Письма в ЖЭТФ, том 57, вып.9, стр.561 - 564 ©1993 г. 10 мая

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ d-МЕРНОГО УПРУГОГО КРИСТАЛЛА В d-МЕРНОМ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ С НЕСОРАЗМЕРНЫМИ ПЕРИОДАМИ РЕШЕТОК КРИСТАЛЛА И ПОТЕНЦИАЛА

А.Н.Филонов

Красноярский институт цветных металлов
660025 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 23 февраля 1993 г.
После переработки 31 марта 1993 г.

Найдено основное состояние для d-мерного упругого кристалла кубической симметрии, находящегося в d-мерном периодическом прямоугольном потенциале, обладающим той же симметрией, но с несоизмеримыми периодами решеток кристалла и потенциала. Получен скачкообразный переход по параметру несоразмерности из соразмерной в модулированную фазу для случая $d \geq 2$.

Задачи описания структур, образованных в результате конкуренции двух и более размеров, для разных случаев размерности (эпитаксия пленок на монокристаллические подложки, $d = 2$, формирование и развитие зародышей кристаллов при фазовых переходах, $d = 3$, и др.) остаются актуальными задачами физики твердого тела. При эпитаксии на монокристаллические подложки кристаллических пленок с несоразмерными периодами их решеток или при равновесном выращивании кристаллов на монокристаллах наблюдается следующая картина роста: сначала образуется гетероморфная фаза, когда структура выращиваемого кристалла полностью подстраивается под структуру подложки, в дальнейшем на их основе скачком образуется слабодеформированный кристалл с исходными собственными размерами кристаллической решетки и симметрией. Этот хорошо известный экспериментаторам факт не получил, однако, достаточно простого теоретического объяснения, что связано, по-видимому, с тем, что теоретические описания подобных структур основывались чаще всего на одномерных моделях [1,2]. Кроме того, математический аппарат при описании модулированных структур для произвольного вида потенциала даже в одномерном случае не простой. Поэтому имеет смысл рассмотреть многомерную модель, максимально упростив ее, в частности, оставив только один параметр несоразмерности и выбрав самый простой потенциал.

Система ($d = 1$) одномерной упругой цепочки атомов, находящихся в периодическом потенциале с периодом цепочки несоразмерным периоду потенциала, изучалась в многочисленных работах и основное состояние такой системы хорошо известно [1,2]. Особенно просто оно выглядит для прямоугольного потенциала (рис.1), в котором атомы цепочки могут закрепляться только на стенках потенциала. В этом случае модулированное с периодом $1/\rho$ решение имеет только два независимых параметра – число атомов в области потенциальных ям $N\rho L$ и число атомов в области потенциальных барьеров $M\rho L$, где L – полное число атомов цепочки, $\rho = 1/(N + M)$. Основное состояние находится путем варьирования потенциальной энергии системы по этим параметрам. Пусть размер потенциальных ям равен размеру барьеров и равен 1,

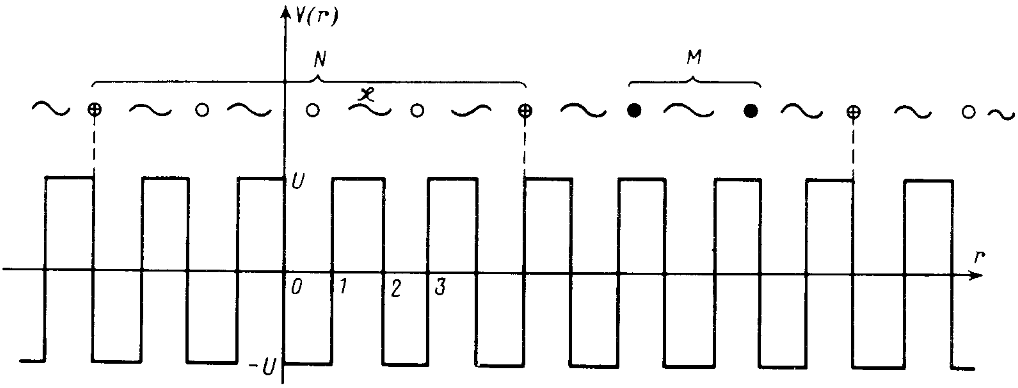

Рис.1.

а период цепочки равен $2+\delta$, $\delta \ll 1$. Если потенциал $V(r)$ задать функцией

$$V(r)=\begin{cases} -U & \text{—внутри потенциальных ям} \\ 0 & \text{—на границах ямы и барьера} \\ U & \text{—в области потенциального барьера} \end{cases}, \tag{1}$$

то, как видно из рис.1, полная энергия E одномерной системы записывается в виде

$$E=-U\frac{(N-M-2)}{N+M}L+\frac{\kappa}{2}[(N-1)(\delta-\delta_1)^2+(M+1)(\delta-\delta_2)^2]\frac{L}{N+M}, \tag{2}$$

где κ – коэффициент упругости цепочки, $\delta_1=1/(N-1)$, $\delta_2=1/(M+1)$. Произведя замену: $x=N-1$, $y=M+1$, $U/\kappa=\delta_c^2$, перепишем (2) в виде

$$\epsilon=\frac{2E}{\kappa L}=\delta^2-2\delta_c^2\frac{(x-y)}{x+y}-\frac{4\delta}{x+y}+\frac{1}{xy}, \quad x>0, \quad y>0. \tag{3}$$

Обобщением (3) на d-мерный случай служит следующая запись плотности энергии ϵ:

$$\epsilon=\frac{2E}{\kappa L^d}=d\delta^2-2\delta_c^2\frac{(x-y)^d}{(x+y)^d}-d\frac{4\delta}{x+y}+d\frac{1}{xy}, \quad x>0, \quad y>0, \tag{4}$$

в чем легко самостоятельно убедиться на примере $d=2$ (рис.2). Анализируя ϵ в (4) как функцию двух переменных x, y, для локальных минимумов имеем два решения. Первое имеет вид

$$\begin{gathered} x=\xi/\delta(\xi-1), \quad \xi=(\delta_c/\delta)^{2/(d-2)} \\ y=\xi/\delta(\xi+1), \quad x>0, \quad y>0; \\ \epsilon=(d-2)\delta^2/\xi^2; \end{gathered} \tag{5}$$

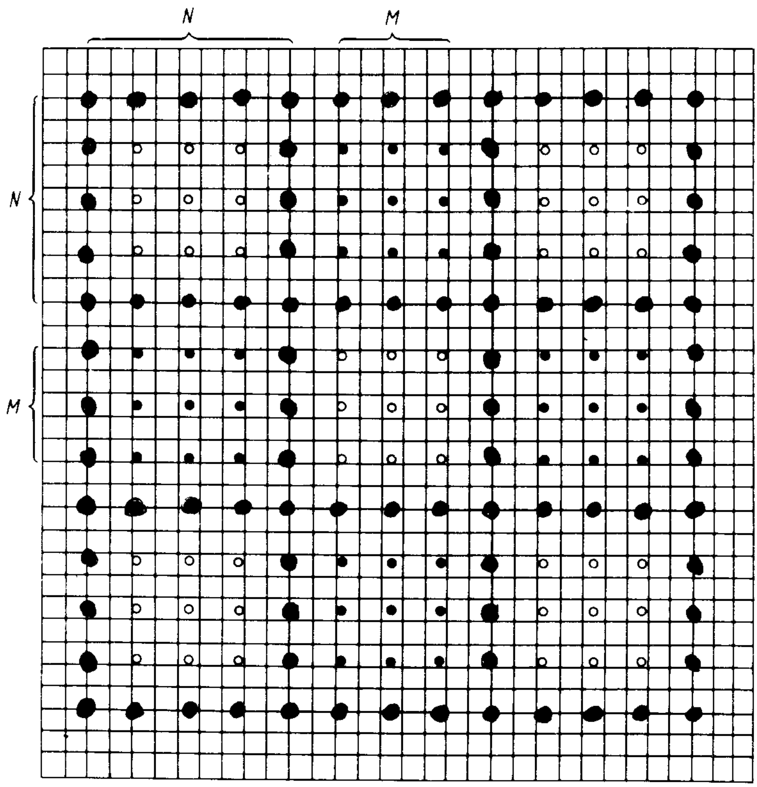

Рис.2. Качественно изображено основное состояние кристалла ($d = 2$, $\delta = 1/4 \geq \bar{\delta}_c$), где ○ – атом кристалла внутри потенциальной ямы, • – атом кристалла внутри потенциального барьера, ● – атом кристалла на границе потенциальных ям и барьеров

второе решение

$$x = y = 1/\delta,$$
$$\epsilon = 0. \tag{6}$$

Кроме того, имеется граничное решение $x = L \to \infty$, описывающее соразмерную фазу (однородно сжатый кристалл), с энергией

$$\epsilon_0 = d\delta^2 - 2\delta_c^2. \tag{7}$$

Сравнивая ϵ в (5) с ϵ_0, делаем вывод – решение (5) реализуется только при $d = 1$ и $\delta \geq \delta_c$. В этом случае переход из соразмерного состояния с $\rho = 0$ к модулированному состоянию по параметру несоразмерности δ в точке $\delta = \delta_c$ непрерывен. Сравнивая ϵ в (6) с ϵ_0, заключаем: при $d \geq 2$ по параметру δ в точке $\delta = \tilde{\delta}_c = (2/d)^{1/2}\delta_c$ имеет место фазовый переход первого рода, ρ меняется скачком от $\rho = 0$ до $\rho = \tilde{\delta}_c/2$. Минимизация энергии проводилась на классе самых простых модулированных решений и при предположении об ортогональности упругих связей атомов кристалла. Рассмотрение других решений, в частности модулированных только в одном направлении, не приводит к новым результатам. В виду неаналитичности и вырожденности потенциала $V(r)$ в (1), решение для основного состояния при $\delta \geq \tilde{\delta}_c$ совпало с решением недеформированного кристалла (рис.2). В общем случае кристалл при $\delta \geq \delta_c$ будет деформирован и модулирован с периодом $2/\delta$ при незначительном изменении его линейных размеров. При этом соразмерная (гетероморфная) фаза однородно сжатого кристалла реализуется, если $\delta < \tilde{\delta}_c$, с

$$\epsilon_0 = d\delta^2 - \frac{2}{\kappa} V_{min}(r), \tag{8}$$

где $V(r)$ - обобщение потенциала (1). В (8) следует обратить внимание на первое слагаемое, пропорциональное d. Для аналитического периодического потенциала $V(r)$ пороговое значение параметра $\delta = \tilde{\delta}_c$ должно уменьшиться, так как при этом у атомов кристалла появляется дополнительная возможность подстроиться к потенциалу. Обобщение модели на произвольный случай, по-видимому, кардинально не изменит общей картины полученного решения, разве что для $d = 1$, когда учет аналитичности и конечной упругости потенциала приводит к асимметричному по знаку δ характеру фазового перехода [3]. Кроме того, интерес представляет и тот факт (8), что при $d \to \infty$ практически не существует по параметру δ области соразмерной фазы. Возвращаясь к эксперименту, заметим, что увеличение слоев выращиваемого кристалла соответствует увеличению κ в нашей модели, а следовательно, уменьшению $\tilde{\delta}_c$. При определенной толщине пленки δ становится большей $\tilde{\delta}_c$, и кристалл скачком должен перейти в слабодеформированное состояние, что и реализуется на практике.

В заключение выражаю глубокую благодарность участникам семинара Э.М.Баскина за полезное обсуждение работы. Данная работа поддерживается программой "Университеты России как центры фундаментальных исследований".

---

1. F.C.Frank and I.H.Van der Merwe, Proc. R. Soc. **198**, 205 (1949).
2. В.Л.Покровский, А.Л.Талапов, ЖЭТФ **75**, 1156 (1978).
3. А.Н.Филонов, ФТТ **30**, 28 (1988).