НЕСОИЗМЕРИМЫЕ СТРУКТУРЫ НА ПОВЕРХНОСТИ УПРУГОГО ПОЛУПРОСТРАНСТВА

А.С.Ковалев, Е.С.Соколова
Физико-технический институт низких температур им. Б.И.Веркина НАН Украины
Украина, 61103, Харьков, пр. Ленина, 47

В данной работе рассмотрена периодическая система поверхностных дислокаций, называемая несоизмеримой поверхностной структурой (НС), у поверхности упругого полупространства, покрытого монослоем другого вещества.

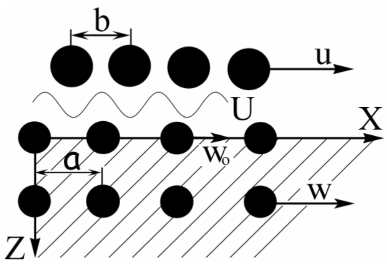

Рис. 1 Геометрия задачи

1.Формулировка модели

Задача рассматривается в рамках «скалярной модели», допускающей смещения лишь в одном направлении, вдоль которого и возникает НС. Как обычно [1-4], взаимодействие одинаковых атомов между собой учитывается в гармоническом приближении, в то время как взаимодействие между атомами разного сорта считается существенно нелинейным, см. Рис.1. При этом энергию системы в длинноволновом приближении, введя обозначение $\xi=(a-b)/a$ - параметр несоизмеримости (ПН), можно записать в виде:

$$E=\frac{1}{a}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\left\{\frac{\alpha a^2}{2}v_x^2+U\left[1-\cos\frac{2\pi}{b}\left(w_0-v+\xi\, x\right)\right]+\frac{1}{a}\int_0^{\infty}dz\frac{\beta a^2}{2}\left(\nabla w\right)^2\right\}. \qquad (1)$$

Из выражения (1) для полной энергии следует замкнутая система одномерных уравнений:

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

$$\sin(2\pi/b)(w_0-v+\xi x)=-(\beta\, ab/2\pi U)Hw_{0x}, \qquad (3)$$

где H - интегральный оператор Гильберта. В случае жёсткой подложки b в последних двух формулах заменяется на a.

2. «Мягкий» монослой на поверхности «жесткого» полупространства.

При условии $w_0 << u \approx -(a/2\pi)\psi$ $(\psi=(2\pi/a)(w_0-v+\xi x))$, соответствующем требованию $(\sqrt{U\alpha}/\beta)(2\pi/a)=\varepsilon<<1$, система (2,3) сводится к следующему уравнению:

$$\sin\psi=(\alpha/U)(a^2/2\pi)^2\psi_{xx}+(a\alpha^2/U\beta)(a^2/2\pi)^2 H\psi_{xxx}. \qquad (4)$$

В случае абсолютно жёсткой подложки ($\beta=\infty$, $\varepsilon=0$) задача о НС сводится к модели Френкеля - Конторовой, а уравнение (4) сводится к статической редукции SGE, решение которого для НС хорошо известно (см. [2]): $\psi_0=\pi+2\,\mathrm{am}(\kappa/k,k)$, $\kappa=x\sqrt{U/a}\,(2\pi/a^2)$, его период $L_0=2k\,\mathrm{K}(k)\sqrt{\alpha/U}(a^2/2\pi)$. Такая НС возникает с бесконечным периодом при критическом значении ПН ($\xi=\xi_*=(4/\pi a)\sqrt{U/\alpha}$, см. [5]).

В случае слабо податливой, но жёсткой подложки решение уравнения (4) может быть представлено в виде

$$\psi=\psi_0-\varepsilon\, H\psi_{0\kappa}. \qquad (5)$$

Выражения для смещений можно представить в виде рядов:

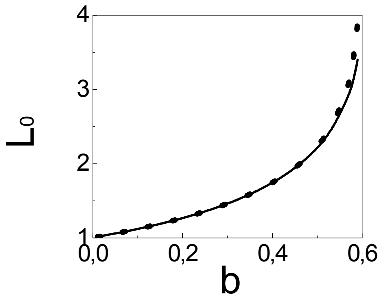

Рис. 2 Период НС как функция межатомного расстояния в монослое для абсолютно жёсткой (сплошная линия) и податливой ($\beta = 50$, пунктир) подложки; $\alpha = 1$, $U = 0{,}1$, $a = 1$.

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

$$w(x,z) = \sum_{s=1}^{\infty} C_s(k)\, e^{-\frac{2\pi s}{L_0} z} \sin\left(\frac{2\pi s}{L_0} x\right), \quad q = \exp(-\pi\, \mathrm{K}'(k)/\mathrm{K}(k)),$$

$$v = \frac{L_0}{2\pi a} \frac{\beta}{\alpha} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{C_s(k)}{s} e^{-\frac{2\pi s}{L_0} z} \sin\left(\frac{2\pi s}{L_0} x\right). \tag{6}$$

Плотности полной энергии системы имеет вид:

$$E_{tot}^{(L_0)} \frac{a}{L_0} = U \left(\left[2\left(\frac{2\,\mathrm{E}(k)}{k^2\,\mathrm{K}(k)} - \frac{1-k^2}{k}\right) - \sqrt{\alpha / U}\, \pi \frac{(a-b)}{k\,\mathrm{K}(k)} \right] \right.$$

$$\left. - \varepsilon \left\{ 2\pi^2 \frac{1 - \mathrm{th}\,\mu}{k^3\,\mathrm{K}^2(k)\,\mathrm{K}'(k)} - \pi \frac{[\ln 2 - \mu\,\mathrm{th}\,\mu + \ln \mathrm{ch}\,\mu]}{k^3\,\mathrm{K}(k)\,\mathrm{K}'^2(k)} \right\} \right) + \frac{\alpha}{2} a^2 \xi^2,$$

$$\mu = -\pi\, \mathrm{K}'/\mathrm{K}. \tag{7}$$

Однако, при любом конечном значении β в узкой области значений ПН вблизи его критического значения рассмотрение задачи в рамках теории возмущений теряет смысл. Вне этой узкой области ПН можно найти модификацию НС, связанную с податливостью подложки, в частности, увеличение периода НС, представленное на Рис.2.

4 «Жёсткий» монослой на поверхности «мягкого» полупространства.

При условии $v << w_0 \approx b\psi / 2\pi - \xi x$ $(\psi = (2\pi / b)(w_0 - v + \xi x))$, соответствующем требованию $\delta = (\beta^2 / \alpha U)(b / 2\pi)^2 << 1$, система (2,3) сводится к следующему уравнению:

$$\sin\psi = (\beta / Ua)(ab / 2\pi)^2 H\psi_x + \delta(\psi - 2\pi\xi x / b). \tag{8}$$

В случае абсолютно жёсткого монослоя ($\alpha = \infty$, $\delta = 0$) уравнение (8) сводится к известному уравнению, возникающему в модели Пайерлса для дислокации в двумерной упругой системе (ниже - УП):

$$\sin\psi = H\psi_{\tilde\kappa}, \qquad \tilde\kappa = x(U / \beta a)(2\pi / b)^2 = x / \lambda, \qquad \lambda = (\beta a / U)(b / 2\pi)^2. \tag{9}$$

Нами найден новый класс точных периодических решений УП для НС, имеющий следующий вид:

$$\psi_0 = 2\,\mathrm{arctg}(\,\mathrm{tg}(g\tilde\kappa) / f) - \pi, \qquad g = f / (1 - f^2), 0 < f < 1; \tag{10}$$

Решение (10) описывает несоизмеримую структуру с периодом $L_0 = \pi / g$. При этом смещения на поверхности подложки и в объёме равны соответственно

$$w_0 = \frac{b}{2\pi}\psi_0 - \xi\, x = \sum_{k=1}^{\infty} b_k \sin\left\{\frac{2\pi}{L_0\lambda} x\right\} - b/2, \quad w = \sum_{k=1}^{\infty} b_k \exp\left(\left\{-\frac{2\pi}{L_0\lambda} k\right\} z\right) \sin\left\{\frac{2\pi}{L_0\lambda} x\right\} - b/2,$$

$$b_k = (-b/\pi + L_0\lambda(a-b)/b\pi)(-1)^k / k + (\tilde q^k / k)(b/\pi) \qquad \tilde q = (1-f)/(1+f). \tag{11}$$

Выражение для полной энергии системы (на один период НС) имеет вид:

$$E_{tot}^{(L)} = U(\lambda / a)\{2f_0 / (f_0 + 1) + 2f_0 / (1 - f_0^2) \ln[(1+f_0)^2 / 4f_0]\} L_0. \tag{12}$$

Из требования конечности энергии определяется единственное значение параметра $f = f_0$ и, следовательно, зависимость периода НС L_0 от ПН ξ :

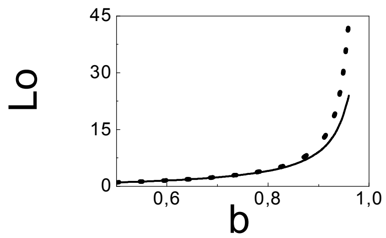

Рис. 3 Период НС как функция межатомного расстояния в монослое для абсолютно жёсткого (сплошная линия) и податливого ($\alpha = 30$; пунктир) монослоя; $\beta = 0{,}1$, $U = 0{,}01$, $a = 1$.

$$f_0 = \sqrt{\left(L_0/2\pi\right)^2 + 1} - L_0/2\pi\ ,\ L_0 = U/(\beta\xi(1-\xi))(2\pi/a)^2\,. \quad (13)$$

Качественное отличие рассматриваемого предельного случая от предыдущего состоит в отсутствии ненулевого критического значения ПН: НС с бесконечным периодом L_0 и с нулевой энергией возникает при $\xi = 0$.

В случае слабо податливого монослоя решение уравнения (8) может быть представлено в виде:

$$\psi = \psi_0 + \delta(2\pi/b)H[\int d\tilde{\kappa}\,((b/2\pi)\psi_0 - \xi\lambda\tilde{\kappa})]\,, \qquad (14)$$

где ψ_0 - решение (10) уравнения (8) в пределе абсолютно жесткого монослоя. Выражения для смещений в подложке и в монослое имеют вид:

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

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

где $\tilde{q}$ - определенная выше функция параметра f, который является функцией периода НС.

Учёт податливости монослоя приводит к появлению критического значения ПН. При любом конечном значении параметра α в узкой области значений ПН вблизи его критического значения рассмотрение задачи в рамках теории возмущений теряет смысл. Однако, вне этой узкой области параметра ξ можно найти модификацию НС, связанную с податливостью покрытия. Период НС и плотность энергии системы (на период НС) в несоизмеримом состоянии могут быть записаны приближённо в аналитической форме:

$$L = L_0(1+\mu),\ E_{tot}^{(L)} = U\frac{\lambda}{a}\left(\frac{2f_0}{1+f_0} + \frac{2f_0}{1-f_0^{\,2}}\ln\frac{(1+f_0)^2}{4f_0} - \delta\left[\mathrm{Li}_2\left(\frac{1-f_0}{1+f_0}\right)^2 + \frac{1}{2}\ln^2\frac{(1+f_0)^2}{4f_0}\right]\right)L_0 \quad (16)$$

Из формулы (16) видно, что учет податливости упругого монослоя вызывает увеличение периода возникающей НС, что продемонстрировано и на Рис.3.

5 Заключение.

Таким образом, во всём интервале значений соотношения жёсткости полупространства и покрывающего монослоя β/α и ПН ξ в разных случаях точно, количественно и качественно найден вид несоизмеримых поверхностных структур, то есть зависимость периода этих структур L от указанных параметров: $L = L(\alpha/\beta,\ \ \xi)$.

Литература

1. F.C.Frank, J.H.Van der Merwe, *Proc.Roy.Soc.London,* **198**, 205 (1949).
2. M.B.Gordon, J.Villain, *J.Phys.C:Solid State Phys.,* **12**, L151 (1979).
3. И.Ф.Люксютов, *ЖЭТФ*, **82**, 1267 (1982).
4. H.D.Greenberg, *Application of Greens Functons in Science and Engineering,* New Jersey (1971).
5. А.С.Ковалев, И.В.Герасимчук, *ЖЭТФ*, **122**, 1116 (2002).