

ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ВТОРОГО РОДА В МОНОСЛОЯХ

С.Е.Бурков

Изучается ориентационный фазовый переход второго рода в монослое атомов, адсорбированных на поверхности металла, при низких температурах.

Ориентационная эпитаксия на субмонослоях адсорбированных атомов была впервые предсказана Новако и Мактейгом [1]. Было установлено, что взаимодействие с подложкой обуславливает определенную ориентацию решетки адатомов, несоизмеримой с подложкой. Уймин и Щур [2] предсказали существование ориентационных фазовых переходов первого рода, состоящих в скачкообразных изменениях угла между решеткой адатомов и подложкой.

Возможны также ориентационные фазовые переходы второго рода. Будем рассматривать подложку как двумерный потенциальный рельеф, имеющий две оси симметрии второго порядка. Рассмотрим случай, когда и решетка адатомов имеет две оси второго порядка. В симметричной фазе оси симметрии подложки совпадают с осями симметрии решетки адатомов. Переход второго рода состоит в том, что симметрия нарушается и решетка адатомов переходит в фазу, где угол между осями симметрии обеих решеток отличен от нуля. При этом возникают два симметричных минимума энергии как функции угла θ между осями. Такие ситуации встречались в численных расчетах Уймина и Щура [2].

Ориентационные фазовые переходы происходят, когда решетка адатомов несоизмерима с подложкой, однако они тесно связаны с переходами в соизмеримую фазу. Как показали Покровский и Талапов [3], если геометрия обеих решеток различна, то происходит одномерное соизмерение. В соизмеримой фазе один из векторов обратной решетки подложки совпадает с каким-либо вектором обратной решетки адатомов. Но из-за различной геометрии решеток их оси симметрии при этом не совпадают (см. рис. 1).

Вдали от перехода (в несоизмеримой фазе) часто оказывается выгодной конфигурация с совпадающими осями симметрии. Поэтому, при приближении к переходу сперва появляется угол между осями симметрии (ориентационный фазовый переход), а потом наступает соизмерение. В системах с одинаковыми геометриями обеих решеток такие ориентационные переходы, по-видимому, отсутствуют.

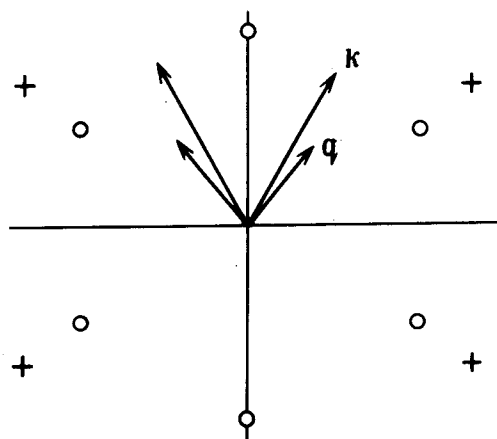


Рис. 1. Несозмеримая фаза, с совпадающими осями симметрии обеих решеток. Крестиком обозначены атомы подложки, кружочком — адсорбированные атомы

Мы вычислили свободную энергию адатомов при температурах, меньших дебаевской, как функцию угла между решетками, а также кривые фазовых переходов в плоскости концентрация — температура.

Энергия взаимодействия адатомов между собой записывается в гармоническом приближении:

$$E_0 = 1/2 \sum_k \epsilon_{\alpha\beta}(k) u_{\alpha}(k) u_{\beta}(-k). \quad (1)$$

Энергия взаимодействия с подложкой рассматривается как возмущение:

$$E_1 = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{a}} V(\mathbf{q}) \cos \mathbf{q}(\mathbf{a} + \mathbf{u}_{\mathbf{a}}), \quad (2)$$

где \mathbf{q} — вектора обратной решетки подложки, \mathbf{a} — вектора прямой решетки адатомов. Минимизация суммы (1) и (2) приведет к ненулевым смещениям в положении равновесия и к выигрышу в энергии:

$$\Delta E = -1/4 \sum_{\mathbf{q}} V^2(\mathbf{q}) \epsilon_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{q}) q_{\alpha} q_{\beta} \quad (3)$$

(см. [1, 2, 4]).

Колебания адатомов около новых положений равновесия будут иметь спектр, отличающийся от спектра колебаний адатомов без учета взаимодействия с подложкой:

$$\begin{aligned} \epsilon'(\mathbf{k}, s) = \epsilon(\mathbf{k}, s) + \sum_{\mathbf{q}} \frac{V^2(\mathbf{q})}{4} |\mathbf{q} \mathbf{v}_{\mathbf{k}, s}|^2 \times \\ \times \sum_{\nu} \frac{2 |\mathbf{q} \mathbf{v}_{\mathbf{q}, \nu}|^2}{\epsilon(\mathbf{q}, \nu)} - \frac{|\mathbf{q} \mathbf{v}_{\mathbf{q}+\mathbf{k}, \nu}|^2}{\epsilon(\mathbf{q}+\mathbf{k}, \nu) - \epsilon(\mathbf{k}, s)} - \frac{|\mathbf{q} \mathbf{v}_{\mathbf{q}-\mathbf{k}, \nu}|^2}{\epsilon(\mathbf{q}-\mathbf{k}, \nu) - \epsilon(\mathbf{k}, s)} \end{aligned} \quad (4)$$

$s, \nu = 1, 2$ — ветви спектра.

Изменение спектра колебаний, обусловленное взаимодействием с подложкой (4), приведет к изменению скорости звука, и, следовательно, энергии фононного газа.

Взаимодействие между адатомами, адсорбированными на поверхности металла в основном диполь-дипольное (см. обзор [5]). В этом случае свободная энергия фононного газа

$$\Delta F(T) = V^2 \frac{ma^{11}}{\hbar^2 d^6} T^3 f(\theta, c) \quad (5)$$

m — масса адатома, d — дипольный момент, a — постоянная адрешетки, T — температура.

Мы провели численный расчет функции $f(\theta, c)$ для случая, когда подложка — грань (011) вольфрама, а адрешетка — правильная треугольная. Минимизация суммы (3) и (5) по углу θ между осями симметрии решеток дает зависимость ориентации от концентрации и температуры. Точки фазовых переходов определяются по теории Ландау. В потенциале взаимодействия с подложкой сохранены только первые гармоники.

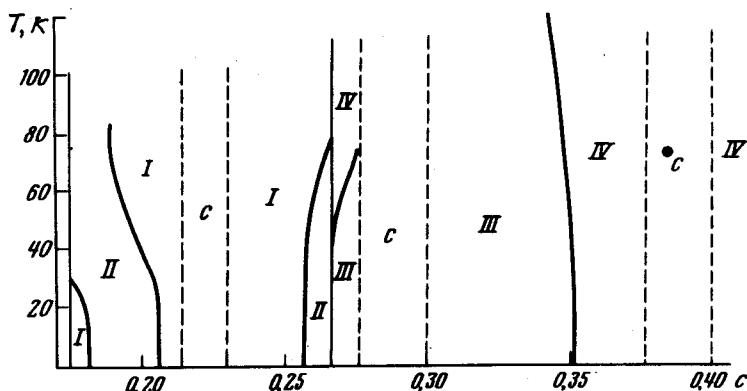


Рис.2.

Фазовая диаграмма приведена на рис.2. В фазе III (она изображена на рис.1) оси симметрии решетки адатомов совпадают с осями симметрии подложки, т.е. угол θ , являющийся параметром порядка, равен нулю (симметричная фаза). В фазе IV угол θ между осями симметрии обеих решеток отличен от нуля. Это фаза со спонтанно нарушенной симметрией. Фазы I и II отличаются от фаз III и IV поворотом решетки адатомов на 90° и отделены друг от друга фазовым переходом первого рода (вертикальная прямая на рис.2). В фазе I оси симметрии обеих решеток совпадают, фаза II — фаза с нарушенной симметрией. Угол θ между осями в несимметричных фазах II и IV достигает 5° . c — соизмеримая фаза.

Фазовые переходы первого рода практически не зависят от температуры, переходы же второго рода обнаруживают температурную зависимость (при изменении температуры от 0 до 100 K критическая концентрация изменяется на 5%). Тот факт, что температура оказывает влияние только на переходы второго рода, обусловлен тем, что свободная

энергия фононного газа (5) мала по сравнению с энергией при нулевой температуре (3). Однако, в окрестности перехода второго рода энергия при нулевой температуре медленно зависит от параметра порядка, и малая температурная добавка оказывается существенной.

Автор выражает глубокую благодарность В.Л.Покровскому, Г.В.Уймину и Л.Н.Щуру за всестороннюю помощь.

Поступила в редакцию
6 марта 1979 г.

Литература

- [1] A.Novaco, J.McTague. Phys. Rev. Lett., 38, 1286, 1977.
 - [2] Г.В.Уймин, Л.Н.Щур. Письма в ЖЭТФ, 28, 20, 1978.
 - [3] V.L.Pokrovsky, A.Talapov. Phys. Rev. Lett., 42, 65, 1979.
 - [4] V.L.Pokrovsky. Solid State Comm. 26, 77, 1978.
 - [5] Л.А.Большов, А.Л.Напартович, А. Г.Наумовец, А.Г.Федорус. УФН, 122, 125, 1977.
-