

Кинематическое размножение элементарных ступеней на поверхности кристалла

А. Я. Паршин¹⁾, В. Л. Цымбаленко⁺

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, 119334 Москва, Россия

⁺ РНЦ “Курчатовский институт”, Институт сверхпроводимости и физики твердого тела, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 февраля 2003 г.

Рассматривается динамика элементарных ступеней на атомно-гладкой границе кристалл–жидкость и, в частности, процесс столкновения ступеней противоположного знака. Показано, что наряду с обычной аннигиляцией ступеней при таких столкновениях, при определенных условиях возможны как “переброс” ступеней в соседний ряд с образованием нового атомного слоя (прохождение), так и отражение ступеней друг от друга. “Переброс” ступеней дает качественно новый механизм роста граней в отсутствие возобновляемых источников, таких как ростовые дислокации. В этих условиях кинетика роста кристалла с атомно-гладкими гранями существенно изменяется. В частности, рассмотренные процессы могут лежать в основе физических механизмов экспериментально наблюдающихся необычных режимов роста кристаллов гелия при низких температурах.

PACS: 67.80.–s, 68.45.–v

Хорошо известно, что рост кристалла с атомно-гладкими гранями может происходить либо за счет непрерывно действующих источников элементарных ступеней, таких как винтовые дислокации и источники Франка-Рида, либо за счет двумерного зародышеобразования. Существенным свойством ступеней, обычно не подвергающимся сомнению, является невозможность их пересечения. Для ступеней одного знака это означает невозможность нависания одного атомного слоя над другим, то есть конфигурации с большой избыточной энергией. Из тех же энергетических соображений ясно, что при соприкосновении двух ступеней противоположного знака они аннигилируют в области соприкосновения с образованием перемычки (рис.1а). Свойство непересекаемости ступеней положено в основу классических работ по теории роста кристаллов [1].

Указанное свойство ступеней, безусловно, сохраняется до тех пор, пока все процессы с участием ступеней происходят достаточно медленно, так что в каждый момент времени каждый участок ступени находится в локальном равновесии, а ее кинетической энергией можно пренебречь. Другими словами, соответствующее время релаксации должно быть мало по сравнению со “временем столкновения” w/V , где V – относительная скорость ступеней, а w – характерная ширина ступени, по порядку величины равная межатомному расстоянию. Это условие легко

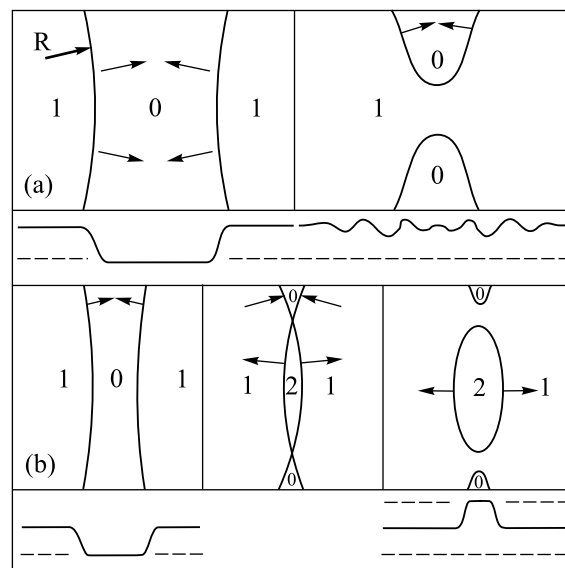


Рис.1. (а) Столкновение ступеней в квазистатическом случае. (б) Прохождение ступеней одна над другой при высоких скоростях и больших временах релаксации. В результате столкновения на этом месте образуется зародыш нового слоя

может быть нарушено в случае атомно-гладких граней кристаллов гелия при температуре, стремящейся к нулю, когда время релаксации неограниченно возрастает, а скорости движения ступеней могут быть очень высокими, вплоть до скорости звука [2]. Естественно предположить, что в таком случае сталкивающиеся ступени противоположного знака смогут

¹⁾e-mail: parshin@kapitza.ras.ru

“по инерции” проходить одна над другой, образуя новый атомный слой (см. рис.1b), или отражаться друг от друга. В данной заметке мы покажем, что при определенных условиях это действительно имеет место. Здесь необходимо отметить, что сама по себе эта идея по существу аналогична идее “кинематического размножения” дислокаций в объеме кристалла, предложенной Франком [3] еще до открытия источников Франка–Рида.

Для описания структуры и динамики ступеней мы воспользуемся так называемым приближением слабой связи, широко используемым в теории фазовых переходов, связанных с возникновением огранки кристаллов гелия (см., например, [4]). В этом приближении из-за сильных флуктуаций эффективный периодический потенциал, удерживающий поверхность кристалла вблизи определенных положений равновесия, мал по сравнению с поверхностной энергией. Соответственно, энергия ступени, то есть переходной области между двумя соседними положениями равновесия поверхности, также мала, а ширина этой области, напротив, велика по сравнению с межатомным расстоянием. Это позволяет ввести непрерывную переменную $\zeta(\mathbf{r})$ – локальное смещение поверхности, усредненное по флуктуациям. Рассмотрим случай предельно низких температур. Тогда диссипация, сопровождающая движение ступеней, так же как и внешнее пересыщение, необходимое для его поддержания, малы, и соответствующими членами в уравнениях движения можно пренебречь. Кроме того, жидкость, как и кристалл будем считать несжимаемой. Тогда смещение поверхности связано только с кристаллизацией или плавлением, а полная энергия есть сумма поверхностной и кинетической энергий. Поверхностная энергия, за вычетом несущественной постоянной, может быть записана в виде

$$H_{\text{surf}} = \int \frac{\alpha}{2} (\nabla \zeta)^2 d^2 \mathbf{r} + \int U_0 (1 - \cos \frac{2\pi \zeta}{a}) d^2 \mathbf{r}, \quad (1)$$

где первый член учитывает изменение площади поверхности, а второй – вклад эффективного потенциала, a – межплоскостное расстояние, α – энергия единицы площади поверхности (мы не делаем здесь различия между поверхностной энергией и поверхностной жесткостью).

Кинетическая энергия есть в данном случае кинетическая энергия жидкости, движение которой возникает из-за смещения поверхности²⁾; принимая во

²⁾ Дополнительный вклад, связанный с перестройкой расположения атомов при переходе из жидкости в кристаллическое состояние [5], относительно мал и не влияет на качественные выводы.

внимание сохранение массы при кристаллизации, получим:

$$H_{\text{kin}} = \frac{1}{4\pi} \frac{(\rho_s - \rho_l)^2}{\rho_l} \int \frac{\partial \zeta(t, \mathbf{r})}{\partial t} \frac{\partial \zeta(t, \mathbf{r}')}{\partial t} \frac{d^2 \mathbf{r} d^2 \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2)$$

где ρ_s и ρ_l – плотности твердого и жидкого гелия. Соответствующее уравнение движения имеет вид

$$\frac{1}{2\pi} \int \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \frac{d^2 \mathbf{r}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \Delta \varphi + \sin(\varphi) = 0, \quad (3)$$

где безразмерные координаты x, y измеряются в единицах ξ , время – в единицах τ :

$$\xi = \sqrt{\frac{\alpha a^2}{4\pi^2 U_0}}, \quad \tau = \sqrt{\frac{\Delta \rho^2}{\rho_l} \frac{a^2}{4\pi^2 U_0}} \xi, \quad (4)$$

$$\varphi = \frac{2\pi \zeta}{a}, \quad \Delta \rho = \rho_s - \rho_l,$$

а U_0 , в свою очередь, может быть выражено через β – энергию единицы длины неподвижной ступени:

$$U_0 = \frac{\pi^2 (\beta/a)^2}{16 \alpha}. \quad (5)$$

Приведем здесь также численные значения для грани (0001) кристалла ^4He : $\alpha = 0.25$ эрг/см² [6–8], $\beta/a = 0.014$ эрг/см² [8] и остальные параметры:

$$U_0 \approx 1.5 \cdot 10^{-3} \alpha, \quad \xi \sim 4a, \quad \tau \sim 5 \cdot 10^{-12} \text{ с},$$

$$V_0 = \xi/\tau \sim 2.8 \cdot 10^4 \text{ см/с} < c \approx 3.6 \cdot 10^4 \text{ см/с}, \quad (6)$$

где c – скорость звука в жидкости.

Реальные ступени на поверхности кристалла всегда несколько искривлены (см. рис.1), причем радиус кривизны R обычно превышает или, в крайнем случае, совпадает по порядку величины с радиусом критического зародыша R_c . Поскольку $R_c \gg \xi$ (в противном случае была бы велика вероятность обычного двумерного зародышеобразования; заметим также, что величина R_c обратно пропорциональна внешнему пересыщению, которое мы считаем малым), то и $R \gg \xi$, так что при столкновении ступени вначале соприкасаются в малой, по сравнению с R , области $R^* \sim \sqrt{R\xi}$, где их можно считать прямолинейными и параллельными друг другу. Поэтому прежде всего мы должны проанализировать одномерный случай, в котором вместо (3) имеем

$$\frac{1}{\pi} \int \ln \left(\frac{R^*}{|x' - x|} \right) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} dx' = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \sin \varphi. \quad (7)$$

Это уравнение решалось численно в следующей последовательности. Сначала определялась функция $\varphi(x - Vt)$, описывающая стационарную форму

одионой ступени, движущейся с заданной скоростью V , измеренной в единицах V_0 . Заметим, что при $V = 0$ эта форма совпадает с формой одиночного кинка уравнения синус-Гордон, а с увеличением V все более отклоняется от нее. При $V > 1$ стационарная форма в виде простого кинка теряет устойчивость. Вопрос о том, какие конфигурации при этом оказываются устойчивыми, пока остается неисследованным.

На втором этапе функция, соответствующая стационарной форме двух ступеней противоположного знака, движущихся навстречу друг другу со скоростями V_1 и V_2 , использовалась в качестве начального условия для решения задачи о столкновении двух таких ступеней. Оказалось, что в зависимости от значений начальных скоростей, возможны три качественно различных результата: прохождение ступеней одна над другой с “перебросом” в соседний ряд, аннигиляция и отражение. Все три процесса сопровождаются возникновением “риплов” большей или меньшей амплитуды. На диаграмме рис.2 указаны области, соответствующие каждому из этих процессов.

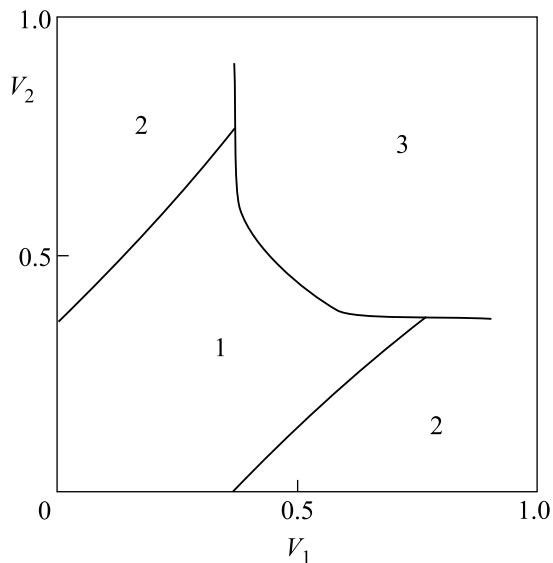


Рис.2. Диаграмма процессов столкновения ступеней с различными встречными скоростями: область 1 – аннигиляция ступеней, 2 – отражение и 3 – прохождение с созданием нового атомного слоя

Дальнейшая эволюция системы существенно различна в этих трех случаях. Для нас наибольший интерес представляет случай (3), когда образуется зародыш нового атомного слоя, ограниченный двумя пересекающимися дугами ступеней (рис.1b). Вообще говоря, следует ожидать, что в области пересечения будет развиваться неустойчивость, приводящая, в конце концов, к образованию перемычки, как

на рис.1b. Однако члены в общем уравнении движения (3), ответственные за эту неустойчивость, в начальный момент малы в меру малости угла пересечения γ , то есть соответствующее время жизни велико. В то же время, результат воздействия возмущений, возникающих в области пересечения, не накапливается со временем, поскольку сама точка пересечения движется вдоль оси Y со скоростью $V_y \cong 2V/\gamma$, то есть быстрее, чем скорость распространения возмущений вдоль ступени ($V_{exc} \leq 1$, см. рис.3). Поэтому образование перемычки становится возможным

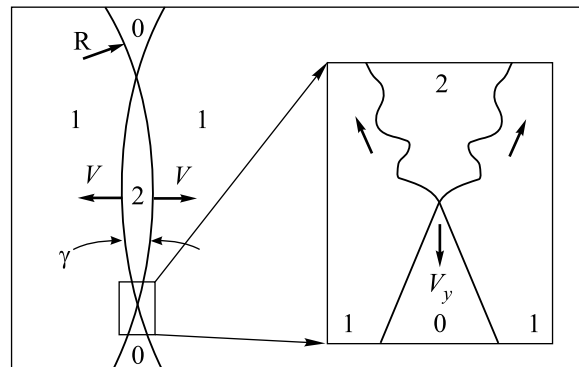


Рис.3. Рождение возбуждений в точке пересечения ступеней и их распространение по границе вновь образованного слоя

лишь при $\gamma \sim 1$, то есть когда размер зародыша нового слоя l порядка R , и тем самым $l > R_c$. Мы видим, что для устойчивого роста зародыша нового слоя фактически не возникает дополнительных, по сравнению с диаграммой рис.2, ограничений.

В заключение заметим, что при учете рассмотренного явления теория роста атомно-гладких граней кристаллов при низких температурах нуждается в существенной корректировке. Возможно, в частности, что предложенный механизм роста лежит в основе наблюдающегося в эксперименте так называемого “взрывного” роста бездислокационных кристаллов гелия [2], который не находит объяснения в рамках известных механизмов роста.

Мы благодарны В.И.Марченко за полезное обсуждение. Данная работа выполнена при поддержке гранта CRDF # Rp-2411-MO-02, Государственной Программы поддержки ведущих научных школ и Российского фонда фундаментальных исследований, грант # 02-02-16772.

1. W. K. Burton, N. Cabrera, and F. C. Frank, *Philos. Trans. R. Soc. London* **243**, 299 (1951)
2. J. P. Ruutu, P. J. Hakonen, A. V. Babkin et al., *J. Low Temp. Phys.* **112**, 117 (1998).

3. F. C. Frank, In: *Report of the Conference on Strength of Solids*, Physical Society, London, 1948, p. 46.
4. P. Nozieres, In: *Solids far from Equilibrium*, Ed. C. Godreche, Cambridge University Press, Cambridge, 1991, p. 1.
5. L. Puech and B. Castaing, *J. de Phys. Lett.* **43**, 601 (1982).
6. A. V. Babkin, D. B. Kopeliovich, and A. Ya. Parshin, *Sov. Phys. JETP* **62**, 1322 (1985).
7. O. A. Andreeva and K. O. Keshishev, *JETP Lett.* **46**, 200 (1987).
8. E. Rolley, C. Guthmann, E. Chevalier, and S. Balibar J. *Low Temp. Phys.* **99**, 851 (1995).