

О ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ПОРЯДКЕ СТРУКТУРЫ АТОМНО ШЕРОХОВАТЫХ ГРАНИЦ КРИСТАЛЛОВ

В.И.Марченко

Показано, что существует три типа атомно шероховатых состояний поверхности кристаллов. Два из них характеризуются топологическим порядком. Между этими состояниями должны происходить своеобразные фазовые переходы.

При температуре равной нулю термодинамическому равновесию соответствует строго упорядоченное расположение атомов на каждой грани классического кристалла. Ориентация всех граней определяется индексами Миллера, тем самым поверхностная энергия является функцией заданной в рациональных точках. Как было показано Ландау¹, с этим обстоятельством, а также с тем фактом, что на таких поверхностях существуют особые топологические дефекты – ступени, связана своеобразная неаналитическая зависимость поверхностной энергии от ориентации грани. Ситуация качественно изменяется при конечных температурах в связи с появлением атомно шероховатых поверхностей.

Рассмотрим, например, грани близкие к направлению $(1\bar{N}0)$ простой кубической решетки (рис. 1). Такие грани имеют лишь трансляционную симметрию. Для простоты будем обсуждать грани, на которых расстояние между изломами на ступенях одинаково и равно K постоянных решетки. Дефектом поверхности, обладающим минимальной энергией, является смещение одного излома на одно атомное расстояние (т. е. убирание или добавление атома). Если $K, N \gg 1$, то эта энергия мала, так как обусловлена быстро спадающим с расстоянием упругим взаимодействием ступеней ($\sim R^{-2}$) и изломов ($\sim R^{-3}$)². Ясно,

что, если температура больше этой энергии, то трансляционный порядок в решетке из изломов не может сохраниться. Очевидно, однако, что остается топологический порядок, который характерен для обычных двумерных кристаллов (рис. 2, а). В этом случае квадрат смещения каждого излома расходуется логарифмически с размером грани, но относительные расстояния между соседями флуктуируют слабо, пока температура мала по сравнению с их энергией взаимодействия. Здесь имеет смысл только одна компонента вектора смещения v (вдоль ступеней) поэтому плотность энергии деформации сводится к выражению

$$\lambda_1 \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \lambda_2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \lambda_3 \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (1)$$

откуда ясно, что корреляционная функция имеет вид характерный для обычных двумерных кристаллов³.

Благодаря развитым флуктуациям, для рассмотренной ориентации поверхности происходит статистическое усреднение всех характеристик по отдельным участкам, которые являются гранями с определенными индексами Миллера. Ясно, что после такого усреднения приобретают смысл все ориентации поверхности (а не только связанные с рациональными числами) и поверхностная энергия становится аналитической функцией углов. Это является основным свойством атомно шероховатой поверхности.

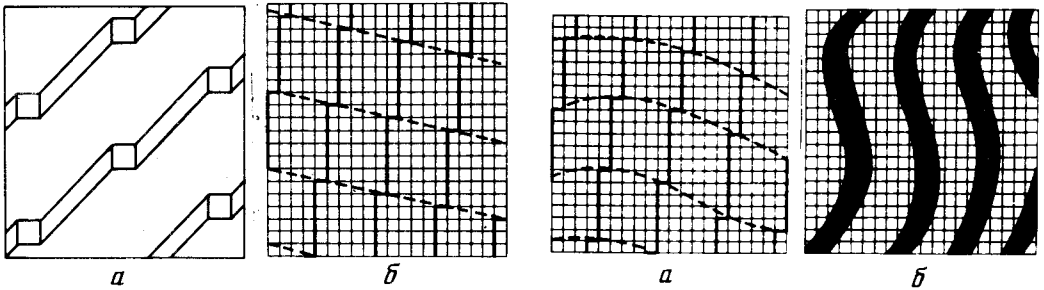


Рис.1

Рис.2

Рис. 1. а – Грань близкая к грани (1N0), б – ее проекция на плоскость (010)

Рис. 2. а – Атомно шероховатая поверхность I типа, б – атомно шероховатая поверхность II типа

Заметим, что фазовый переход из атомно гладкого в атомно шероховатое состояние, на рассмотренном примере, оказывается по существу таким же явлением, что и переход из соизмеримого в несоизмеримое состояние, где так же возникает непрерывная степень свободы.

При повышении температуры, как и в обычном двумерном кристалле должен произойти фазовый переход нарушения топологического порядка. Он, однако, не связан с неустойчивостью Костерлица – Таулеса⁴, так как в кристалле из изломов не существует дислокаций. Действительно, каждая пунктирная линия, проведенная через изломы на рис. 2, а, является ни чем иным, как ступенью грани (1N0). Ступень же не может иметь конца, что необходимо для создания дислокаций. Можно сказать, что переход происходит тогда, когда эти ступени за счет тепловых флуктуаций "распухают" и их ширина сравнивается с расстоянием между ними, т. е. ступени теряют свою индивидуальность. Переход обязательно второго рода, так как переходы первого рода на поверхности кристаллов из-за стрикционных эффектов вообще невозможны⁵.

После фазового перехода изломы на разных ступенях не скоррелированы между собой. Каждая ступень превращается в одномерную систему, которую можно описывать усредненными, по флуктуациям положений изломов на ней, характеристиками. Ступени не могут близко подойти друг к другу из-за упругого отталкивания. Таким образом возникает новое II атомно шероховатое состояние (рис. 2, б), с топологией двумерного смектического жидкого кристалла. Если в I фазе речь идет о флуктуациях ряда ступеней грани (1N0), то

во II фазе — о флуктуациях ряда ступеней грани (010). Энергия деформации II фазы поэтому, в отличие от обычного смектика, снова определяется выражением (1): упругие константы, однако, значительно больше (если считать, что $N \sim K$, то они больше грубо говоря в N раз, что станет ясно, если сравнить изменение энергии поверхности при изменении расстояния между ступенями (N) в два раза и при таком же изменении расстояния между изломами (K).

При дальнейшем повышении температуры должен произойти фазовый переход, природа которого та же, что и у перехода, $I \rightarrow II$, и возникает атомно шероховатое состояние III типа без топологического порядка. Ясно, что этот переход сопутствует переходу атомно гладкое — атомно шероховатое состояние на грани (010), потому что при больших N ступени грани (010) теряют свою индивидуальность на грани (1N0) почти тогда же, когда исчезает понятие о ступени на грани (010).

Состояния I и II осуществляются не на всех гранях. Так, на грани (010) происходит переход из атомно гладкого в шероховатое состояние III типа. На гранях (1N0) отсутствует I фаза, переход происходит сразу во II фазу за счет возникновения определенного числа термоактивированных пар изломов на ступенях — ситуация здесь полностью аналогична системе цепочек из адсорбированных атомов⁶. Если на одной из ступеней образовать пару изломов противоположного знака и развести их на расстояние $n \gg N$, то из-за отталкивания ступеней $\sim T_0/N^2$ (T_0 порядка температуры перехода в шероховатое состояние грани (010)), появляется притяжение изломов $\sim nT_0/N^3$ ("кварки не вылетают"). Приравнявая среднее значение $\langle n \rangle \sim TN^3/T_0$ среднему расстоянию между парами изломов $\sim \exp(T_0/T)$, получим оценку температуры перехода грани (1N0) в шероховатое состояние $\sim T_0/\ln N$ (сравни⁶). Аналогично оценивается и переход в I фазу.

Проведенное рассуждение применимо в окрестности любой атомно гладкой грани, так как на каждой такой грани определены понятия — ступень и излом на ней. Например ступенью грани (1N0) является сбой в расстоянии между ступенями грани (010): $\dots, N, N, N \pm 1, N, N, \dots$. Если рассмотреть теперь грань близкую к (1N0), состоящую из этих ступеней, причем расстояние между ними равно LN , то температура перехода в шероховатое состояние порядка $T_0/\ln(LN)$. Получится смектик с периодом LN , далее при температурах близких к $T_0/\ln N$ произойдет фазовый переход в смектик с периодом близким к N .

Я благодарен А.Я.Паршину, указавшему на нечеткость обычного определения атомно шероховатой поверхности. Попытка изменить ситуацию и привела к идее о топологическом порядке. Благодарю также А.Ф.Андреева, Е.А.Бренера, С.В.Иорданского и А.Я.Паршина за полезное обсуждение.

Литература

1. Ландау Л.Д. Собрание трудов. М.: Наука, 1969, т. 2, стр. 119.
2. Марченко В.И., Паршин А.Я. ЖЭТФ, 1980, 79, 257.
3. Березинский В.Л. ЖЭТФ, 1970, 59, 906.
4. Kosterlitz J.M., Thouless D.J. J. Phys., 1973, Сб, 1181.
5. Марченко В.И. Письма в ЖЭТФ, 1981, 33, 397.
6. Люксютов И.Ф., Медведев В.К., Яковкин И.Н. ЖЭТФ, 1981, 80, 2452.