Письма в ЖЭТФ, том 56, вып.8, стр.406 - 408 25 октября 1992 г.

ПОДПОВЕРХНОСТНЫЙ РОСТ СМЕКТИКОВ

В.И.Марченко

Институт физики твердого тела РАН,

142432, Московская обл., Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 17 сентября 1992 г.

Предложен новый механизм роста атомногладкой грани смектического жидкого кристалла. В случае, когда энергия смектической дислокации меньше $\sqrt{2}$ энергий поверхностной ступени, рост происходит за счет зарождения, разрастания и слияния петлевых дислокаций в экспоненциально большом слое под поверхностью смектика.

Рост идеальной атомногладкой поверхности кристалла происходит путем зарождения, разрастания и слияния новых атомных слоев (см. [1]). Этот, называемый послойным, механизм роста должен осуществляться и в смектических жидких кристаллах, в которых плотность является периодической функцией лишь одной координаты. В смектиках, однако, возможен и иной механизм роста в направлении атомногладкой поверхности. Дело в том, что дислокации здесь, в отличие от кристаллов, имеют конечную энергию на единицу длины (см. [2]). Поэтому с процессом зарождения новых слоев на поверхности соперничает процесс зарождения и роста петлевых дислокаций в объеме смектика, и, в результате, как будет показано в настоящей заметке, оказывается возможным осуществление подповерхностного механизма послойного роста.

"Выключим" сначала процесс зарождения новых слоев как на поверхности, так и в объеме. Тогда, при отклонении температуры от точки перехода, возможно фазовое и механическое равновесие жидкость–смектик при ориентации границы раздела параллельно смектическим слоям. При этом в смектике осуществляется состояние с анизотропными напряжениями – нормальное к границе напряжение равно давлению в жидкости, а в тангенциальной плоскости напряжение устанавливается так, чтобы выполнялись условия равенства химпотенциалов фаз. Возможность установления такого равновесия связана с процессами диффузионного переноса молекул между смектическими слоями и между жидкостью и первым поверхностным слоем.

Полученное состояние смектика метастабильно – выгодно изменить количество слоев за счет изменения двумерной плотности молекул в слоях с тем, чтобы привести систему в нормальное состояние с изотропным давлением. Изложенные соображения приводят, очевидно, к следующему возможному механизму роста смектика. На границе устанавливается рассмотренное выше сосуществование жидкости и анизотропно напряженного смектика. Под поверхностью в некотором макроскопическом слое за счет зарождения петлевых дислокаций (в кристаллах известен аналогичный эффект при пересыщении вакансий или межузлий – см., например, [3]) происходит рост новых слоев, приводящий к снятию на больших расстояниях от поверхности анизотропии напряжения.

В качестве параметра отклонения локального состояния смектика от равновесного (реализующегося далеко от поверхности) выберем отклонение $\delta\rho$ двумерной плотности молекул в смектическом слое. Значение $\delta\rho$ непосредственно вблизи границы соответствует описанному выше фазовому равновесию.

Вдали от поверхности состояние смектика стремится к равновесному. Таким образом, при малых отклонениях температуры от температуры перехода граничные условия для профиля $\delta\rho$ можно записать в виде

$$\delta\rho|_{z=0} = \gamma\delta T; \qquad \delta\rho|_{z=\infty} = 0. \tag{1}$$

Уравнение переноса молекул от поверхности вглубь смектика сводится к следующему закону сохранения вещества,

$$\partial_t\rho - D\partial_z^2\rho = I, \tag{2}$$

здесь I – сток молекул во вновь зарождающиеся и растущие слои, D – коэффициент диффузии. Отличие предлагаемого механизма роста от обычного послойного лишь в том, что новые слои образуются не только на поверхностном слое, но и между слоями в объеме. Поэтому, пользуясь очевидной аналогией с процессом послойного роста [1], для величины I можно написать следующее соотношение

$$I \propto \exp(-U_c/3T), \tag{3}$$

где U_c – энергия образования критического зародыша нового слоя. В настоящей работе ограничимся вычислением лишь показателя экспоненты для скорости роста, поэтому в (3), а также далее предэкспоненты не принимаются во внимание.

Энергия круглого зародыша нового слоя радиуса R равна

$$U(\delta\rho, R) = -\pi R^2 A\delta\rho + 2\pi R\alpha, \tag{4}$$

где первый член задает выигрыш при образовании нового слоя в метастабильном состоянии смектика, второй – энергию границы зародыша (кольцевой дислокации). Экстремуму выражения (4) отвечает энергия критического зародыша

$$U_c(\delta\rho) = \pi\alpha^2/A\delta\rho. \tag{5}$$

Пренебрегая скоростью изменения плотности, умножим уравнение (2) на $\partial_z\rho$ и с учетом соотношений (3) и (5), найдем первый интеграл с указанной выше точностью

$$(\partial_z\rho)^2 \propto \exp(-U_c(\delta\rho)/3T). \tag{6}$$

Скорость роста смектика V определяется, очевидно, потоком втекающих в поверхность молекул

$$V \propto D\partial_z\delta\rho|_{z=0} \propto \exp\left(-\frac{\pi\alpha^2}{6AT\gamma\delta T}\right). \tag{7}$$

При обычном (поверхностном) послойном механизме имеет место выражение для скорости роста (см. [1] глава I, ф-ла (83)), отличающееся от формулы (7) лишь заменой энергии дислокации α на энергию ступени и коэффициентом 3, вместо 6 в знаменателе показателя экспоненты. Таким образом, если энергия смектической дислокации меньше $\sqrt{2}$ энергий поверхностной ступени, то рост смектика должен происходить по предлагаемому механизму подповерхностного роста.

Указанная смена коэффициента (3 на 6) произошла благодаря участию в процессе послойного роста экспоненциально большого приповерхностного слоя. Интегрируя уравнение (6), найдем профиль отклонения плотности

$$\delta\rho = \frac{\pi\alpha^2}{6AT}\left(\ln\frac{b+z}{a}\right)^{-1}; \qquad b = a\exp\frac{\pi\alpha^2}{6AT\gamma\delta T}, \tag{8}$$

где a – параметр длины, зависящий как от кинетических, так и от равновесных параметров задачи, а также степенным образом от близости к точке перехода.

Пусть теперь скорость роста контролируется обычным поверхностным послойным механизмом. В этом случае границу фазового перехода также сопровождает хвост отклонения плотности. Для его определения можно пренебречь диффузией. Ищем решение в виде стационарного профиля в системе координат движущейся со скоростью границы. Тогда уравнение (2) сводится к следующему

$$-V\partial_z\rho = I, \tag{9}$$

откуда, при граничных условиях (1), находим

$$\delta\rho = \frac{\pi\alpha^2}{3AT}\left(\ln\frac{c+z}{V\tau}\right)^{-1}; \qquad c = V\tau\exp\frac{\pi\alpha^2}{3AT\gamma\delta T}, \tag{10}$$

где τ зависит от предэкспоненты стока I и параметра α^2/AT.

Ясно, что в обычных кристаллах также имеется аналогичное возмущение под поверхностью. Перенос вещества при этом осуществляется диффузией вакансий и межузлий. Однако, из-за логарифмического характера энергии дислокаций, скорость роста может определяться лишь обычными поверхностными механизмами послойного или нормального роста.

Благодарю Е.А.Бренера и С.В.Иорданского за полезное обсуждение. Работа частично финансировалась грантом Американского Физического Общества.

1. Современная кристаллография. Образование кристаллов. М.: Наука, 1980, 3.
2. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Теория упругости. М.: Наука, 1987, §45.
3. Ж.Фридель. Дислокации. М.: Мир, 1967, гл. 5, §4.1; перевод J.Friedel. Dislocations, Pergamon Press, 1964.