Письма в ЖЭТФ, том 33, вып.6, стр. 343 – 345 *20 марта 1981 г.*

О ДИФФУЗИИ В ДВУМЕРНЫХ КРИСТАЛЛАХ

И.Ф.Люксютов, В.Л.Покровский

Показано, что зацепление солитонов за решетку приводит к особенностям в поведении коэффициентов диффузии монослоя адсорбированных атомов.

В работах [1, 2] исследовалась диффузия субмонослойной пленки Ba на грани Mo (110). Было обнаружено, что коэффициент диффузии D, энергия активации ϵ_a и предэкспоненциальный множитель D_0 являются не монотонными функциями степени покрытия θ (отношения концентрации адатомов к концентрации в плотно заполненном монослое). Исследования структур в этой же системе, проведенные ранее [3], показали существование ряда соизмеримых фаз при малых θ и несоизмеримой фазы при $\theta > 0,6$. Сравнение данных о структурах с данными по диффузии обнаруживает корреляции между ними. В частности ϵ_a и D_0 имеют минимумы при степенях покрытия соответствующих фазам $C(2 \times 6)$ ($\theta = 0,8$) и $C(2 \times 2)$ ($\theta = 0,6$). Вблизи минимумов энергия активации имеет четко выраженные плато в интервале $\Delta\theta \sim 0,1$, а D_0 возрастает в $10^3 \div 10^5$ раз в интервале $\Delta\theta \sim 0,1$[1]).

Согласно принятым сейчас теоретическим представлениям, несоответствие периодов пленки и подложки при малых отклонениях от соизмеримости компенсируется решеткой солитонов (областей сжатия или растяжения) [4, 5]. При анизотропном потенциальном рельефе подложки решетку солитонов можно представить в виде системы эквидистантных полос с некоторым периодом l. При заданном числе частиц период связан с отклонением степени покрытия θ от ее значения в точке соизмеримости θ_0 соотношением $l = a(\theta - \theta_0)^{-1}$ где a – период решетки подложки. Для упрощения мы будем подразумевать ниже, что θ_0 соответствует равенству периодов пленки и подложки. Энергия отдельного солитона периодически с периодом подложки зависит от положения его центра. Этот эффект аналогичен барьерам Пайерлса для дислокаций в трехмерном кристалле. При достаточно большом l величина периодических барьеров превышает энергию взаимодействия солитонов и они прикреплены к подложке. Поскольку солитоны в двумерном кристалле являются линейными дефектами, то энергия их закрепления пропорциональна размерам кристалла. При некотором критическом l_c взаимодействии между солитонами становится больше их энергии закрепления, и они отрываются от решетки [6]. В результате у несоизмеримого кристалла появляется непрерывная группа трансляций, с которой связаны дополнительные акустические моды [5, 7]. Существование акустических мод в несоизмеримых кристаллах было обнаружено в системе Sr – Mo [110] в экспериментах по дифракции медленных электронов [8]. В настоящей работе мы пытаемся объяснить описанные выше особенности диффузии на основе механизма переноса массы солитонами.

---

[1]) Эти данные были любезно предоставлены авторами работ [1, 2].

В области $l > l_c$, когда солитон в целом закреплен, его движение может происходить так же, как переползание дислокаций в плоскости скольжения трехмерного кирсталла. Именно на солитоне имеется некоторое количество перегибов, движение которых и приводит к переползанию солитона на одну постоянную решетки. Энергия такого перегиба ϵ_k по порядку величины равна $(\lambda V)^{1/2} a^2$, где λ – упругая постоянная двумерного кристалла, V – амплитуда потенциального рельефа подложки. Число таких перегибов $n_k \sim \exp(-\epsilon_k/T)$. В реальной системе существуют дефекты подложки, которые являются закрепляющими центрами для солитонов. Энергия точечного дефекта ϵ_d в несоизмеримой решетке порядка λa^2. Время срыва солитона с точечного дефекта $\tau_d \sim \omega_o^{-1} \exp(\epsilon_d/T)$, где ω_o – характерная частота. Сравним это время с временем движения перегиба τ_k между двумя дефектами. Последнее можно оценить по порядку величины как $\tau_k \sim (c\, \omega_o N^2/k)^{-1}$, где c – концентрация дефектов в расчете на один узел. Движение перегибов определяет коэффициент диффузии, если $\tau_k > \tau_d$, т.е. при $c < \exp[(2\epsilon_k - \epsilon_d)/T]$. Таким образом, при достаточно малых c температурная зависимость D определяется множителем $\exp(-\epsilon_k/T)$.

При $l < l_c$ движение солитонов в отсутствии дефектов должно было бы происходить чисто механическим образом (с трением). Поэтому в этой области l диффузия определяется временем τ_d. Следовательно, при переходе от $l < l_c$ к $l < l_c$ происходит изменение энергии активации от ϵ_k к ϵ_d. Условием существования несоизмеримых структур является неравенство $V < \lambda$, при выполнении которого $\epsilon_d > \epsilon_k$. При дальнейшем сжатии энергия активации увеличивается вследствие роста λ.

Рассмотрим теперь поведение предэкспоненциального множителя. В области $l > l_c$ происходит диффузия перегибов, в каждом из которых заключен дополнителнтый адатом, поэтому $D_o \sim \omega_o a^3 l^{-1}$. В случае $l < l_c$ при срыве солитона с дефекта происходит смещение на l участка площадью порядка a^2/c, содержащего $(\theta - \theta_o)/c$ дополнительных адатомов. Такую область можно рассматривать как "частицу", движущуюся под действием градиента давления в упругой решетке солитонов, вызванного градиентом концентрации. Сила F, действующая на такую "частицу" пропорциональна произведению разности явлений Δp на ее поперечный размер $a c^{-1/2}$: $F \approx \Delta p / a c^{-1/2}$, а $\Delta p \approx \left(\frac{\partial\theta}{\partial p}\right)\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right) a c^{-1/2}$.

Используя стандартное выражение для диффузионного потока под действием постоянной силы, находим:

$$D_o = \frac{\theta - \theta_o}{c^2} \frac{l}{T} \omega_o a^3 \frac{\partial p}{\partial \theta}. \tag{1}$$

Давление в системе солитонов p по порядку величины равно $\lambda a^2 l_o^{-2} \times \exp(-l/l_o)$, где $l_o \sim a(\lambda/V)^{1/2}$ – ширина солитона. Подставляя это значение в формулу (1), находим

$$D_o = \omega_o a^2 \frac{\lambda a^3}{c^2 T l_o} \left(\frac{l}{l_o}\right)^2 \exp(-l/l_o). \tag{2}$$

Формула (2) показывает, что D_0 является очень резкой функцией от l или, что то же самое, от $\theta - \theta_0$. Характерное ее значение в максимуме отличается большим множителем $\lambda a^3/c^2 T l_0$ от значения $D_0 \sim \omega_0 a^2$ для точечных носителей.

Закрепление на дефектах приводит к возникновению малой щели Δ в энергетическом спектре. По порядку величины $\Delta \sim s a c^{-1/2}$, где s – скорость звука: $s^2 = (\partial p/\partial l)/M a$. Откуда

$$\Delta \sim \left(\frac{a}{l_0}\right)^{3/2} c^{1/2} T_D \exp\left(-l/2l_0\right), \qquad (3)$$

где T_D – температура Дебая для решетки адатомов, M – масса адатома. Щель, очевидно, мала при реалистических значениях параметров (не более 1 К). Это объясняет, почему в измерениях фактора Дебая – Уоллера [8] не проявляется наличие дефектов.

Аналогичное поведение ϵ_a и D_0 наблюдалось вблизи концентраций соответствующих соизмеримым фазам $C(2 \times 3)$, $C(2 \times 2)$ и $C(1 \times 1)$ в системе Li – W [110] [9].

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
11 февраля 1981 г.

Литература

[1] Ю.С.Ведула, А.Т.Лобурец, А.Г.Наумовец. Письма в ЖЭТФ, 28, 258, 1978.

[2] Ю.С.Ведула, А.Т.Лобурец, А.Г.Наумовец. ЖЭТФ, 77, 773, 1979.

[3] A.G.Fedorus , A.G.Naumovets. Yu.S.Vedula. Phys. Stat. Sol.,(a). 13, 445, 1972.

[4] F.C.Frank, J.H.Van der Merve. Proc. Roy. Soc. London, 198, 205,1949

[5] В.Л.Покровский, А.Л.Талапов. ЖЭТФ, 78, 269, 1980.

[6] V.L.Pokrovsky. J. de Phys. (in press) 1981 г.

[7] S.Aubry. Preprint (1980). Seminar on the Rieman problem, spectral theory and complete integrability 1978/79. Ed. by D.Chudnovsky Springer Verlag 1980.

[8] А.Г.Наумовец, А.Г.Федорус. ЖЭТФ, 73, 1085, 1977.

[9] Ю.С.Ведула, А.Т.Лобурец, А.Г.Наумовец. Препринт ИФ АН УССР, 1980.