

АКАДЕМИЯ НАУК СССР  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

---

На правах рукописи

МАРЧЕНКО Владимир Иванович

К ТЕОРИИ КАПИЛЛЯРНЫХ ЯВЛЕНИЙ В КРИСТАЛЛАХ

Специальность 01.04.07 — физика твердого тела

Доклад на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Черноголовка 1991

Работа выполнена в Институте физики твердого тела АН СССР.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук Е. И. Кац,  
член-корреспондент АН СССР Ю. В. Копаев,  
доктор физико-математических наук В. Я. Кравченко

Ведущая организация:

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы АН СССР

Защита состоится „—“ \_\_\_\_\_ 1991 г. в 10 час.  
на заседании специализированного совета Д 003.12.01 при Институте физики твердого тела АН СССР по адресу: 142432, Московская обл., п. Черноголовка, ИФТТ АН СССР.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института структурной макрокинетики АН СССР.

Доклад разослан „—“ \_\_\_\_\_ 199 г.

Ученый секретарь  
специализированного совета  
доктор  
физико-математических наук

В. Д. Кулаковский

Термодинамические свойства поверхности жидкости определяются одной величиной. - работой затрачиваемой при обратимом изменении площади поверхности. Эта работа называется поверхностной свободной энергией, а чаще коэффициентом поверхностного натяжения (или просто поверхностным натяжением), поскольку в жидкости эта величина определяет также механическую поверхностную силу. Как было отмечено Гиббсом, в кристаллах следует различать работу затраченную на образование поверхности и на ее деформирование. Первая величина - поверхностная свободная энергия (для краткости определяют "свободная" обычно опускают). Вторая величина определяет изменение поверхностной энергии при деформировании кристалла и в общем случае является тензором - тензором поверхностных натяжений.

Многие свойства поверхности кристаллов можно исследовать в терминах поверхностной энергии и тензора поверхностных натяжений без привлечения каких-либо моделей, а используя лишь весьма общие представления о структуре поверхности, основанные по существу только на знании симметрии кристалла.

Часто наравне с тензором поверхностных натяжений необходимо учитывать эффекты, обусловленные наличием поверхностной электрической поляризации, которая обязательно отлична от нуля, кроме в силу симметрии поверхности.

В предлагаемом докладе изложены следующие результаты такого исследования:

- 1) выяснены общие свойства тензора поверхностных натяжений и установлены капиллярные поправки в граничных условиях к уравнениям теории упругости;
- 2) найден закон взаимодействия элементарных ступеней на поверхности кристаллов;
- 3) показано, что двумерные фазовые переходы первого рода невозможны как на поверхности жидкости, так и на поверхности кристаллов;
- 4) предсказана аномалия, которая может наблюдаться вместо фазового первого рода на поверхности;
- 5) выяснены особенности двумерных фазовых переходов первого рода на плоских дефектах упаковки и границах двойников;
- 6) установлены ограничения на возможную симметрию поверхности кристаллов;
- 7) предсказано существование стрикционных доменных структур на поверхности кристаллов;
- 8) построена теория фасетированной структуры поверхности;
- 9) предсказаны новые типы атомношероховатого состояния поверхности кристаллов;
- 10) предсказано капиллярное прохождение звука через квантово-шероховатую границу между твердым и жидким гелием;
- 12) предсказан аномальный скачок Капицы на границе твердый-жидкий гелий-4;
- 13) исследована магнитная теплопередача на границе твердый-жидкий гелий-3.

В теории упругости рассматриваются близкорядствующие силы. Этому обстоятельству соответствует описание упругих сил  $f_i$  с помощью симметричного тензора напряжений  $f_i = \partial_k \sigma_{ik}$ . В условиях механического равновесия  $f_i = 0$ . На плоской однородной границе кристалл-жидкость напряжения  $\sigma_{ik}$  могут зависеть лишь от координаты перпендикулярной к границе -  $z$ . Тогда о компонентах тензора напряжений можно утверждать следующее:  $iz$ -компоненты ( $i = x, y, z$ ) вообще не зависят от координат;  $xx$ -,  $xy$ -,  $yy$ -компоненты являются, вообще говоря, произвольными функциями координаты  $z$ . Внутри жидкости и кристалла в равновесии тензор напряжений  $\sigma_{ik} = -p\delta_{ik}$ , где  $p$  - однородное давление. Возможность существования избыточных величин  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$  означает, что при описании поверхности как двумерного объекта необходимо ввести следующую зависимость энергии поверхности кристалла от деформаций в линейном по деформациям приближении<sup>1</sup>:

$$E_s = \int (\alpha + \beta_{\mu\nu} u_{\mu\nu}) ds_0 \quad (1)$$

здесь  $\alpha$  - поверхностная энергия при отсутствии деформаций,  $ds_0$  - элемент интегрирования площади недеформированной поверхности,  $u_{\mu\nu}$  - тангенциальные компоненты тензора деформаций ( $\mu, \nu = x, y$ );  $\beta_{\mu\nu}$  - тензор поверхностных натяжений. Квадратичные по деформациям свойства поверхности кристаллов здесь обсуждаться не будут. Поверхностная энергия  $\alpha$  и компоненты тензора поверхностных натяжений  $\beta_{\mu\nu}$  являются функциями двух углов задающих ориентацию поверхности относительно кристаллографических осей. Для граней, имеющих ось симметрии выше второго порядка,  $\beta_{\mu\nu} = \beta\delta_{\mu\nu}$ , где  $\beta$  -

коэффициент поверхностного натяжения.

Если на плоской поверхности кристалла имеется какая-либо неоднородность, то там величины  $\beta_{\mu\nu}$  являются функциями координат  $(x, y)$ , что приводит к возникновению поверхностных сил действующих на кристалл:

$$f_{\mu} = \partial_{\nu} \beta_{\mu\nu} \tag{2}$$

Поэтому в кристалле должны возникнуть деформации. Отметим, что, так как эти деформации получаются в результате минимизации суммы энергии поверхности, зависящей от тензора деформаций линейно, и объемной энергии, зависящей от деформаций квадратично, то полная энергия этих деформаций обязательно отрицательна.

Рассмотрим теперь кристалл неопределенной произвольной формы погруженный в жидкость. При вариировании по вектору смещения энергии (1) совместно с объемной энергией найдем граничные условия к уравнениям теории упругости с учетом капиллярных поправок <sup>1</sup>:

$$\sigma_{nn} + \beta_{11}/R_1 + \beta_{22}/R_2 + p = 0, \tag{3}$$

$$\sigma_{\mu n} = R_1^{-1} \partial \beta_{\mu 1} / \partial \varphi_1 + R_2^{-1} \partial \beta_{\mu 2} / \partial \varphi_2,$$

здесь  $n$  - индекс нормали к поверхности;  $R_1$  и  $R_2$  - главные радиусы кривизны поверхности;  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  - углы отсчитываемые в плоскоостях главных нормальных сечений. Из условий (2) следует, что в кристалле, находящемся в механическом равновесии с жидкостью, всегда имеются неоднородные напряжения. Это утверждение остается в силе и при наличии фазового равновесия между жидкостью и кристаллом. Соответствующее условие (условие Херринга) есть

$$F_0 + p + (\alpha + \partial^2 \alpha / \partial \varphi_1^2) R_1^{-1} + (\alpha + \partial^2 \alpha / \partial \varphi_2^2) R_2^{-1} = \mu / v_0 \tag{4}$$

где  $F_0$  - свободная энергия единицы объема недеформированного кристалла,  $v_0$  - его атомный объем,  $\mu$  - химический потенциал жидкости.

### §2. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДЕФЕКТОВ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ

Точечный дефект (поверхностная вакансия, адатом) изменяет тензор поверхностных натяжений на величину  $A_{\mu\nu}\delta(r)$ , где  $r$  двумерный радиус-вектор в плоскости границы, дефект расположен в точке  $r = 0$ . Возникающее в кристалле поле деформаций приводит к упругому взаимодействию между дефектами по закону  $r^{-3}$ . Такой же закон взаимодействия обуславливает наличие электрической поляризации у дефекта, которая обязательно отлична от нуля в силу симметрии. Таким образом во взаимодействие поверхностных дефектов наравне входят как упругие, так и электростатические эффекты. В жидкости остается только электрическое диполь-дипольное взаимодействие, причем одинаковые дефекты отталкиваются.

Линейные дефекты (типа цепочки адатомов) взаимодействуют соответственно по закону  $x^{-2}$ . Особый случай - взаимодействие элементарных ступеней на атомногладкой поверхности кристаллов.

Силы поверхностного натяжения создают момент сил действующий на объем кристалла (см. рис. 1) В результате в упругом взаимодействии имеется часть зависящая от знака ступеней <sup>1</sup>:

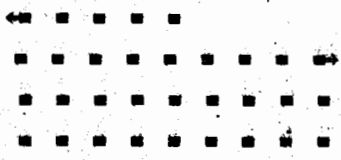


Рис. 1

$$U(x) = (2/\pi E)(1-\sigma^2)[A^2 \pm (\beta a)^2] \tag{5}$$

знак (+) соответствует взаимодействию ступеней одного знака, (-) - взаимодействию ступеней разного знака,  $\epsilon$  - модуль Пнга,  $\sigma$  - коэффициент Пуассона,  $a$  - межплоскостное расстояние в кристалле по направлению нормали к поверхности кристалла. Электростатическое взаимодействие здесь также конкурирует с упругим и в принципе может даже привести к притяжению ступеней одинакового знака.

○ Отметим, что в смектических жидких кристаллах, т.е. структурах в которых плотность является периодической функцией лишь одной координаты  $z$ , на свободной поверхности перпендикулярной оси  $z$  возможно введение понятия об элементарной ступени. Взаимодействие таких ступеней, в силу специфики теории упругости смектиков, на больших по сравнению с атомным расстояниями обусловлено исключительно электростатическим взаимодействием типа (5).

### 53. О НЕВОЗМОЖНОСТИ СОСУЩЕСТВОВАНИЯ ФАЗ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ И ЖИДКОСТИ

Предположим, что на поверхности кристалла осуществляют две различные фазы. Это могут быть как собственные структуры поверхности, так и структуры адсорбированных атомов. Если фазы находятся в термодинамическом равновесии, то поверхностные энергии кристалла в обоих состояниях для ланной грани совпадают. Однако, поскольку эти фазы различны, нет причины чтобы были одинаковыми компоненты тензора поверхностных натяжений. Пусть в изотропном случае в первой фазе  $\nu = \nu_1$ , во второй -  $\nu = \nu_2$ . В согласии с граничным условием (2) в объеме кристалла возникнут деформации. Энергия этих деформаций (как уже было отмечено - отрицательная)



логарифмически расходятся <sup>2</sup>:

$$-\frac{(1-\sigma^2)(\beta_1 - \beta_2)^2}{\kappa E} \ln(R/a) \quad (6)$$

Таким образом, энергия зародыша радиуса  $a$  первой фазы внутри второй помимо обычного члена  $2\kappa\gamma a$ , где  $\gamma$  - энергия границы раздела между поверхностными фазами содержит отрицательный вклад  $\sim R \ln(R/a)$ , что приводит к выгодности образования зародышей с размерами большими  $a^*$ :

$$a^* = a \exp \frac{\kappa E \gamma}{(1-\sigma^2)(\beta_1 - \beta_2)^2} \quad (7)$$

Обе фазы, следовательно, стремятся к перемешиванию, т.е. не могут осуществовать как отдельные фазы, что означает, очевидно, невозможность двумерных фазовых переходов первого рода на поверхности кристаллов.

Помимо различия в компонентах тензора поверхностных натяжений, фазы должны иметь различную величину электрической поляризации (т.н. поверхностный двойной слой). Скачок электрической поляризации на границе двумерных фаз, также приводит <sup>3</sup> к отрицательному логарифмическому вкладу электрической энергии вида (6). На поверхности жидкости остается только этот электрический логарифм. Таким образом, и здесь двумерные фазовые переходы первого рода оказываются невозможными.

Во избежание недоразумений необходимо отметить, что в силу экспоненциального характера величины  $a^*$ , она может оказаться слишком большой, тогда возможно наблюдение двумерного фазового перехода первого рода. Ситуация здесь полностью аналогична с известным ограничением Ландау на фазовые переходы первого рода в

одномерных системах.

#### 54. ПОВЕДЕНИЕ ДОМЕННЫХ СТРУКТУР С ЛОГАРИФИЧЕСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Если величина  $a^*$  велика по сравнению с атомным масштабом, но мала по сравнению с размерами поверхности, то вместо фазового перехода первого рода должно наблюдаться всеобразное поведение системы<sup>4</sup>. Все характерные черты этого поведения можно продемонстрировать на простейшем примере поведения ферромагнитной пленки с одноосной анизотропией во внешнем магнитном поле  $H$ . Если намагниченность направлена перпендикулярно к плоскости пластинки, то вблизи границы между доменами с противоположным направлением намагниченности возникает поле рассеяния с отрицательной энергией типа (6).

Отрицательный знак энергии здесь заранее не очевиден, однако, нетрудно к нему привыкнуть, если вспомнить об общей причине возникновения доменных структур в обычных трехмерных ферромагнетиках. В данном случае двумерного ферромагнетика, приводящего к возникновению магнитного поля в окружающем трехмерном пространстве "выживает" логарифмическая выгода появления доменной структуры.

При достаточно большом внешнем поле пластинка находится в однодоменном состоянии. Энергия зародыша с противоположным направлением магнитного момента  $-M$  равна

$$\epsilon(r, H) = -8\pi^2 A \ln(R/a) + 2\pi a \gamma + 2\pi r^2 m H \quad (8)$$

по мере уменьшения поля становится отрицательной в поле  $H_0$  для зародыша радиусом  $R = R_0$ :

$$n_c \sim (M/\theta) \exp(-\gamma/4M^2), \quad R_c \sim a \exp(\gamma/4M^2) \quad (9)$$

В полях чуть меньших  $n_c$ , в равновесных условиях должна возникнуть решетка из доменов с радиусом практически равным  $R_c$ . Период решетки  $\xi$ , поскольку домены отталкиваются как магнитные диполи по закону  $\sim r^{-3}$ , в полях чуть меньших  $n_c$  зависит от поля по закону  $\xi \sim (n_c - n)^{-1/3}$ . В нулевом поле доменная структура должна иметь период порядка  $R_c$  (см. рис.2). Особенностью такой структуры является отсутствие симметричного запрета на существование у нее средней намагниченности  $m_1 = \lambda m$  ( $\lambda < 1$ ). При изменении знака времени рассматриваемая структура превращается в другую с противоположным направлением намагниченности. Таким образом, исходная

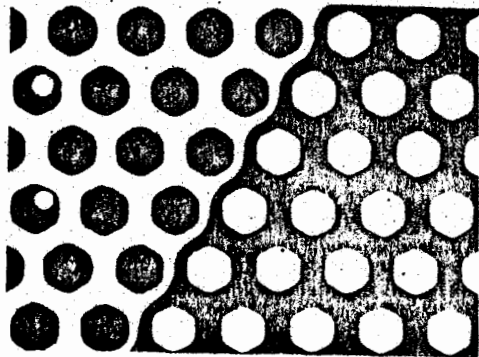


Рис. 2

ситуация (вырожденные состояния  $\pm M$ ), повторяется с новым значением  $\pm m_1$ . Поэтому снова должна возникнуть сверхструктура из доменов  $\pm m_1$ . В принципе возможна ситуация многократного повторения такого сценария. Из соображений подобия можно предвидеть развитие сверхструктур по мере уменьшения поля. В частности, найти

асимптотическое поведение намагниченности в пределе малых полей:

$$m \sim (\ln(H_c/H))^{-\mu} \quad (10)$$

Отметим, что полностью аналогичная картина критического поведения должна наблюдаться вместо фазового перехода первого рода на поверхности кристаллов и жидкостей, если соответствующие параметры логарифмического взаимодействия приводят к достаточно большой величине  $a^*$ . Роль внешнего поля при этом может играть температура, концентрация примесей, одноосная деформация кристалла, электрическое поле.

#### §5. ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПЕРВОГО РОДА НА ПЛОСКОМ ДЕФЕКТЕ ВНУТРИ КРИСТАЛЛА

На границе между двумерными фазами в объеме кристалла на плоском дефекте упаковки или, например, границе двойников, также должны быть рассмотренные выше отрицательные логарифмические вклады в энергию. Здесь, однако, существует еще один, на сей раз положительный, "дислокационный" логарифм<sup>5</sup>. Будем говорить для определенности о фазовом переходе на плоском дефекте упаковки. В каждом из сосуществующих в точке перехода состояний дефект упаковки дол-

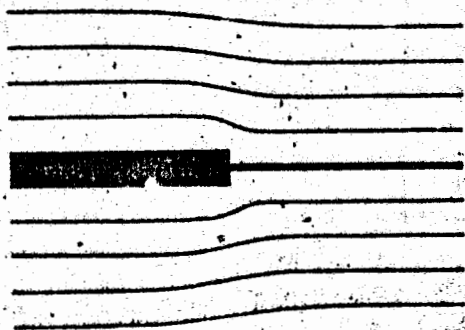


Рис. 3

жен иметь различную толщину  $b_1$  и  $b_2$  (см. рис. 3). Поэтому вокруг линии раздела между фазами в объеме кристалла, помимо деформаций вызванных силами поверхностного натяжения, существует поле деформаций, характерное для краевых дислокаций, с энергией

$$\frac{E(b_1 - b_2)^2}{8\pi(1 - \sigma^2)} \ln(R/a). \quad (11)$$

Если сумма всех логарифмов положительна, то двумерный фазовый переход в рассматриваемой системе возможен, однако имеет ряд отличительных особенностей. Так, например, размер критического зародыша  $R_c$  и его энергия  $E_c$ , как функция параметра близости к переходу  $\Delta$ , имеют необычные логарифмические множители:

$$R_c \sim \Delta^{-1} \ln(1/\Delta), \quad E_c \sim \Delta^{-1} \ln(1/\Delta) \quad (12)$$

## §6. ВОЗМОЖНАЯ СИММЕТРИЯ ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ

Будем называть основной симметрией поверхности кристалла симметрию обусловленную объемными элементами симметрии. Ясно, что фактическая симметрия поверхности может либо совпадать с основной, либо быть ниже. В последнем случае поверхность может находиться в нескольких эквивалентных по симметрии состояниях. Они переходят друг в друга под действием преобразований входящих в основную группу симметрии, но отсутствующих в фактической группе. В силу рассмотренной в §3 стрикционной неустойчивости необходимо полное совпадение компонент тензора поверхностных натяжений в различных вырожденных состояниях поверхности.

Пусть, например, точечная группа основной симметрии будет  $G_n$ .

тогда точечная группа фактической симметрии может быть только  $C_4$ . Действительно, допустим, что фактическая симметрия, например,  $C_2$  (структура  $2_{\times 1}$ ; см. рис. 4). У такой поверхности тензор поверхностных натяжений имеет две независимые компоненты в главных осях. Другое возможное эквивалентное состояние  $(1, 2)$  отличается от первого поворотом на угол  $\pi/4$ . Компоненты тензора поверхностных натяжений при этом меняются местами и, поэтому, на произвольной линии раздела между состояниями испытывают скачок, приводящий к неустойчивости. Следовательно, фактическая точечная группа должна совпадать с основной  $C_4$ . Такая же ситуация в группах  $C_1, C_3, C_{1v}$ . Симметрия на таких гранях может быть ниже основной только за счет увеличения трансляций. В остальных основных группах возможна

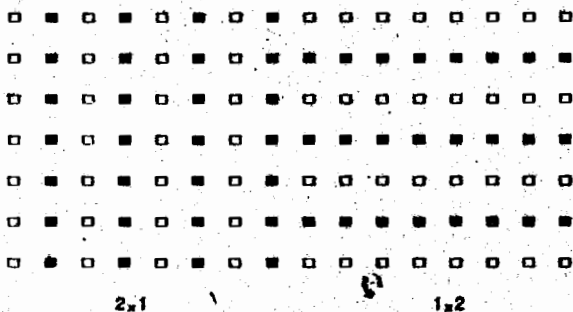


Рис. 4

повышенная фактическая симметрия:  $C_2 - C_1$ ;  $C_{2v} - C_{1v}$ , так как тензор  $\beta_{\mu\nu}$  не меняется при повороте  $C_2$ ;  $C_{3v} - C_3$ ;  $C_{4v} - C_4$ ;  $C_6 - C_3$ ;  $C_{6v} - C_6$ ;  $C_{3v} - C_3$ , так как тензор поверхностных натяжений в этих случаях сводится к  $\beta_{\mu\nu}$ . Ясно, что полученные ограничения на симметрию имеют место и на плоских дефектах в объеме кристалла.

так как рассматриваемые эквивалентные состояния имеют одинаковую толщину (ор. §5).

Отметим здесь, что обсуждаемая неустойчивость обязательно должна наблюдаться на гранях кристалла перпендикулярных винтовым осям. Сама винтовая ось не может входить в группу симметрии поверхности, однако под действием этого преобразования, получаются эквивалентные состояния с повернутыми главными осями тензора поверхностных натяжений.

#### §7. СТРИКЦИОННЫЕ ДОМКИ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ

К настоящему времени на многих кристаллах наблюдается реконструкция поверхности не удовлетворяющая условию §6, что означает, что во всех этих случаях параметр  $a^*$  велик по сравнению с атомным расстоянием. Ясно, что в равновесных условиях должна сформироваться своеобразная двумерная доменная структура<sup>\*</sup>, состоящая из областей представляющих эквивалентные состояния с характерными размерами  $a^*$ . Такая структура обнаружена недавно на грани (001) кристаллов кремния [ Si(100) Surface under an Externally Applied Stress. F.K. Man, W.E. Paschall, M.B. Webb Phys.Rev.Lett. vol.61, p2469-2471, 1968] \*. Авторы этой работы наблюдали обратное перераспределение интенсивности рефлексов дифракции медленных электронов соответствующих доменам  $\{10\}$  и  $\{01\}$  при создании однородной деформации кристалла. Тангенциальной

\* В настоящем док. вкде приведены необходимые ссылки на статьи не отраженные в излагаемых работах автора.

деформация играет роль внешнего поля - пазны з в поверхностной энергии между доменами, согласно (1) линейна по такой деформации. Наблюдаемое поведение интенсивности удовлетворительно согласуется с результатами теоретического анализа [Spontaneous Formation of Stress Domains on Crystall Surfaces. O.L. Alerhand, D. Vanderbilt, R.D. Meade, J.D. Joannopoulos. Phys. Rev. Lett., v. 61, p1973-1976, 1988; v.62, p116, 1989], основанного на стрикционном логарифмическом взаимодействии между доменными границами. Периодическая доменная структура на поверхности кремния наблюдается также непосредственно с помощью туннельного микроскопа [см., например, работу Direct Determination of Step and Kink Energies on Vicinal Si(001). B.S. Swartzentruber, Y.-W. Mo, R. Karlotis, M.G. Lagally, and M.B. Webb, Phys.Rev.Lett. v.65, p1913-1916, 1990].

#### §8. РАВНОВЕСНАЯ ФАСЕТИРОВАННАЯ СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ

В литературе уже довольно давно обсуждается так называемая фасетированная структура поверхности кристаллов. Эта структура представляет собой крупномасштабную периодическую структуру построенную из площадок (как правило трех атомно гладких граней) с ориентациями существенно отличающимися от средней ориентации поверхности. Обычно считается, что фасетированные поверхности возникают по кинетическим причинам. Однако, имеется причина для существования такой структуры и в условиях полного термодинамического равновесия<sup>2</sup>.

Пусть в некотором интервале углов  $\phi_1 \leq \phi \leq \phi_2$ , определяющих ориентацию кристаллических граней, не выполняется условие



устойчивости

$$\alpha + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \varphi^2} > 0 \quad (13)$$

Принято считать, что тогда в равновесной форме кристалла должны наблюдаться ребра, в которых встречаются грани  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$ . Рассмотрим, однако, для исходно неустойчивых ориентаций фазированную структуру (см. рис.5). Если учитывать лишь энергию граней  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$ , то как легко убедиться для поверхностной энергии выполняется равенство

$$\alpha + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \varphi^2} = 0$$

Силы поверхностного натяжения создают вблизи ребер деформации, энергия которых, так же как и в рассмотренном выше случае отрицательна и имеет логарифмическую расходимость (6), обрезанную



Рис.5

на периоде структуры  $L$ . Минимизация суммы энергии деформации и энергии ребер (как линейных дефектов) дает для периода выражение

$$L = a \sin^{-1}[\pi(\varphi - \varphi_1)/(\varphi_2 - \varphi_1)]$$

Условие устойчивости (13) при этом уже выполняется, что в микроскопической картине приводит к появлению всех ориентаций в равновесной форме кристалла.

Опытим, что электрические эффекты, вызванные в полимеризации

граней  $\sigma_1$  и  $\sigma_2$ , также вносят вклад в логарифмическую энергию структуры. Знак этого вклада зависит от взаимной ориентации граней и ориентации поляризации. Поэтому не исключена возможность получения положительной суммы логарифмических вкладов. Тогда фазетированная структура поверхности не выгодна и в равновесной форме кристалла должны наблюдаться ребра.

### §9. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПОРЯДОК АТОМНОШЕРОХОВАТЫХ ГРАНИЦ

При температуре равной нулю термодинамическому равновесию соответствует строго упорядоченное расположение атомов на каждой грани классического кристалла. При достаточно большой температуре, величина которой существенно зависит от ориентации грани, это классическое атомногладкое состояние разрушается и поверхность становится атомношероховатой. Макроскопически эти два состояния отличаются по флуктуационным и корреляционным свойствам. В природе должны наблюдаться несколько различных типов <sup>6</sup> атомношероховатых состояний.

Рассмотрим, например, грани близкие к направлению (100) простой кубической решетки (см. Рис.6). Такие грани имеют лишь трансляционную симметрию. Для простоты, обсудим лишь грани, на которых расстояние между изломами на ступенях одинаково и равно  $k$  постоянным решетки. Дефектом поверхности, обладающим минимальной энергией, является смещение одного излома на одно атомное расстояние (т.е. убирание или добавление одного атома). Если  $k, N \gg 1$ , то эта энергия мала, так как обусловлена быстро опадающим с расстоянием взаимодействием ступеней и изломов (§2). Ясно, что

если температура больше этой энергии, то трансляционный порядок в решетке изломов не может сохраниться. Остается, однако, топологический порядок, который характерен для обычных двумерных кристаллов (см. рис. 7а). В этом состоянии квадрат смещения каждой изломов расходится логарифмически, но расстояния между ближайшими соседями флуктуируют слабо. Здесь имеет смысл лишь одна компонента смещения решетки изломов (вдоль ступеней), поэтому энергия деформаций сводится к выражению

$$\lambda_1 (\partial_x u)^2 + \lambda_2 (\partial_y u)^2 + \lambda_3 \partial_x u \partial_y u$$

откуда следует, что корреляционная функция имеет вид обычный для двумерных кристаллов.

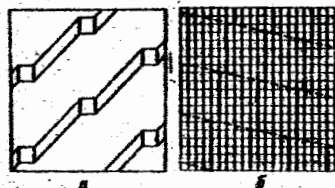


Рис. 6



Рис. 7

Благодаря развитым флуктуациям, для рассматриваемой поверхности происходит статистическое усреднение всех характеристик по отдельным участкам, которые выносятся гранично с определенными индексами Миллера. Ясно, что после такого усреднения приобретает смысл произвольная ориентация поверхности (а не только связанная с рациональными числами) и поверхностная энергия становится аналитической функцией углов. Это является основным признаком атомношероховатого состояния.

Заметим, что фазовый переход из атомногладкого в

атомношероховатое состояние, на рассмотренном примере, оказывается по существу таким же явлением, что и переход из соизмеримого в несоизмеримое состояние, где также возникает непрерывная ступень свободы.

При повышении температуры, как и в обычном двумерном кристалле должен произойти фазовый переход нарушения топологического порядка. Здесь, однако, он не связан с неустойчивостью Костерлица-Таулеса, так как в решетке изломов не возможно введение понятия о дислокациях. Действительно, каждая пунктирная линия, проведенная через изломы на рис.7а, является ничем иным, как ступенью на грани  $(1n0)$ . Ступень же не может иметь конца, что необходимо для создания дислокации. Можно сказать, что переход происходит тогда, когда эти ступени за счет тепловых флуктуаций "растопыряются" и их ширина сравнивается с расстоянием между ними, т.е. ступени теряют свою индивидуальность.

После фазового перехода изломы на разных ступенях не скоррелированы между собой. Каждая ступень превращается в одномерную систему, которую можно описать уряденными по положениям изломов на ней характеристиками. Ступени не могут приблизиться друг к другу из-за отталкивания, т.е. возникает иное шероховатое состояние, с топологией двумерного омегтика (см. рис.7б). Если в первом состоянии речь шла о флуктуациях ступеней грани  $(1n0)$ , то во втором - о флуктуациях ряда ступеней грани  $(010)$ . При дальнейшем повышении температуры, вблизи температуры перехода в шероховатое состояние на основной грани  $(010)$ , на ступени (рис.7б) потеряют свою индивидуальность и возникнет обычное атомношероховатое состояние без топологического порядка.

#### §10. КВАНТОВОШЕРОХОВАТАЯ ГРАНИЦА ТВЕРДОГО-ЖИДКОГО ГЕЛИЯ

Граница между твердым и жидким гелием-4 при температуре меньше 1К обладает совершенно уникальными свойствами. Три наиболее по симметрии грани кристалла гелия находятся в атомногладком состоянии. На всех остальных гранях квантовые флуктуации поверхности оказываются настолько большими, что осуществляется особое квантовошероховатое состояние. Рост и плавление на таких границах при нулевой температуре осуществляется без диссипации - когерентным образом, в каждый момент времени выполняется условие фазового (4) и механического равновесия (3) равновесия. В согласии с этими граничными условиями, дополненными законом сохранения числа частиц, без учета капиллярных поправок получается полное отражение звука от квантовошероховатой границы. Пусть, например, звук падает из кристалла в жидкость. Тогда граничные условия со стороны жидкости сводятся к равенству давления - фиксированному давлению фазового равновесия кристалл-жидкость, т.е. звук не возникнет в объеме жидкости. Учет капиллярных поправок приведет к конечной, пропорциональной частоте, амплитуде прошедшей волны. Отсюда следует, что вероятность прохождения длинноволновых фононов через квантовошероховатую границу пропорциональна квадрату частоты звука <sup>7</sup>. Этот факт значительно затрудняет теплопередачу и скачок Кэпицы здесь должен иметь аномальную зависимость  $T^{-5}$ .

Идея квантовошероховатого состояния, принадлежащая Андреэву и Перрину, подверглась серьезной критике (см., например, [Shape of Crystals at Low Temperatures: Absence of Quantum Roughening. D.S. Fisher, J.D. Weeks. Phys.Rev.Lett. 1963, v.50, p.1077-1080]).

Все аргументы против, однако, по существу исходят из попыток модельного описания явления. По мнению автора, задача микрокопической теории может сводиться лишь к поиску модели, в которой реализуется квантовое шероховатое состояние. Такая модель пока не найдена. Только и всего.

С макрокопической же точки зрения квантовое шероховатое и атомногладкое состояния четко различаются прежде всего тем, какие граничные условия выполняются на поверхности для гидродинамики и теории упругости. Обнаружение аномального скачка Капицы  $\tau^{-5}$  [T.E. Huber and H.J. Maris, Phys.Rev.Lett., 1981, v.47, p.1907] однозначно свидетельствует о квантовом шероховатом состоянии границы твердый-жидкий гелий-4. Что касается теоретических моделей, то, почти всеми уже принятая точка зрения о невозможности такого состояния, по моему мнению, преждевременна. Необходимо осторожно обходиться с квантовыми эффектами. Так, оказывается <sup>6</sup>, что даже в одномерных системах они могут приводить при конечной температуре к фазовым переходам в особые состояния с непрерывным вырождением.

Есть все основания ожидать осуществления квантовое шероховатого состояния на границе твердый-жидкий гелий-3. Здесь, однако, квантовое вырождение системы наступает лишь при температурах ниже 1мК, когда жидкость находится в сверхтекучем состоянии, а кристалл в антиферромагнитном. Основная энтропия в кристалле связана с магнонами. Нетрудно выявить закономерности прохождения магновнов через рассматриваемую границу<sup>6</sup>. Анализ показывает, что здесь нет причины для специально малой магнонной теплопередачи.

Результаты, изложенные в настоящем докладе, опубликованы в следующих работах:

1. Об упругих свойствах поверхности кристаллов  
(совместно с А.Я. Паршиным)  
ЖЭТФ, 1980, т79, стр.257-260
2. Возможные структуры и фазовые переходы на поверхности кристаллов  
Письма в ЖЭТФ, 1981, т33, стр.397-399
3. К теории равновесной формы кристаллов  
ЖЭТФ, 1981, т81, стр.1141-1144
4. О доменной структуре двумерных ферромагнетиков  
ЖЭТФ, 1986, т90, стр.2241-2246
5. Об одной особенности фазовых переходов первого рода на плоских дефектах в кристаллах  
ДАН, 1984, т274, стр.312-313
6. О топологическом порядке структуры атомношероховатых границ кристаллов  
Письма в ЖЭТФ, 1981, т35, стр.459-461
7. Капиллярное прохождение звука и аномал чий скачек Капицы на границе твердый-жидкий гелий  
(совместно с А.Я. Паршиным)  
Письма в ЖЭТФ, 1980, т31, стр.767-769
8. О возможности существования фаз в одномерных системах  
Письма в ЖЭТФ, 1991, т53, стр.611-613
9. Обменные эффекты на границах магнетиков  
ЖЭТФ, 1981, т80, стр.2010-2012

10.10.1991 г. Объем 0,8 у.-и.л. (1,25 п.л.). Зак.553. Тир.100