{\xi} \frac{U}{\beta} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \sim \frac{1}{\xi}.$$

Таким образом, качественное отличие рассматриваемого предельного случая от случая абсолютно жесткой подложки состоит в отсутствие ненулевого критического значения параметра несоизмеримости: несоизмеримая структура с бесконечным периодом L_0 и с нулевой энергией возникает при $\xi = 0$.

2. В случае жесткого, (но не абсолютно, а слабо податливого) монослоя ситуация меняется: в уравнении (36) необходимо оставить второе слагаемое в правой части ($\sim \delta$) и его решения должны быть записаны с большей точностью. Мы будем учитывать основные поправки (порядка δ) к решениям. В терминах безразмерной координаты $\tilde{\kappa}$ правая часть уравнения принимает вид $H\psi_{\tilde{\kappa}} + \delta(\psi - 2\pi\xi\lambda\tilde{\kappa}/b)$. Решение уравнения (36) также должно быть записано с большей точностью и может быть представлено в виде

$$\psi = \psi_0 + \delta \frac{2\pi}{b} H \left[\int d\tilde{\kappa} \left(\frac{b}{2\pi} \psi_0 - \xi\lambda\tilde{\kappa} \right) \right], \quad (49)$$

где ψ_0 — решение (40) уравнения (39) в пределе абсолютно жесткого монослоя; функция $\psi(x)$ может быть представлена в виде суммы чисто периодической функции и линейно растущей части, равной $\bar{\psi} = 2\pi x/L$. Связь периода L функции ψ с периодом L_0 функции ψ_0 будет приведена ниже. Для нахождения полной энергии НС, используя выражение (49) для ψ , необходимо вычислить смещения в монослое v и в подложке w . В рассматриваемом пределе смещения в монослое малы: $v \ll w_0$, и для смещений на поверхности подложки из формулы (34) (при подстановке в нее решения (49)) имеем

$w_0 = b\psi_0/2\pi + (d - \xi)x - b/2$ (относительно константы d , которая определяется из условия равенства нулю средней деформации в подложке и в пределе абсолютно жесткого монослоя равна нулю (34),(35)). Сложнее найти смещения в монослое. Из уравнения (35), которое можно приближенно переписать в виде $v_{\tilde{\kappa}} = -\delta H w_0 + d\lambda$, следует что

$$v = -\delta H \int d\tilde{\kappa} [(b/2\pi)\psi_0 + (d - \xi)\lambda\tilde{\kappa} - b/2] + d\lambda\tilde{\kappa}.$$

С учетом того, что средняя деформация на поверхности подложки равна нулю (смещения w_0 строго периодичны), что диктуется требованием конечности энергии системы в данной конфигурации, возможно, усреднив равенство (34), определить значение константы d : $d = \xi - b/L\lambda$ (в пределе абсолютно жесткого покрытия $d = 0$ и мы приходим к найденной выше зависимости $L = b/(\xi\lambda)$). Окончательно выражения для смещений в подложке и в монослое имеют вид

$$w = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{b}{\pi} \frac{\tilde{q}^k}{k} \sin\left(k \frac{2\pi}{L\lambda} x\right) \exp\left(-k \frac{2\pi}{L\lambda} z\right) - b/2, \quad (50)$$

$$v = -\frac{1-f^2}{f} \frac{b}{2\pi} \delta \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tilde{q}^k}{k^2} \sin\left(k \frac{2\pi}{L\lambda} x\right) + (\xi - b/L\lambda)x,$$

где \tilde{q} — определенная выше функция параметра f , который является функцией периода НС. Профили смещений на поверхности подложки и в монослое представлены на рис. 4.

Соответствующие найденным смещениям в подложке и монослое энергии на период НС имеют вид

$$E_b = \frac{\beta}{2} \pi \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{b}{\pi} \frac{\tilde{q}^k}{k}\right)^2 k = \frac{\beta}{2} \frac{b^2}{\pi} \ln \left[\frac{(1+f)^2}{4f} \right], \quad (51)$$

$$E_s = \delta \frac{L\lambda}{a} U \text{Li}_2(\tilde{q}^2) L\lambda + \frac{\alpha}{2} a d^2 L\lambda, \quad (52)$$

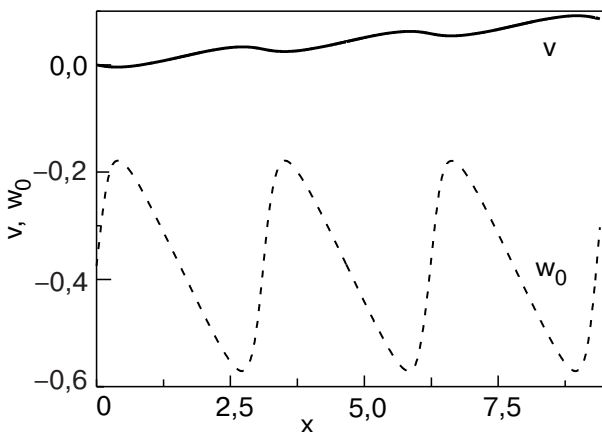


Рис. 4. Смещения в монослое и на поверхности подложки для случая $a = 1$; $b = 0,6$; $\alpha = 1$; $U = 0,01$; $\beta = 0,1$.

где $\text{Li}_2(q)$ — полилогарифм второй степени. Для нахождения энергии взаимодействия подложки с монослоем воспользуемся выражением (49) для связи функций ψ и ψ_0 в виде

$$\cos \psi = \cos \psi_0 - \sin \psi_0 \delta \frac{2\pi}{b} H \left[\int dx \left(\frac{b}{2\pi} \psi_0 - \xi x \right) \right],$$

откуда получаем:

$$E_{\text{int}} = \frac{U}{a} \frac{2f}{f+1} L\lambda - \delta \frac{2L\lambda}{a} U \text{Li}_2(\tilde{q}^2) L\lambda. \quad (53)$$

Полное выражение для энергии системы в несоизмеримом состоянии (на один период НС) выглядит так:

$$E_{\text{tot}}^{(L)} = \frac{2U}{a} \left\{ \frac{f}{f+1} + \frac{f}{1-f^2} \ln \left[\frac{(1+f)^2}{4f} \right] - \frac{\delta}{2} \text{Li}_2(\tilde{q}^2) + \frac{\alpha}{2} \frac{a^2}{2U} \left(\xi - \frac{b}{L\lambda} \right)^2 \right\} L\lambda. \quad (54)$$

В пределе абсолютно жесткого монослоя ($\alpha \rightarrow \infty \Rightarrow f \rightarrow f_0$, $L \rightarrow L_0$) это выражение переходит в полученную ранее формулу (48).

Можно показать, что при любом конечном значении параметра α в узкой области значений параметра несоизмеримости вблизи его критического значения поправка к энергии, связанная с податливостью монослоя, становится не малой, и рассмотрение задачи в рамках теории возмущений теряет смысл. Таким образом, в рамках этой теории не удастся найти критическое значение параметра несоизмеримости. Однако вне этой узкой области параметра ξ поправки к энергии малы, и можно найти модификацию несоизмеримой структуры, связанную с податливостью покрытия.

Соответствующая плотность энергии представлена на рис. 5,а при двух значениях ПН: большем и меньшем критического. При значении $\xi < \xi_*$ минимум зависимости $\varepsilon_{\text{tot}}^{(L)}(f)$ в точке f_* определяет период возникающей структуры $L \sim (1-f_*^2)/f_*$. Для параметров, приведенных на рисунке, критическое значение параметра несоизмеримости близко к $\xi_* \approx 0,03$.

Условие малости поправки к энергии за счет податливости монослоя определяет интервал допустимых значений параметра несоизмеримости ξ ; в этом интервале удовлетворяется неравенство

$$\frac{\delta}{2} \frac{1-f_0^2}{f_0} \ln \frac{(1+f_0)^2}{4f_0} = \tilde{\mu} \ll 1,$$

$$\xi \rightarrow 0 \Rightarrow \tilde{\mu} \sim \delta \frac{L_0^*}{2\pi} \ln \left[\frac{L_0^*}{4\pi} \right],$$

при котором справедливы следующие аналитические выражения:

$$L = L_0(1 + \tilde{\mu}), f = f_0 \left(1 - \frac{\tilde{\mu}}{\sqrt{1 + (a^2(1 - \xi)\xi\beta/U)^2}} \right). \quad (55)$$

Из формулы (55) видно, что учет податливости упругого монослоя вызывает увеличение периода возникающей несоизмеримой структуры ($L > L_0$), что продемонстрировано и на рис. 5, б. Наконец, приведенная на рис. 5, а зависимость плотности энергии НС от параметра f (фактически от параметра несоизмеримости) может быть записана приближенно в следующей аналитической форме:

$$E_{\text{tot}}^{(L)} = U \frac{\lambda}{a} \left\{ \frac{2f_0}{1 + f_0} + \frac{2f_0}{1 - f_0^2} \ln \frac{(1 + f_0)^2}{4f_0} - \delta \left[\text{Li}_2 \left(\frac{1 - f_0}{1 + f_0} \right)^2 + \frac{1}{2} \ln^2 \frac{(1 + f_0)^2}{4f_0} \right] \right\} L_0. \quad (56)$$

В пределе абсолютно жесткого монослоя ($\delta = 0$) это выражение переходит в формулу (48). В случае малых значений параметра несоизмеримости асимптотика зависимости плотности энергии от параметра несоизмеримости, определяемой формулой (56), имеет вид

$$\varepsilon_{\text{tot}} = \varepsilon_{\text{tot}}^{(0)} - \delta \frac{\beta a^2}{24} \left[1 + \frac{3}{\pi^2} \ln^2 \left(\frac{L_0^*}{4\pi} \right) \right].$$

5. Заключение

В настоящей работе рассмотрены возможные несоизмеримые структуры, возникающие у поверхности упругого полупространства, покрытого монослоем вещества с отличным от объемного межатомным расстоянием, в широком интервале значений жесткости полупространства и покрывающего монослоя и разности межатомных расстояний.

1. В рамках простой скалярной модели выведена система эффективных одномерных нелинейных интегродифференциальных уравнений для статических несоизмеримых поверхностных структур, описывающая в пределах абсолютно жесткой подложки и абсолютно жесткого монослоя известные модели Френкеля–Конторовой и Пайерлса.

2. В пределе абсолютно жесткого монослоя (модель Пайерлса) найдены новые классы точных решений уравнения Пайерлса для несоизмеримой структуры. Эти решения описывают периодическую систему поверхностных дислокаций с «компенсирующей» средней деформацией противоположного

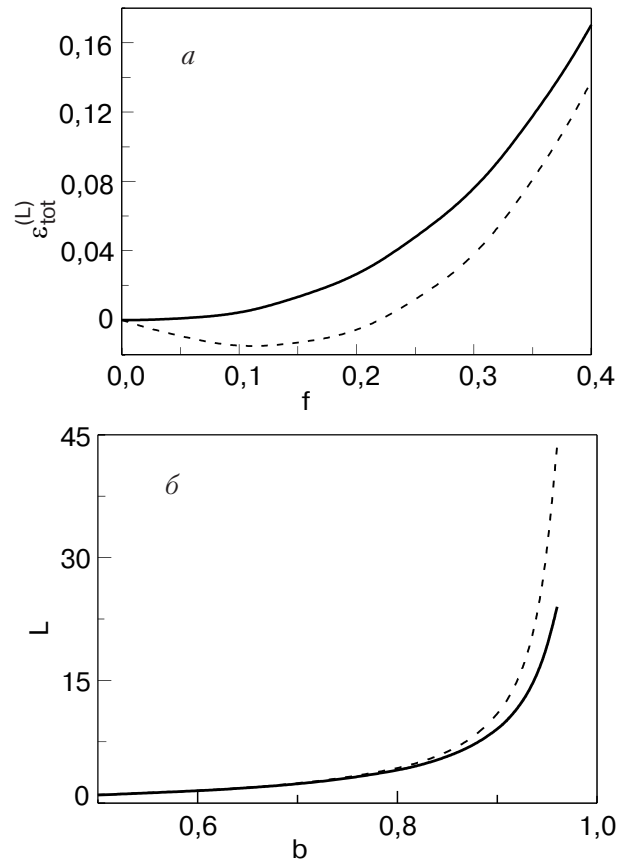


Рис. 5. Плотность энергии системы как функции параметра f (периода НС) в несоизмеримом состоянии для значений параметров $a = 1, \beta = 0,1, U = 0,01, a = 1; b = 0,80 < b_*$ (пунктир), $b = 0,99 > b_*$ (сплошная линия) (а). Период НС как функция межатомного расстояния b в случае абсолютно жесткого и податливого монослоя для значений параметров $\alpha = 1, \beta = 0,1, U = 0,01, a = 1; \alpha = \infty$ (сплошная линия), $\alpha = 30$ (пунктир) (б).

знака (с нулевой средней деформацией полупространства).

3. При учете слабой сжимаемости монослоя в рамках теории возмущений по малому параметру (отношение жесткости подложки к жесткости монослоя) найдены поправки к структуре неоднородного поверхностного состояния. В дополнение к периодической поверхностной структуре подложки (с нулевой средней деформацией) возникает дополнительная, ненулевая в среднем, малая деформация монослоя.

4. В противоположном случае жесткого (но обладающего конечной податливостью) полупространства с мягким моноатомным покрытием найдены приближенные решения, переходящие в пределе абсолютно жесткого полупространства в известные ранее результаты. Учет слабой податливости полупространства приводит к тому, что периодическая система дислокаций в монослое сопровождается слабой (в среднем нулевой) деформацией полупространства.

Таким образом, во всем интервале значений соотношения жесткости полупространства и покрываю-

щего монослоя β/α и параметра несоизмеримости ξ (разности их межатомных расстояний) в разных случаях точно, количественно и качественно найден вид несоизмеримых поверхностных структур, т.е. зависимость периода этих структур от указанных параметров $L = L(\alpha/\beta, \xi)$.

1. А.С. Ковалев, Е.С. Сыркин, Ж.А. Можен, *ФНТ* **28**, 635 (2002).
2. А.С. Ковалев, Е.С. Соколова, А.П. Майер, Ж.А. Можен, *ФНТ* **29**, 530 (2003).
3. И.Ф. Люксютов, А.Г. Наумовец, В.Л. Покровский, *Двумерные кристаллы*, Наукова думка, Киев (1988).
4. S.C. Erwin, A.A. Baski, L.J. Whitman, and R.E. Rudd, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1818 (1999).
5. U. Harten, A.M. Lahee, J.P. Toennies, and Ch. Woll, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2619 (1985).
6. O.M. Braun and Y.S. Kivshar, *The Frenkel–Kontorova Model. Concepts, Methods, and Applications*, Springer, Berlin (2003).
7. И.О. Кулик, И.К. Янсон, *Эффект Джозефсона в сверхпроводящих туннельных структурах*, Наука, Москва (1970).
8. F.C. Frank and J.H. Van der Merwe, *Proc. Roy. Soc. London* **198**, 205 (1949).
9. M.V. Gordon, J. Villain, *J. Phys.* **C12**, L151 (1979).
10. И.Ф. Люксютов, *ЖЭТФ* **82**, 1267 (1982).
11. А.Л. Талапов, *ЖЭТФ* **83**, 442 (1982).
12. В.Д. Нацик, Е.И. Назаренко, *ФНТ* **26**, 283 (2000).
13. H.D. Greenberg, *Application of Greens Functions in Science and Engineering*, New Jersey (1971).
14. А.С. Ковалев, И.В. Герасимчук, *ЖЭТФ* **122**, 1116 (2002).
15. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)*, Вища школа, Харьков (1988).
16. F.R. Nabarro, *Proc. Phys. Soc.* **59**, 256 (1947).

Incommensurate structures on the surface of elastic half-space

A.S. Kovalev and E.S. Sokolova

A static incommensurate structure on the surface of elastic halfspace covered with a monolayer of another material with some different elasticity and equilibrium interatomic distance was examined, and a system of one-dimensional nonlinear integro-differential equations describing such a structure was derived. New classes of periodical solutions of the Pierls equation for incommensurate surface structures, which differ fundamentally from the well-known ones, were found in the limit of absolutely rigid monolayer (contrary to the limit of soft monolayer on the absolutely rigid half-space usually examined in the framework of the Frenkel–Kontorova model). An approximate description of the structure of nonuniform surface states, i.e., the dependences of the structure spacing on the incommensurability parameter (the difference in lattice spacing between monolayer and half-space) and on the elasticity of monolayer and half-space was obtained with due account of the weak elasticity of rigid monolayer over soft half-space and the weak elasticity of rigid half-space below soft monolayer. The results obtained enable the transformation of incommensurate surface structures to be described qualitatively in the whole interval of the above-mentioned parameters.