

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК**ФИЗИКА НАШИХ ДНЕЙ**

538.971

ПЕРЕХОД ОГРУБЛЕНИЯ*Х. ван Бейерен, И. Нольден*

(Институт теоретической физики Утрехтского университета, Нидерланды)

(Structure and Dynamics of Surfaces II: Phenomena, Models, and Methods/Eds. W. Schommers, P. von Blanckenhagen. — Berlin a.o.: Springer-Verlag, 1987. — Ch. 7. Pp. 259 — 300)

Макроскопически переход огрубления поверхности кристалла характеризуется исчезновением с равновесной формы кристалла граней данного направления. Это соответствует исчезновению излома на графике Вульфа — угловой зависимости поверхностного натяжения от ориентации на поверхности. Микроскопически переход огрубления характеризуется тем, что обращается в нуль свободная энергия ступеньки на грани кристалла, или же, иначе, появляются сильные флуктуации влокализации на грани кристалла. Как теория ренормализационной группы, так и результаты, полученные в точно решаемых моделях, показывают, что переход огрубления, вообще говоря, является переходом типа Костерлица—Таулеса, то есть переходом бесконечного порядка с очень слабой особенностью в свободной энергии. Это предсказание подтверждается опытами с кристаллами гелия в жидком гелии. Кроме перехода огрубления обсуждается и вообще связь между графиком Вульфа и равновесной формой кристалла, а также рассматриваются различные возможности огранки кристалла. Дано качественное объяснение тому, что граничащие с кристаллической гранью области будут иметь универсальный неаналитический вид. В заключение мы обсудим связь поверхностного плавления с огрублением, а также такие возможные переходы огрубления, которые не являются переходами Костерлица—Таулеса.

1. История вопроса

Идея о возможности перехода на равновесной поверхности кристалла была выдвинута в 1951 г., в пионерской работе Бёртона и др. [1]. Исходя из решения Онзагера двумерной модели Изинга [2], они предположили, что если особые поверхности кристалла с направлениями, соответствующими устойчивым кристаллическим граням, находятся в равновесии с газом, расплавом или раствором, то эти грани становятся шероховатыми выше температуры перехода. Ниже этой температуры растут грани совершенные (то есть без дислокаций), что обусловлено тем, что в процессе образования зародышей необходимо преодолеть высокий энергетический барьер для образования устойчиво растущего ядра. Растущий слой по крайней мере приближенно можно описать двумерной моделью Изинга или, что лучше, решеточным газом [3], который находится в состоянии сосуществования между "жидкостью" (заполненной частью растущего слоя) и "газом" (незаполненной частью растущего слоя). Выше температуры перехода отсутствует препятствие для образования на поверхности больших кластеров, а рост при перенасыщении будет происходить как одно-

© Springer-Verlag 1987

© Перевод на русский язык,

Академия наук СССР,

"Успехи физических наук" 1991

родное осаждение вещества на растущей поверхности. Описанный таким образом фазовый переход мы будем в дальнейшем называть переходом огрубления.

Бёртон и др. сделали одно важное упрощение в описании растущего слоя: они пренебрегали возможностью возникновения новых слоев до заполнения предыдущего слоя. Если высок порог образования зародышей, то это полностью оправдано, так как раз уж возник критический зародыш, то заполнение слоя происходит быстрее, чем образование зародышей следующих слоев. Однако вблизи перехода огрубления растут одновременно несколько слоев. В результате этот переход отличается от перехода в двумерной модели Изинга, как предполагалось в [1], и скорее оказывается типа Костерлица—Таулеса [4 — 7]. Это означает, что переход бесконечного порядка, т.е. особенность в γ -поверхностном натяжении или свободной энергии поверхности на единицу площади при температуре огрубления T_R является очень слабой. Все производные γ по температуре существуют и являются гладкими функциями температуры. В частности поверхностная удельная теплоемкость не имеет особенности или даже максимума в точке перехода в отличие от предыдущих предположений, основанных на решении Онзагера модели Изинга [1,8]. Кроме того в известной мере поверхность является критическим состоянием при всех температурах $T \geq T_R$. Имеется единственная особенность в γ , обусловленная переходом огрубления при T_R , при $T \geq T_R$ расходится корреляционная длина ξ флуктуаций высоты поверхности [4].

Переход огрубления проявляется макроскопически в равновесной форме кристаллов. Вообще в равновесии поверхность кристалла состоит из граней, которые имеют макроскопически плоские и/или закругленные участки. Грани являются поверхностями кристалла, находящимися в гладком состоянии, то есть ниже температуры огрубления, а закругленные участки могут рассматриваться как составленные из бесконечно малых шероховатых поверхностей, то есть поверхностей выше своей температуры огрубления. Пример равновесной формы, содержащей как грани, так и закругленные участки, приведен на рис. 1. Если температура повышается выше $T_R(\hat{n})$, температуры огрубления поверхности с направлением \hat{n} , размер грани на этой поверхности уменьшается до нуля и направление \hat{n} становится частью скругленной площадки.

Наблюдение перехода огрубления в опытах затруднено по ряду причин. Во-первых, вообще говоря, очень трудно получить кристаллы равновесной формы. Выращиваемые формы в общем случае метастабильны и скорость их релаксации быстро возрастает при увеличении размера кристалла. Хейрод и Метуа [9, 10] в опытах с металлическими кристаллами диаметром несколько мкм при температурах несколько сотен градусов Кельвина получили, что равновесные времена составляют несколько суток. Кроме того оказывается, что те поверхности кристаллов, которые проще исследовать, не испытывают перехода огрубления во всем интервале существования. Обычно поверхности кристаллов, находящихся в равновесии с расплавом, являются шероховатыми вдоль всей линии плавления до тройной точки (рис. 2). Для равновесия кристалла с газом эту трудность часто можно обойти, исследуя поверхности с высокими индексами, которые менее плотно упакованы и имеют более низкие

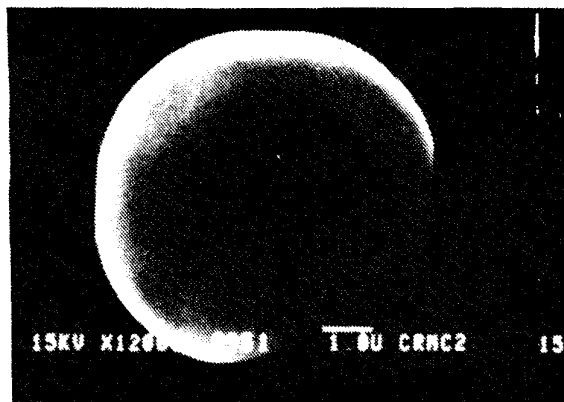


Рис. 1. Равновесная форма кристалла свинца при 520 К, которую наблюдали Хейрод и Метуа [10]. Диаметр кристалла равен приблизительно 5 мкм

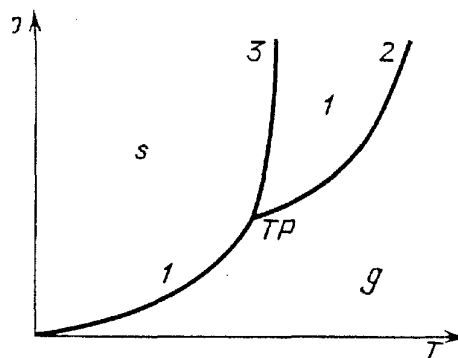


Рис. 2. Типичная фазовая диаграмма простого вещества. Твердая, жидкая и газовая фазы обозначены s , l и g соответственно, тройная точка TP

температуры огрубления. Однако в этом случае возникает проблема с большими временами релаксации, хотя время релаксации отдельной грани обычно много меньше, чем время релаксации при полной реконструкции формы кристалла. Другая сложность опытов заключается в чувствительности свойств поверхности к примесям и дислокациям, из-за этого сложно указать, соответствует ли наблюдаемая форма поверхности чистому равновесному кристаллу. В конце концов даже если переход огрубления наблюдается, природа этого перехода такова, что очень трудно достичь температуры огрубления, что они практически ненаблюдаемы уже при температурах заметно ниже T_R .

Из-за этих сложностей переход огрубления наблюдается всего только в нескольких системах. Павловска и Ненов изучали свойства "отрицательных кристаллов", то есть пузырьков пара внутри кристаллов органических веществ таких, как дифенил [11], нафталин [12] и тетрабромметан [13] и наблюдали исчезновение некоторых граней в определенных хорошо воспроизводимых температурных интервалах. Подобные наблюдения провели Охачи и Танигучи [14] в сульфиде серебра, а Пассероне и др. [15] наблюдали переходы огрубления на поверхностях раздела между твердым Zn и жидким сплавом Zn—Bi—In как функцией состава сплава.

Однако наилучшие до сих пор наблюдения перехода огрубления провели для кристаллов гелия в сверхтекучем гелии Аврон и др. [16], Балибар и Кастиинг [17] и Кешышев и др. [18]. Эта система идеальна для наблюдения перехода огрубления благодаря исключительно быстрому переносу как тепла, так и массы в сверхтекучей жидкости, а также быстрой релаксации к равновесию. Кроме того эти кристаллы являются исключительно чистыми, так как все примеси за исключением ^3He в сверхтекучей жидкости можно очень легко отфильтровать. До сих пор наблюдались переходы огрубления на трех различных гранях при температурах приблизительно 1,3 К [16 — 18], 0,9 К [16, 18] и 0,35 К [19], соответственно. Кроме того, Балибар и его группа ис-

пользовали исключительные свойства гелиевой системы в изящных опытах [20], которые количественно подтверждают, что переход огрубления имеет предсказанный ранее характер перехода Костерлица—Таулеса. Наиболее интересным является то, что наиболее точные определения температуры перехода и других характеристик получены по измерениям скорости роста.

Хотя переходы огрубления сложно наблюдать, рассмотрение их представляет большой интерес. Мы уже упоминали о различных типах роста при слабом перенасыщении. При температурах выше T_R рост непрерывен, а скорость роста пропорциональна перенасыщению, ниже T_R для совершенного кристалла рост характеризуется образованием зародышей и скорость роста практически пропорциональна $\exp(-c/\Delta\mu)$, где $\Delta\mu$ — перенасыщение [21]. При температурах существенно ниже T_R рост за счет образования зародышей подавляется спиральным ростом [1, 22], определяемым винтовыми дислокациями в объеме кристалла. Наблюдалось также, что рост полностью шероховатых кристаллов становится дендритным уже при слабом перенасыщении, но если имеются устойчивые грани, вырастающие образцы остаются ограниченными вплоть до высокого перенасыщения. Эту особенность использовали Джексон и Миллер, чтобы указать на наличие перехода огрубления в гексахлорэтане [23a], кроме того это наблюдали Роллей и др. при выращивании ^3He [23б]. К тому же очевидно, что адсорбционные и каталитические свойства поверхностей сильно зависят от того, шероховатая поверхность или гладкая.

Содержание этой статьи построено следующим образом. В разделе 2 мы обсудим термодинамику формы кристалла, объясним построение Вульфа, связывающее равновесную форму кристалла с анизотропным поверхностным напряжением, и дадим макроскопическое объяснение перехода огрубления. В разделе 3 мы дадим микроскопическое описание перехода огрубления по обращению в ноль свободной энергии ступеньки, то есть по делокализации положения поверхности кристалла. Раздел 4 посвящен статистической механике перехода огрубления. Мы приведем обзор метода ренормализационной группы, а также основные полученные при его помощи результаты, обсудим некоторые точно решаемые модели и дадим полуколичественное объяснение неаналитической формы областей, окружающих грани. В разделе 5 мы сопоставим огрубление и предварительное плавление, рассмотрим вопрос, являются ли все переходы огрубления переходами одного и того же типа, мы обсудим связь между огрублением и многослойным поглощением, а также приведем некоторые заключительные замечания.

В заключение подчеркнем, что нашей целью не является полное описание всех последних достижений, связанных с огрублением.

Наша основная цель дать довольно простое введение в эту область, добавив несколько довольно специальных замечаний в тех местах, где, по нашему мнению, в ряде статей имеются неясности.

Дальнейшее обсуждение перехода огрубления и других свойств равновесных поверхностей кристаллов можно найти в обзорах Викса [24], Зиа [25], Ротмана и Вортиса [26], Бамбара и Кастаинга [27], а также в подробных лекциях Нозьера [29].

2. Макроскопическое описание равновесных форм кристалла

2.1. Построение Вульфа. Пусть поверхностное натяжение $\gamma(\hat{n})$ макроскопически гладкой поверхности раздела зависит от направления \hat{n} (см., например [29] о задаче определения этой зависимости). Тогда равновесной является форма кристалла, которая минимизирует полную свободную энергию поверхности при данном постоянном объеме кристалла. Решение задачи об этой минимизации можно получить при помощи построения Вульфа [26, 30, 31], как показано на рис. 3, для каждого направления строится плоскость, перпендикулярная \hat{n} на расстоянии $\lambda\gamma(\hat{n})$ от начала координат. При этом внутренняя огибающая всех этих плоскостей будет равновесной формой кристалла. Чтобы понять это построение и в то же время получить явное выражение для него, следуем выводу Ландау и Лифшица [32]. Этот вывод не является наиболее общим, например, он ограничен случаем кусочно дифференцируемой, однако имеет преимущество в непосредственности и ясности.

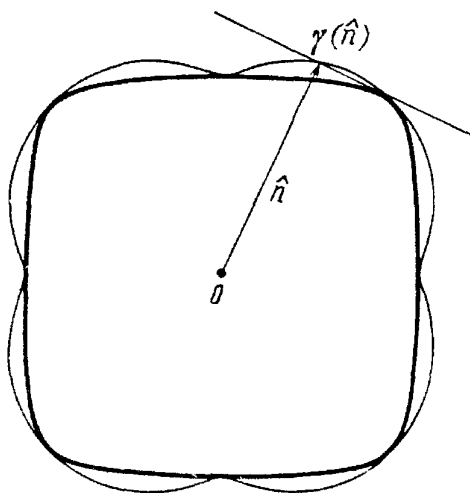


Рис. 3. Построение Вульфа показано на двумерном примере. Расстояние от кривой, показанной тонкой линией, до начала координат в направлении \hat{n} равняется $\lambda\gamma(\hat{n})$, а кривая, показанная толстой линией, соответствует равновесной форме кристалла

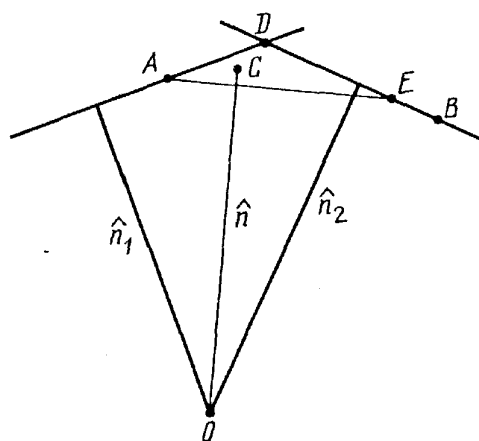


Рис. 4. Выпуклость построения Вульфа (объясняется в тексте)

Из полученных результатов следует, что построение Вульфа всегда дает выпуклую форму. Это показано на рис. 4. Пусть направления \hat{n}_1 и \hat{n}_2 определяют форму кристалла в точках A и B соответственно, а направление $\hat{n} \approx \mu\hat{n}_1 + (1 - \mu)\hat{n}_2$, где $0 < \mu < 1$, соответствует точке C . Тогда C должна находиться внутри призматического объема перпендикулярного треугольнику ADE (прямые AD , BD и AE перпендикулярны \hat{n}_1 , \hat{n}_2 и \hat{n} соответственно), ни C не может быть вне плоскостей, перпендикулярных \hat{n}_1 и \hat{n}_2 , ни A не может быть вне плоскости, перпендикулярной \hat{n} . Выпуклая форма всегда получается на верхних и нижних поверхностях, определяемых как те части поверхности,

которые соответствуют направлениям $+$ и $-z$ соответственно. Пусть верхние и нижние поверхности имеют в декартовых координатах явный вид $z_+(x, y)$ и $z_-(x, y)$, соответственно. Направление верхней и нижней кристаллической поверхности имеет следующий вид

$$\hat{n}_\alpha = \text{sign}\{\alpha\} \cdot (p_\alpha, q_\alpha, 1)(1 + p_\alpha^2 + q_\alpha^2)^{-1/2}, \quad (1)$$

где $\text{sign}\{\alpha\} = +1$ соответствует верхней, а $\text{sign}\{\alpha\} = -1$ нижней поверхности. Параметры p_α, q_α являются направляющими косинусами поверхности кристалла в направлениях x и y , а именно,

$$\frac{\partial z_\alpha}{\partial x} = p_\alpha, \quad \frac{\partial z_\alpha}{\partial y} = q_\alpha. \quad (2)$$

Свободная энергия поверхности на единицу площади проекции на плоскость x, y , соответствующая бесконечно малому участку поверхности над и под точкой $(x, y, 0)$, определяется следующим выражением^(1*)

$$f_\alpha(\hat{n}_\alpha) = \gamma(\hat{n}_\alpha)(1 + p_\alpha^2 + q_\alpha^2)^{1/2}. \quad (3)$$

Теперь задача минимизации полной свободной энергии поверхности при заданном полном объеме сводится к решению вариационной задачи

$$\delta f [f_+ + f_- - 2\lambda(z_+ - z_-)] dx dy = 0, \quad (4)$$

где λ — множитель Лагранжа. Уравнение (4) можно, используя (2), переписать в следующем виде

$$\sum_\alpha \int \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial p_\alpha} \frac{\partial \delta z_\alpha}{\partial x} + \frac{\partial f_\alpha}{\partial q_\alpha} \frac{\partial \delta z_\alpha}{\partial y} - 2\lambda \text{sign}\{\alpha\} \cdot \delta z_\alpha \right) dx dy = 0.$$

Подставляя $f_\alpha = z_\alpha = 0$ вне кристалла, можно выполнить интегрирование, учитывая, что

$$- \sum_\alpha \int \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f_\alpha}{\partial p_\alpha} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial f_\alpha}{\partial q_\alpha} + 2\lambda \text{sign}\{\alpha\} \right) \delta z_\alpha dx dy = 0.$$

Теперь $\delta z_+(x, y)$ и $\delta z_-(x, y)$ могут быть рассмотрены, как независимые переменные. Следовательно, мы получим уравнение

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f_\alpha}{\partial p_\alpha} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial f_\alpha}{\partial q_\alpha} + 2\lambda \text{sign}\{\alpha\} = 0. \quad (5)$$

Следуя Ландау и Лифшицу, найдем решение

$$f_\alpha = \lambda \text{sign}\{\alpha\} \cdot (z_\alpha - p_\alpha x - q_\alpha y), \quad (6)$$

которое можно проверить, подставляя (6) в (5), учитывая (2).

Рассматривая (6) как уравнение плоскости при постоянных p_α и q_α и переменных x , y и z_α , легко можно убедиться в том, что плоскость Вульфа перпендикулярна \hat{n}_α . Однако, рассматривая (6), как определение формы кристалла, следует учитывать, что z_α , x и y являются функциями p_α и q_α , определяемыми (2) и (6) совместно. Простое выражение для этих функций получается из частных производных (6) по p_α и q_α из (2).

Итоговое выражение для формы кристалла имеет следующий вид

$$x = -\frac{1}{\lambda} \cdot \text{sign}\{\alpha\} \cdot \frac{\partial f}{\partial p_\alpha}, \quad (7a)$$

$$y = -\frac{1}{\lambda} \cdot \text{sign}\{\alpha\} \frac{\partial f}{\partial q_\alpha}, \quad (7б)$$

$$z = \frac{1}{\lambda} \cdot \text{sign}\{\alpha\} \cdot \left(f_\alpha - p_\alpha \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} - q_\alpha \frac{\partial f}{\partial q_\alpha} \right). \quad (7в)$$

Действительно, для каждого направления \hat{n}_α поверхность, определяемая (7), является касательной к плоскости Вульфа (6), следовательно (7) дает явное выражение построения Вульфа. Единственность решения (7) уравнения (5) показана в [33, 34].

Из (7в) видно, что огранка кристалла $z(x, y)$ получается преобразованием Лежандра поверхностного натяжения проекции единичной площади [35]. f также получается из формы поверхности при помощи преобразования Лежандра

$$f = z - x \frac{\partial z}{\partial x} - y \frac{\partial z}{\partial y}. \quad (8)$$

Это соотношение позволяет построить график Вульфа (зависимость $\gamma(\hat{n})$), зная огранку кристалла. Хейрод, Метуа сделали это для кристаллов олова, находящихся в равновесии со своим паром [10].

Множитель Лагранжа λ можно получить из (5) с помощью термодинамики поверхности раздела [29]

$$\lambda = \frac{1}{2} \cdot \frac{\rho_z - \rho_l}{\rho_l} \cdot \delta_p, \quad (9)$$

где ρ_s и ρ_l , соответственно, плотности кристалла и жидкости, находящихся в равновесии, а δ_p — разность давлений между жидкостью, находящейся в равновесии с реальным кристаллом, и подобной жидкостью, находящейся в равновесии с бесконечным кристаллом, при той же температуре [29].

Заметим, что применение построения Вульфа не ограничивается кристаллами, находящимися в равновесии с жидкостями. Оно может быть также использовано к другим фазовым равновесиям с анизотропными материалами такими, как, например, жидкие кристаллы.

2.2. Грани, границы и углы. Грани появляются в равновесной форме кристалла, если на графике Вульфа имеются изломы, что показано на рис. 5. Рассмотрим грани, полученные методом Ландау, более подробно. Хотя

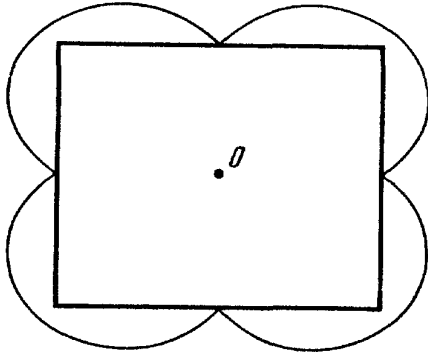


Рис. 5. Изломы графика Вульфа приводят к граням в равновесной форме кристалла

(6) выполняется и на гранях, (5) не выполняется, так как p и q на гранях не зависят от x и y . Однако, если построение Вульфа включает грани, дающие правильную форму, представление Ландау и Лифшица может рассматриваться, как предельный случай ряда построений Вульфа, в которых изломы скругляются, приближая изломы все более точно.

На рис. 6 — 10 мы привели несколько форм поверхностей, полученных из графиков Вульфа. Для простоты мы всегда показываем график Вульфа, полученное значение $f(p, 0)$, а также соответствующую часть равновесной формы кристалла. Кроме того мы ограничиваемся рассмотрением кубической симметрии.

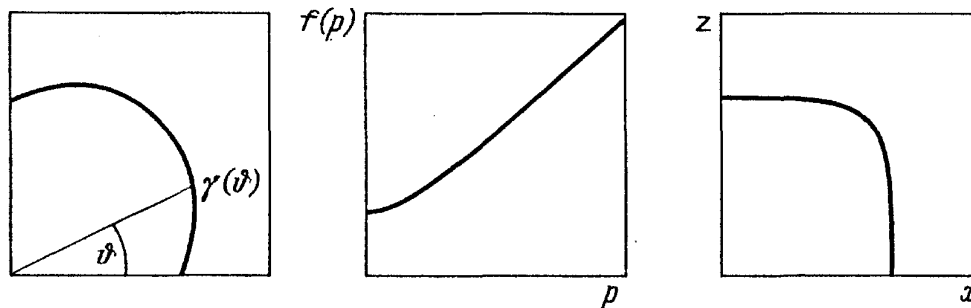


Рис. 6. Полярные графики для полностью скругленного кристалла. Слева: γ как функция $\hat{n} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$. В середине: поверхностная свободная энергия на единицу площади $f(p, 0)$ как функция p . Справа: часть равновесной формы кристалла в плоскости x, z

На рис. 6 приведен график Вульфа, дающий закругленную равновесную форму. Такие формы наблюдались, например, в кристаллах ${}^4\text{He}$, находившихся в равновесии с He^{II} [16, 20], в кристаллах ${}^3\text{He}$ [236] и в некоторых органических веществах [12 — 14, 23а].

На рис. 7 показан кристалл с гранями (001), которые гладко соединены друге другом закругленными участками. Заметим, что размер горизонтальной грани пропорционален скачку $\partial f/\partial p$ (или, что одно и то же, скачку $\partial \gamma/\partial \theta$, где $\theta = \arctg p$) в точке излома. Это непосредственно следует из (7а). Формы, подобные изображенным на рис. 7, наблюдались, например, для свинца, находящегося в равновесии с паром [10].

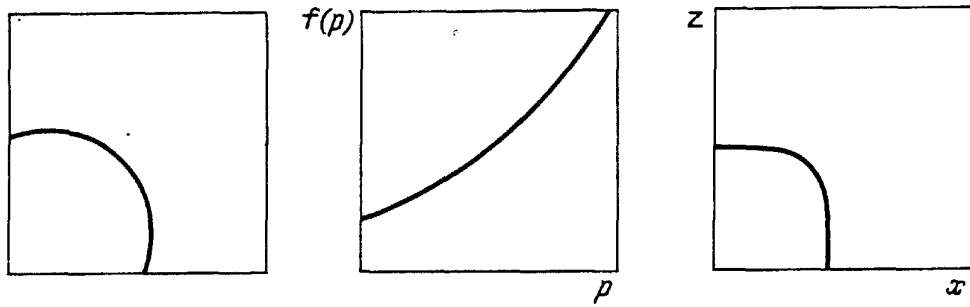


Рис. 7. То же, что и на рис. 6, для кристалла с гранями и закругленными участками, плавно соединенными друг с другом

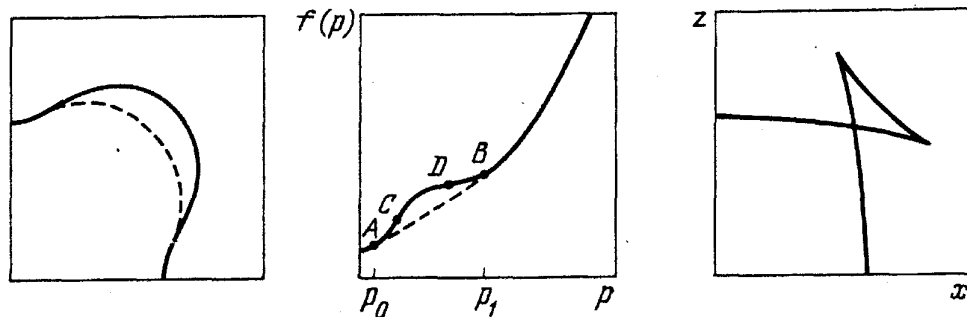


Рис. 8. То же, что и на рис. 6, для кристалла с резкими границами между закругленными участками. Регуляризованные графики для $\gamma(\hat{n})$ и $f(p)$ обозначены пунктиром

На рис. 8 график Вульфа соответствует функции $f(p, 0)$, которая не удовлетворяет условиям выпуклости

$$f(\lambda p_1 + (1 - \lambda)p_2, \lambda q_1 + (1 - \lambda)q_2) \leq \lambda f(p_1, q_1) + (1 - \lambda)f(p_2, q_2). \quad (10)$$

Это означает, что для $p_0 < p < p_1$ поверхностное натяжение может понижаться при замене "гладких" поверхностей раздела с направлением p на зубчатый профиль с направлениями p_0 и p_1 . Следовательно, появление зубчатого профиля может регуляризовать функцию $f(p, 0)$ [31, 38], заменяя дугу AB на двойную касательную, представленную на рис. 8б пунктирной линией^(2*). На графике Вульфа эта регуляризация представлена пунктирной кривой на рис. 8а. В огранке кристаллов зубчатые конфигурации обычно отсутствуют, так как они обладают большей свободной энергией, пропорциональной полной длине кромки, ограничивающей зубцы. Поэтому выгоднее иметь две поверхности с наклоном p_0 и p_1 , соответственно, отделенные друг от друга резкой границей. Такие границы между скругленными частями кристалла наблюдались в коллоидных жидких кристаллах или тактоидах [40], на границах зерен в металлах [41] и на границах раздела металл—жидкость. С другой стороны, в двумерных кристаллах при ненулевой температуре никаких резких углов на границах не может быть (по крайней мере для короткодействующих взаимодействий). Выигрыш в анизотропии всегда приводит к зубчатым конфигурациям (возможны даже конфигурации и с очень большими зубьями, однако в термодинамическом пределе они не осуществляются), которые соответ-

вуют устойчивым направлениям в графике Вульфа. Для трехмерных кристаллов, находящихся в гравитационном поле, возможны зубчатые конфигурации, ортогональные этому полю [38], так как потери в свободной энергии границы компенсируются выигрышем в гравитационной энергии.

Что касается дуги AB , которая показана на рис. 8в, то подобно теории Ван-дер-Ваальса выпуклые участки AC и DB соответствуют метастабильным состояниям поверхности, а участок CD нестабилен и не имеет физического объяснения. На рис. 8а дуга $ACDB$ соответствует части поверхности, которая отсутствует в равновесной огранке. Однако участки дуги AC и DB могут проявляться в метастабильных формах. В равновесной огранке, следующей из регуляризованного графика Вульфа, эта часть поверхности сводится в одну точку.

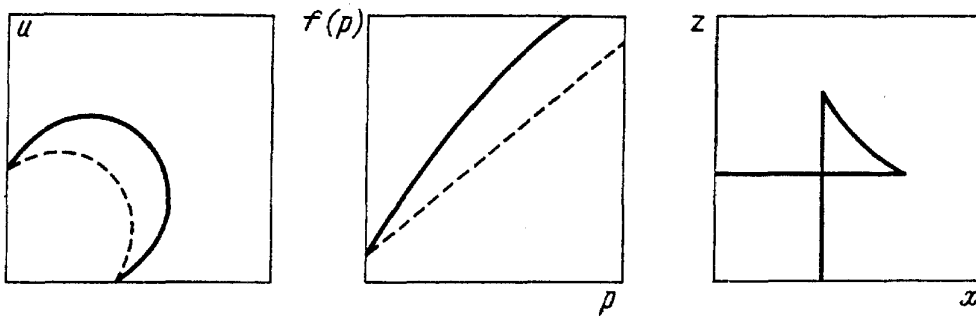


Рис. 9. То же, что и на рис. 6, для кристалла с чисто кубической равновесной формой

На рис. 9 приведен график Вульфа $f(p, 0)$ и равновесная огранка чисто кубического кристалла. Регуляризованный график Вульфа (состоящий в этом случае из 8 сфер, каждая из которых проходит через начало координат и один из углов куба) и регуляризованная форма вновь показаны штриховыми линиями, а часть равновесной формы, полученная из нерегуляризованного графика Вульфа, сводится к точке в регуляризованной равновесной форме. Зубчатые конфигурации, образованные регуляризованными плоскостями, в этом случае составляют полосы на плоскостях (100) и (001). Регуляризованные плоскости в произвольных направлениях строятся из прямоугольников на плоскостях (100), (001) и (010). Если снова предположить, что границы между гранями имеют положительную свободную энергию, то образование зубчатых конфигураций не выгодно по сравнению с комбинацией двух (или трех) одиночных граней. Однако сложно оценить стабильность углов относительно их скругления при возникновении рельефа поверхности (холмов и долин), ко-

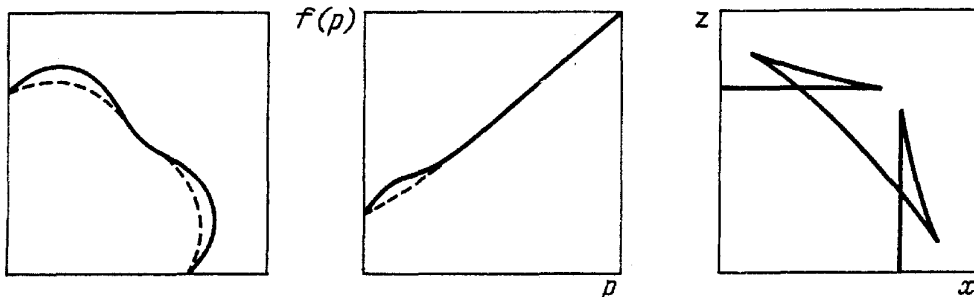


Рис. 10. То же, что и на рис. 6, для кристалла с резкими границами между гранями и закругленными участками

торое приводит к образованию мелких стабильных граней. Размер граней определяется теперь скачком $df^{сг}/dp$ — наклона кривой, соответствующей регуляризованному поверхностному натяжению.

График Вульфа, приведенный на рис. 10, определяет равновесную форму с резкими границами между гранями и закругленными участками. Пунктирные линии вновь соответствуют регуляризованному графику Вульфа и поверхностному натяжению на единицу спроецированной площади.

Мы можем сделать вывод о том, что форма кристалла состоит в основном из граней и закругленных поверхностей, которые могут соединяться или резкими границами (разрыв наклона на краю) или сглаженными границами (непрерывное изменение наклона на границе). Могут появляться однако и некоторые добавочные особенности.

Желобки на графике Вульфа [42] могут привести к цилиндрическим или коническим граням в равновесной форме. Такие поверхности, имеющие один конечный и один бесконечный радиус кривизны, были бы промежуточными между гранями и закругленными участками. Это происходит, по-видимому, на поверхностях стяжений нематических полимерных кристаллов, но мы не знаем никакого другого осуществления. Части поверхности кристалла с более или менее цилиндрической симметрией могут осуществляться в конических точках. Такие точки могут наблюдаться в тактоидных формах [40]. Для этого случая у нас вновь нет физического примера.

2.3. Переход огрубления и другие фазовые переходы. Переход огрубления можно теперь характеризовать исчезновением излома на графике Вульфа. Выше T_R поверхностное натяжение является гладкой дифференцируемой функцией \hat{n} в том направлении, где имелся излом ниже T_R .

Другие фазовые переходы могут также осуществляться при исчезновении резких границ или конических точек. Эти переходы существенно менее исследованы, чем переходы огрубления, хотя они также исследованы теоретически [43].

3. Микроскопическое описание поверхностей кристаллов

3.1. Кристалл Коссея, модели решеточного газа, модели твердого тела на твердом теле. Наиболее грубой и простой микроскопической моделью кристалла является массивная структура, заполняемая жесткими элементарными блоками, которые могут, например, иметь кубическую форму, соответствующую ячейкам решетки или частям ячеек. Эта модель называется кристаллом Коссея [44, 45].

В этой модели совсем не учитываются колебания решетки, электронная структура, дислокации и другие важные особенности реальных кристаллов, однако, несмотря на это, в большинстве случаев эта модель дает, по-видимому, хорошую качественную картину поверхностей реального кристалла. Немногим более точное описание кристалла, находящегося в равновесии с паром, дает решеточный газ [3] или трехмерная модель Изинга. В этой модели единичные строительные блоки заменяются ячейками решетки, которые могут быть или пустыми или заполненными одной частицей. В типичном двухфазном

равновесном состоянии имеется плотная компонента, которая связана с кристаллической фазой с малым количеством вакансий и легкая фаза, которая является газовой. Эта фаза в основном состоит из пустых ячеек с малой концентрацией частиц газа, которые в основном одиночны или связаны в небольшие кластеры. Поверхность кристалла может микроскопически определяться, как поверхность, отделяющая кристаллическую фазу от пара. Это показано на рис. 11. Конечно, предположение о решеточной структуре газа нереалистично, но для описания поверхности раздела кристалл—пар это не существенно. Дело в том, что для описания именно такой границы раздела наличие как вакансий в объеме кристалла, так и свободных частиц газа не имеет большого значения по крайней мере при низких температурах. Если, кроме того, пренебречь возможностью "навесов" в форме поверхности (рис. 11), что также является очень хорошим приближением по крайней мере при низких температурах, то мы получим модель, которая называется моделью твердое тело на твердом теле (модель ТНТ). Эта модель описывает поверхность раздела как набор дискретных переменных h_{ij} , определенных на двумерной решетке. Эти переменные описывают высоту поверхности раздела в каждой ячейке решетки $[ij]$ (см., например, рис. 12).

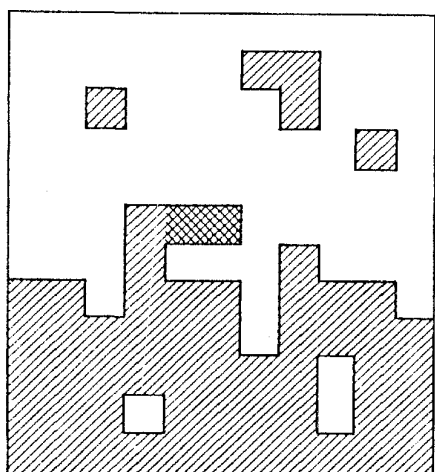


Рис. 11. Типичное равновесное состояние двумерного решеточного газа при низких температурах. Заштрихованные наклонно ячейки заняты, остальные пусты

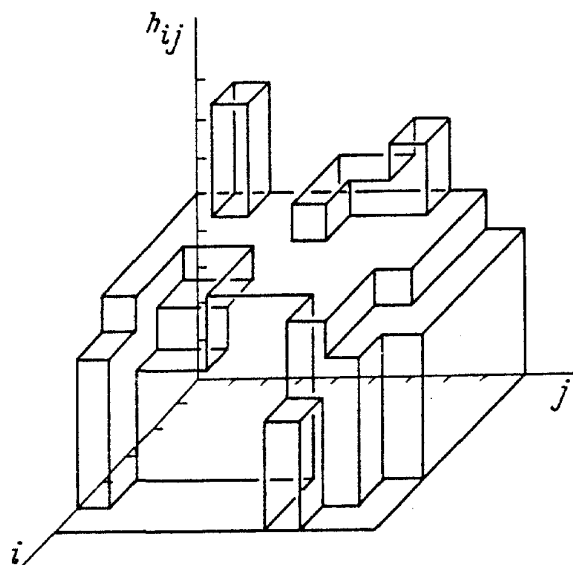


Рис. 12. Пример конфигурации трехмерной модели твердое тело — на твердом теле

Для того чтобы исследовать статистическую механику этой модели, надо сопоставить каждой конфигурации $\{h_{ij}\}$ энергию $E\{h_{ij}\}$. Модель ТНТ выбирается в основном как простая кубическая модель, когда h_{ij} имеет целые значения на квадратной решетке и энергия конфигурации пропорциональна полному числу ненасыщенных связей ближайших соседей, то есть^(3*)

$$E\{h_{ij}\} = J \sum_{i,j} (|h_{ij} - h_{i+1,j}| + |h_{ij} - h_{i,j+1}|). \quad (11)$$

Несмотря на значительные упрощения, сделанные при описании поверх-

ности кристалла моделью ГНТ, по-видимому, многие (хотя и не все) существенные свойства поверхностей кристаллов описываются довольно хорошо качественно, а во многих случаях и количественно. В этой модели можно определить наличие и характер перехода огрубления, что будет показано ниже. Кроме того модели ГНТ с успехом используются для исследования роста кристаллов [21, 46].

3.2. Ступеньки и их свободная энергия. Поверхности, близкие к граням, то есть поверхности, лежащие под очень малым углом к сингулярным поверхностям или граням (например, поверхности (001) в кубическом кристалле), в модели реализуются как ступенчатые поверхности. При нулевой температуре поверхность (001) в модели ГНТ определяется (11), как совершенно гладкая, что показано на рис. 13,а. Основное состояние поверхности (p01) состоит из ряда совершенно гладких ступенек в направлении $x^{(4*)}$ (рис. 13,б). Количество ступенек на единицу длины в направлении x равно p , но их точное положение произвольно, следовательно, основное состояние вырождено^(5*). В основном состоянии поверхности (pq1) ступеньки не являются уже гладкими, а имеют зигзагообразную структуру, такую что их средним направлением является направление (pq0), что изображено на рис. 13,в.

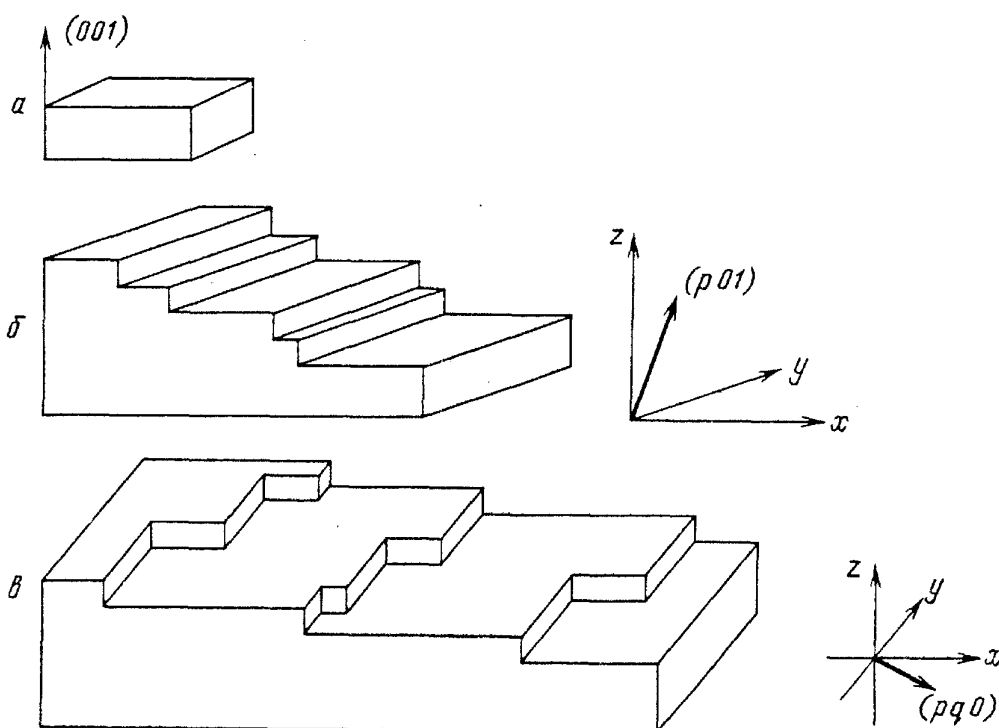


Рис. 13. Основные состояния поверхности (001) (а), поверхности (p01) (б) и поверхности (pq1) (в)

При ненулевой температуре гладкие ступеньки (см. рис. 13,б) образуют изломы (повороты на 90°), как показано на рис. 14, а зигзагообразные ступеньки (рис. 13,в) образуют дополнительные изломы в дополнение к тем, которые имелись при $T = 0$. Кроме того, на террасах между ступеньками при тепловом возбуждении возникают выпуклости (адатомы) и ямки (вакансии).

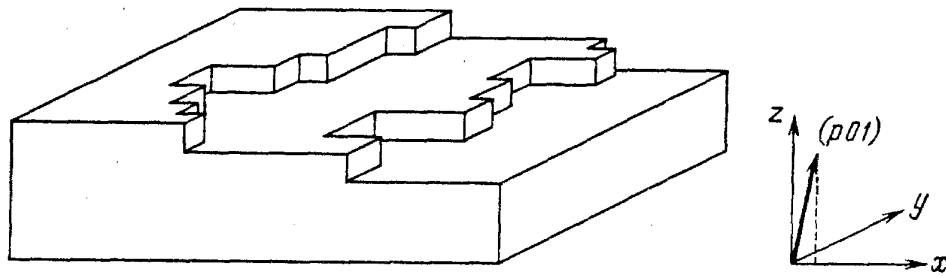


Рис. 14. Ступеньки, приведенные на рис. 13,б с изломами, вызванными нагреванием

Поверхность $(pq1)$ можно рассматривать, как образованную ступеньками в направлении $(pq0)$ на поверхности (001) .

Поверхность одиночной ступеньки может быть представлена при наложении соответствующих граничных условий на набор $\{h_{ij}\}$. Например, ступенька в направлении x получается при наложении следующего требования

$$\lim_{i \rightarrow \pm \infty} h_{ij} = n + \frac{1}{2} \cdot (1 + \text{sign}\{i\}), \quad (12)$$

где n — некоторое фиксированное целое число. Свободная энергия такой одиночной ступеньки определяется как разность между свободными энергиями поверхности раздела со ступенькой и без нее (отметим, что это определение свободной энергии ступеньки является общим и не ограничено моделью ТНТ). Для большей конкретности рассмотрим ступеньку под углом φ к направлению y на квадратной поверхности с граничными условиями, наложенными на h_{ij} , которая изображена на рис. 15,б, и сравним ее с гладкой поверхностью,

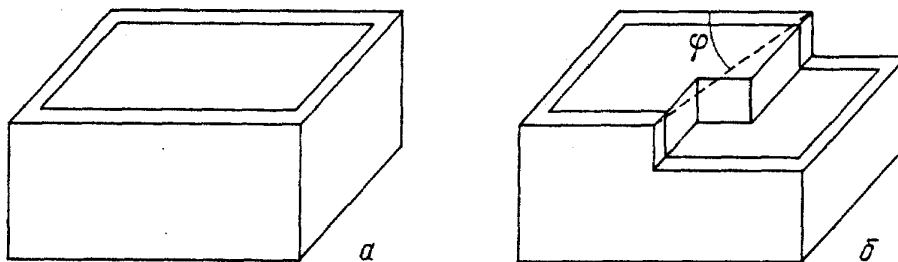


Рис. 15. Граничные условия дают поверхность (001) без ступенек (а) и поверхность (001) с единственной ступенькой с ориентацией $(\cos \varphi, \sin \varphi)$ (б)

показанной на рис. 15,а. Тогда свободная энергия ступеньки единичной длины и единичной высоты определяется следующим образом:

$$f^s(\varphi) = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{|\sin \varphi|}{N a_y a_z} \right) \ln \left(\frac{Z_N^{st}(\varphi)}{Z_N} \right), \quad (13)$$

где k_B — постоянная Больцмана, Z_N^{st} и Z_N — статистические суммы поверхностей раздела с двумя наборами граничных условий, a_y и a_z — постоянные решетки в направлениях y и z соответственно. Мы предполагаем, что

$\varphi \geq \pi/4$, в противном случае ступенька проходит между границами в направлении y и $\sin \varphi$ надо заменить на $\cos \varphi$.

3.3. Микроскопическая характеристика переходов огрубления. Ступеньки на близких поверхностях в большинстве случаев расположены далеко друг от друга, и, следовательно могут рассматриваться как не взаимодействующие. Рассматривая в качестве примера близкую поверхность с ориентацией $(p01)$ с $|p| \ll 1$ на квадратной решетке размера N , получим, что

$$f(p, 0, 1) = f(0, 0, 1) + |p|f^s(0) - \frac{k_B T}{N^2} \ln \left(\frac{N}{\rho_s N} \right) + \begin{cases} \text{вклад} \\ \text{взаимодействия} + \\ + \text{вклад границ,} \end{cases} \quad (14)$$

где $\rho_s = |p|a_x/a_z$. Второе слагаемое — сумма свободных энергий изолированных ступенек, третье слагаемое — энтропийный вклад, обусловленный числом способов размещения ступенек по поверхности. Третье слагаемое порядка $N^{-1}|p|\ln|p|$ и следовательно в термодинамическом пределе им можно пренебречь, также как и вкладом границ, который также порядка N^{-1} . Вклад взаимодействия должен быть по крайней мере порядка $|p|$ и, следовательно, им можно пренебречь при $p \rightarrow 0$. Строгий вывод (14) в модели ТНТ приведен в работе [47]. Ниже в этом параграфе мы ограничимся тем случаем, когда свободная энергия ступеньки имеет двумерную инверсионную симметрию, то есть $f(p, q) = f(-p, -q)$. Общий случай мы рассмотрим в параграфе 3.4.

Если $f^s(0) = f^s(\pi) > 0$, из (14) следует, что $f(p, 0, 1)$ имеет излом как функция p в точке $p = 0$. Следуя изложенному в разделе 2, получим, что равновесная форма кристалла имеет грань в направлении (001) , а поперечник этой грани в направлении y пропорционален энергии ступеньки в направлении x . В общем случае $f(\lambda \cos \varphi, \lambda \sin \varphi, 1)$ как функция λ имеет излом при $\lambda = 0$, причем наклон имеет следующий вид

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=0} = f^s(\varphi). \quad (15)$$

В предыдущем разделе мы показали, что переход огрубления соответствует исчезновению излома на графике Вульфа, следовательно, можно заключить, что переход огрубления с микроскопической точки зрения характеризуется обращением в ноль свободной энергии^(6*) ступенек на грани, где этот переход происходит.

На первый взгляд является неожиданным то, что свободная энергия с различными направлениями обращается в ноль при одной и той же температуре. Поэтому для высокосимметричных граней кристалла убедительным является, по-видимому, следующий аргумент. Для граней с тетрагональной симметрией, например, для грани (001) кубического кристалла f^s , может в одно и то же время обращаться в ноль свободная энергия ступенек по крайней мере для четырех направлений. Для короткодействия f^s всегда обращается в

ноль для произвольных направлений. Поэтому ступеньку с данным направлением можно линейными участками связать с направлениями, в которых свободная энергия ступеньки обращается в ноль^(7*) (этот же аргумент объясняет, почему при ненулевой температуре в двумерном случае равновесная форма не имеет резких углов между закругленными участками). Этот аргумент легко обобщить на случай треугольной и гексагональной симметрии. В отсутствие инверсионной симметрии свободная энергия ступенек может стать отрицательной без образования нестабильных граней. Это обсуждается в следующем параграфе. Если на данной грани кристалла для всех направлений свободная энергия бесконечно длинных ступенек равна нулю, то будет одновременно образовываться ступенька произвольной длины. Рассмотрим поверхность раздела в виде квадрата $N \times N_c$ фиксированной высотой n . Для T выше T_R будут образовываться длинные сплошные ступеньки, и когда N возрастает, они смогут вставляться друг в друга. Следовательно вес h_{00} точки в центре поверхности раздела будет флуктуировать все более и более около среднего значения n . Это дает другой способ определения шероховатых состояний на

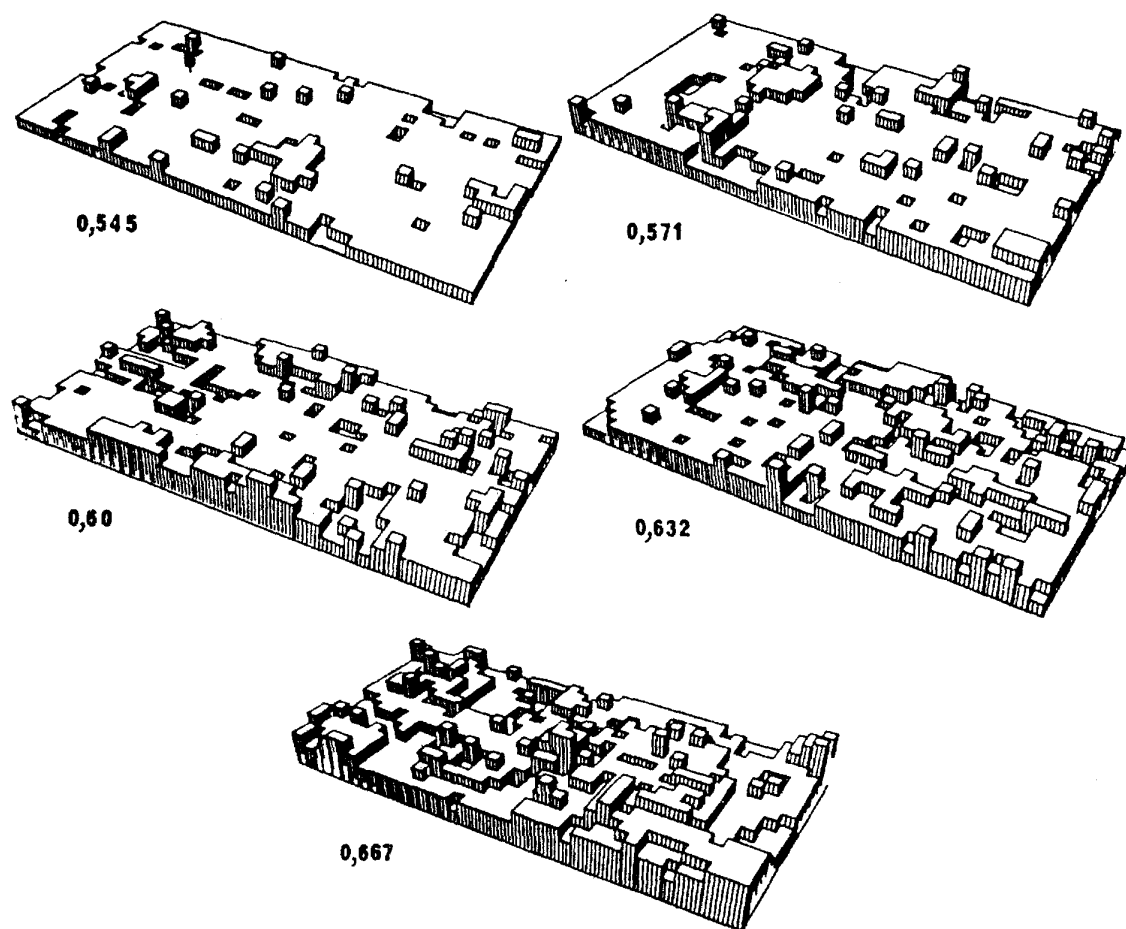


Рис. 16. Типичные равновесные конфигурации поверхностей (001) в модели ТНТ при температурах $0,91 T_R$ (0,545), $0,95 T_R$ (0,571), $1,0 T_R$ (0,60), $1,05 T_R$ (0,632) и $1,11 T_R$ (0,667) [24]

поверхности раздела. Получим, что

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle (h_{00} - \langle h_{00} \rangle)^2 \rangle \begin{cases} = \infty \text{ в шероховатой фазе,} \\ \text{конечен в гладкой фазе;} \end{cases} \quad (16)$$

здесь угловые скобки означают усреднение по равновесному распределению конфигураций поверхности раздела. С этим тесно связана корреляционная функция высота—высота, описывающая среднюю квадратичную разность между двумя точками на поверхности раздела. В зависимости от того выше или ниже температура, чем температура перехода огрубления, получим, что

$$\lim_{R_{ij,kl} \rightarrow \infty} \langle (h_{ij} - h_{kl})^2 \rangle = \infty, \quad T > T_R, \quad (17a)$$

$$= 2 \langle (h_{00} - \langle h_{00} \rangle)^2 \rangle, \quad T < T_R, \quad (17b)$$

где $R_{ij,kl}$ означает расстояние между точками решетки (i, j) и (k, l) . При получении (17b) сделано допущение о том, что ниже T_R флуктуации поверхности раздела на больших расстояниях становятся некоррелированными. Разложение (17b) можно выразить следующим образом через корреляционную длину ξ

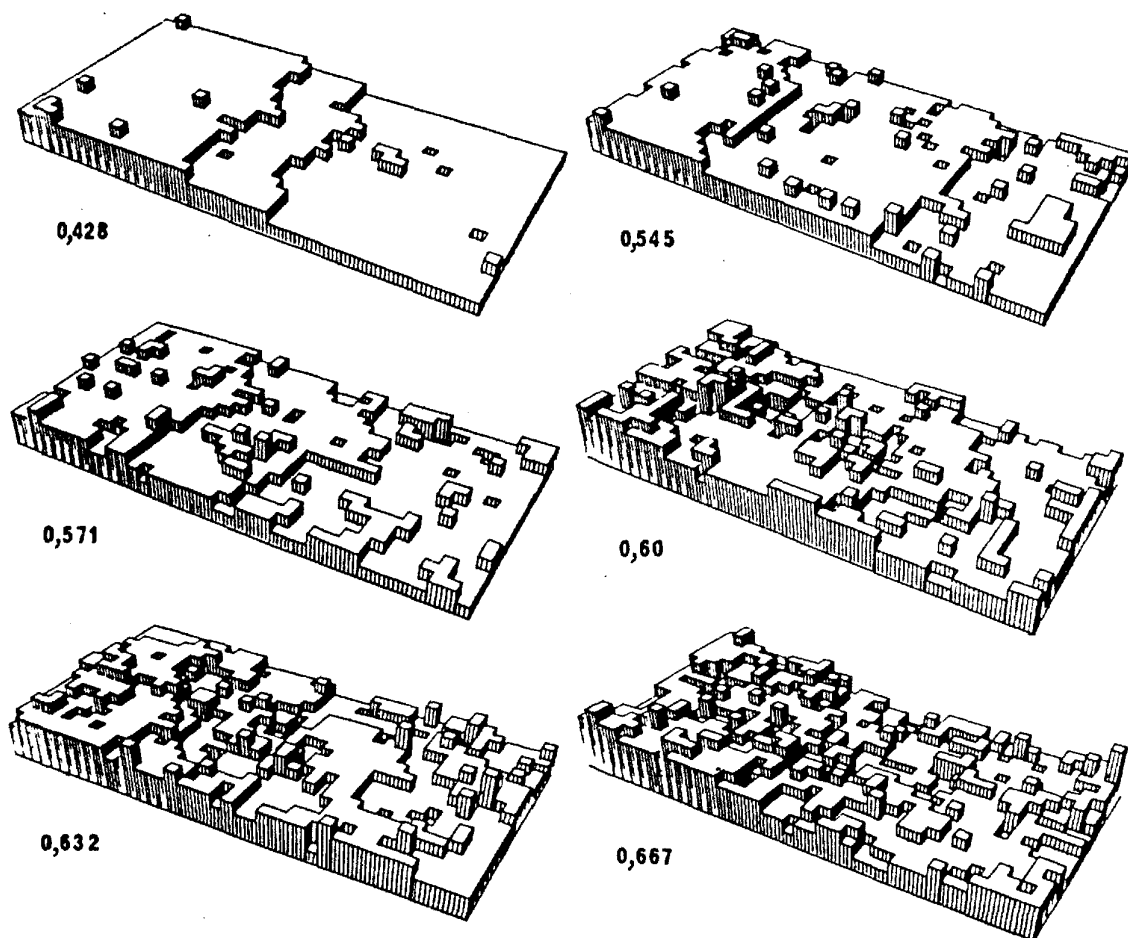


Рис. 17. Типичные равновесные конфигурации для ступенчатых поверхностей с теми же температурами, что и на рис. 16, и добавочной температурой $0,71 T_R$ (0,428) [486]

$$\ln [\langle (h_{ij} - h_{kl})^2 \rangle - 2 \langle (h_{00} - \langle h_{00} \rangle)^2 \rangle] \epsilon^2 - \frac{R_{ij,kl}}{\xi}, \quad R_{ij,kl} \rightarrow \infty. \quad (18)$$

Обращение в ноль свободной энергии ступеньки при переходе огрубления означает, что ступеньки теряются среди тепловых колебаний поверхности раздела. Это хорошо видно из численных расчетов поверхности раздела в модели ТНТ, проведенных Виксом с сотрудниками [21, 24, 48]. На рис. 16 и 17 показаны типичные конфигурации поверхности раздела для нескольких температур. При самых низких температурах при повышении температуры ниже T_R ступеньки четко различимы, хотя они и становятся все более и более расплывчатыми. Очевидно, что при одинаковых температурах поверхности со ступеньками и без ступенек существенно различаются. Однако для $T > T_R$ различить ступеньки нельзя и отличие поверхностей со ступеньками и без пропадает.

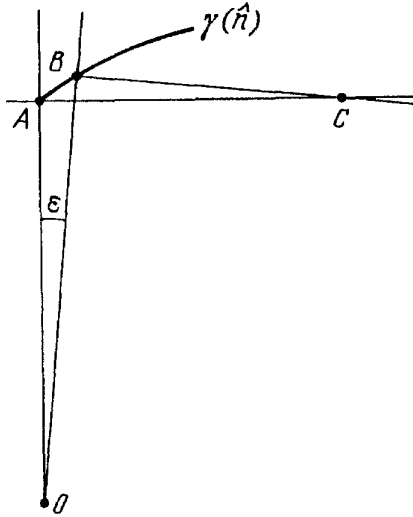


Рис. 18. Связь между свободной энергией ступеньки и формой и размером грани. Линия AB представляет полярный график γ в зависимости $\hat{n} = (\sin \epsilon, 0, \cos \epsilon)$. Линии AC и BC соответствуют плоскостям Вульфа для ориентации (001) и $(\sin \epsilon, 0, \cos \epsilon)$. Если длина OA равна $\lambda\gamma(001)$ (или $\lambda f(0, 0)$), то в первом порядке по ϵ OB равно $\lambda(f(0, 0) + \epsilon f^s(0))$. Следовательно, AC равно $\lambda f^s(0)$

$f^s(p, q)$. Из (7) в пределе $p, q \rightarrow 0$, используя, что $f(p, q) = f(0, 0) + f^s(p, q)(p^2 + q^2)^{1/2}$ при $p, q \rightarrow 0$, получим следующий параметрический вид поверхности [1, Приложение D]

$$\begin{aligned} x &\rightarrow \cos \varphi \cdot f^s(\varphi) - \sin \varphi \cdot \frac{df^s(\varphi)}{d\varphi}, \\ y &\rightarrow \sin \varphi \cdot f^s(\varphi) + \cos \varphi \cdot \frac{df^s(\varphi)}{d\varphi}, \end{aligned} \quad (19)$$

3.4. Равновесная форма граней. Общий критерий огрубления. Ниже температуры их огрубления равновесная форма граней непосредственно определяется построением Вульфа. Для того чтобы показать это, ориентируем кристалл так, чтобы интересующая нас грань была перпендикулярна оси. Тогда близкая поверхность с ориентацией $(\epsilon \cos \varphi, \epsilon \sin \varphi, 1)$ пересекает грань по линии, которая составляет угол φ с осью y на расстоянии $\lambda f^s(\varphi)$ от оси z . Это показано на рис. 18 для случая $\varphi = 0$. Равновесная форма грани является внутренней огибающей линий пересечения этой грани и всех близких поверхностей. Это соответствует двумерному построению Вульфа, которое дает равновесную форму грани по графику Вульфа для свободной энергии ступеньки

где $\varphi = \arctg(q/p)$. Если части грани соответствуют неустойчивым частям графика Вульфа, следует заменить $f^s(\varphi)$ на свободную энергию ступеньки, которая получена из регуляризованного графика Вульфа. Теперь вернемся к случаю, когда свободная энергия ступеньки для некоторых направлений может стать отрицательной. Это может осуществиться для графиков Вульфа с асимметричными изломами, в чем легко убедиться из рис. 19. Однако пока точки излома являются внутренними, грань остается стабильной (по крайней мере локально стабильной), что показано на рис. 19 отрезком линии AB . В отличие от обычного случая проекция центра кристалла на грань попадает вне грани. Как и раньше равновесная форма грани получается из двумерного построения Вульфа. Типичный пример приведен на рис. 20.

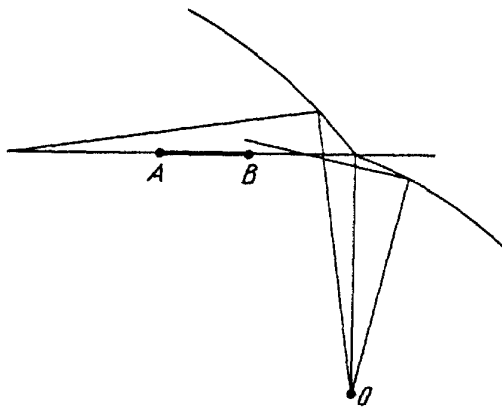


Рис. 19. Часть графика Вульфа с асимметричным изломом. Возникающая грань проходит между A и B

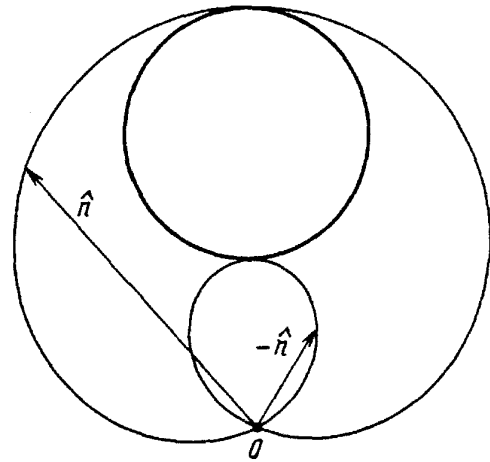


Рис. 20. Равновесная форма грани для графика Вульфа с отрицательной свободной энергией скачка. Большая петля кривой с самопересечением соответствует полярному графику для положительного f^s в зависимости от ориентации \hat{n} , меньшая петля — графику $-f^s$ в направлении $-\hat{n}$ для отрицательного f^s . Толстая кривая дает равновесную форму кристалла

Внешняя петля соответствует положительной f^s , а внутренняя отрицательной f^s . Параметрическое представление (19) остается справедливым. Исчезновение излома в трехмерном графике Вульфа приводит к тому, что $f^s(\varphi) = -f^s(-\varphi)$, то есть внутренняя и внешняя петли совпадают и грань исчезает. Обратное утверждение о том, что исчезновение грани в двумерном графике Вульфа для f^s приводит к исчезновению излома в трехмерном графике Вульфа, т.е. $f^s(\varphi) = -f^s(-\varphi)$ для всех φ , доказать существенно сложнее. Если излом исчезает, это приводит к переходу к локально цилиндрической форме поверхности. Имеется или нет это на самом деле, пока не известно.

С физической точки зрения тот факт, что можно иметь стабильные грани несмотря на то, что свободная энергия ступеньки отрицательна для некоторых направлений, объясняется тем, что ступеньки не могут появляться независимо одна от другой. Грань становится делокализованной, если образуются большие

террасы, что требует обращения в ноль свободной энергии для всей ступеньки. В случае инверсионной симметрии это происходит, если только $f^s(\varphi)$ обращается в ноль при произвольном φ , но в общем случае это сводится к обращению в ноль $f^s(\varphi) + f^s(-\varphi)$. Примером, когда можно использовать более слабое требование, является модель терраса—ступенька—излом (ТСИ), которая рассматривается в разделе 4.3.

Суммируем полученные выше результаты. Огрубление грани кристалла с микроскопической точки зрения характеризуется обращением в ноль свободной энергии ступеньки на этой грани, или более точно должна обращаться в ноль свободная энергия ступеньки, как в данном, так и в противоположном направлении. Огрубление может также характеризоваться бесконечно большими флуктуациями высоты поверхности раздела.

4. Статическая механика моделей поверхности раздела

Исследование перехода огрубления почти полностью основано на расчетах поверхности кристалла в различных моделях статистической механики, таких, например, как модель ТНТ. Это расчеты при помощи метода ренормализационной группы или расчеты точно решаемых моделей. Результаты, полученные этими методами, довольно хорошо согласуются.

Как упоминалось выше в разделе 1, первые модельные расчеты проделали Бёртон и др. [1], они представили растущий слой поверхности кристалла при помощи двумерной модели Изинга. Хотя эта модель хороша в широком интервале температур, ниже температуры огрубления вблизи перехода огрубления она неприемлема, так как в ней не учитывается многослойный характер поверхности в шероховатых состояниях и в состояниях, близких к шероховатым.

Как нам известно, Галлавогги [49] первым предположил, что в трехмерной модели Изинга фазовый переход, делокализуя поверхность раздела между фазами с положительным и отрицательным намагничиванием, может существовать при температурах ниже объемной критической температуры. Вике и др. нашли строгое доказательство наличия такого перехода, используя низкотемпературные разложения моментов смещений поверхности раздела [50]. Было найдено, что эти разложения расходятся при температурах, которые приблизительно на 10% выше критической температуры двумерной модели Изинга одного слоя, и существенно ниже критической температуры трехмерной модели Изинга. Эти результаты противоречат предположению Бёртона и др. [1, с. 344] о том, что истинная температура огрубления поверхности кристалла существенно ниже, чем полученная в двумерной модели Изинга. Фактически для широкого класса моделей Изинга можно показать, что критическая температура является строгой границей температуры огрубления [51, 52].

Основные достижения в теории перехода огрубления были получены в работе Чуй и Вика [4], в которой было показано, что дискретная гауссова модель и модель ТНТ с квадратичным взаимодействием точно сводятся к двумерному кулоновскому газу на решетке. Для последней системы Березинский [5] и Костерлиц и Таулес [6] нашли фазовый переход, соответствующий

переходу огрубления в дискретной гауссовой модели. В течение долгого времени природа этого перехода Костерлица—Таулеса вызывала много споров, поэтому бы оказалось довольно полезным разработать точно решаемую модель объемноцентрированное твердое тело на твердом теле (ОЦТНТ) [53], которая полностью подтверждает, что фазовый переход имеет природу перехода Костерлица—Таулеса. В обычной модели ТНТ Фрелих и Спенсер [54] по поведению корреляционной функции высота—высота при высоких и низких температурах показали, что имеется переход огрубления типа Костерлица—Таулеса.

Дальнейшие расчеты, выполненные как в теории ренормализационной группы Костерлица—Таулеса, так и в модели ОЦТНТ, подтвердили картину перехода и обнаружили новые свойства как перехода огрубления, так и поверхностей кристалла вообще. Например, Джаяпракаш и др. [55] нашли, что при переходе огрубления кривизна огрубляемой поверхности изменяется скачком от нуля до некоторой универсальной величины, они [55], а также независимо Блётте и Хилхорст [56] и Роттман и Вортис [57] открыли универсальный неаналитический вид закругления площадок, ограничивающих грани.

Некоторые из этих свойств были проверены экспериментально, например, универсальный скачок кривизны Вольф и др. [20] и неаналитический вид поверхности Роттман и др. [58]. Кроме того, были найдены некоторые точно решаемые модели. Блётте и Хилхорст [56, 59] разработали модель, эквивалентную точно разрешаемой модели треугольного димера, которая особенно удобна для описания поверхностей кристалла, близких к направлениям (111) кубического кристалла. Без дальнейшего развития этой модели нельзя найти неаналитическую структуру площадок, ограничивающих грани, о которых мы упоминали выше. Другой точно решаемой моделью является модель терраса—ступенька—излом (модель ТСИ), описывающая поверхности, имеющие конечный наклон [60 — 62]. В этой модели имеются переходы огрубления, которые вновь являются переходами типа Костерлица—Таулеса.

В разделе 4.1 мы обсудим результаты, полученные при помощи теории ренормализационной группы, в разделе 4.2 мы введем и обсудим модель ОЦТНТ, в разделе 4.3 мы обсудим модель ТСИ, а в разделе 4.4, следуя Груберу и Муллинсу [60], представим простые аргументы, объясняющие неаналитическую кривизну площадок, близких к граням.

4.1. Результаты, полученные при помощи ренормализационной группы. Расчеты, полученные при помощи ренормализационной группы, обычно исходят из статистической суммы в модели ТНТ

$$Z = \sum_{z_p=0, \pm a, \pm 2a, \dots} \exp(-\beta \sum_{p,q} V(z_p - z_q)), \quad (20)$$

здесь суммирование по p и q ведется только по парам ближайших соседей $\beta = 1/k_B T$ и a — постоянная решетки в направлении z . Используя разложение в ряд Фурье

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - na) = \frac{1}{a} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{2\pi i x m/a}, \quad (21)$$

перепишем (20), как

$$Z = \left(\prod_p \int_{-\infty}^{+\infty} dz_p \right) \sum_{m_p=-\infty}^{+\infty} \exp(-\beta \sum_{p,q} V(z_p - z_q) + \sum_p 2\pi i z_p m_p a^{-1}), \quad (22)$$

где множители a сократились при нормировке. Если суммирование по m_p ограничить $m_p = 0, \pm 1$, а потенциал $V(z)$ взять в квадратичном виде, получим

$$Z = \sum_{m_p=0, \pm 1} \left(\prod_p \int_{-\infty}^{+\infty} dz_p K^{|m_p|} \right) \exp[-\frac{\alpha}{2} \sum_{p,q} (z_p - z_q)^2 + \sum_p 2\pi i z_p m_p/a]. \quad (23)$$

Здесь K подставлено вместо единицы, так как в ренормализационной процедуре этот множитель изменяет свое значение. По крайней мере для больших β множитель α можно взять равным $2\beta[V(1) - V(0)]$, так что являются предпочтительными конфигурации, в которых разности высот ближайших соседей равны 0 и 1, так как в случае малых T истинный потенциал хорошо аппроксимируется квадратичным. Проверка приближений (23) показывает, что основные свойства гамильтониана сохраняются. Следовательно, надо полагать, что природа фазового перехода не изменяется. Модель (23) ввел Вилэн [63]. Ее относительно простая структура упрощает дальнейший анализ.

Имеется два эквивалентных пути вывода уравнений ренормализационной группы из (23). Костерлиц [66] приступил к расчету гауссовых интегралов по z_p , полагая приближенно, что

$$Z = Z_G \sum'_{m_p=0, \pm 1} K^{\sum_p |m_p|} \cdot \exp \left[-\frac{\pi}{a} \sum_{p,q} \left(-\ln \frac{r_{pq}}{a} \right) m_p m_q \right], \quad (24)$$

где Z_G — статистическая сумма непрерывной гауссовой модели, которую можно получить, положив в (23) все $m_p = 0$, а r_{pq} — расстояние между ячейками p и q . Остающаяся часть является статистической функцией двумерного кулоновского газа с зарядами ± 1 с энергией K и температурой $T = \alpha/\pi k_B$. Штрих в суммировании по m_p означает условие нейтральности $\sum_p m_p = 0$. Костерлиц

применил преобразование ренормализационной группы при интегрировании короткодействия и масштабном преобразовании. Он нашел, что после этой процедуры гамильтониан приближенно сохраняет свой вид, но параметры α и K принимают другие значения. Отыскав фиксированные точки этого преобразования, мы найдем переход огрубления (в нашем понимании) и определим его критические свойства.

В другой, но эквивалентной процедуре (23) при малых K приближается следующим образом [20, 29, 64]

$$Z = \left(\prod_p \int_{-\infty}^{+\infty} dz_p \right) \exp \left[-\frac{\alpha}{2} \sum_{p,q} (z_p - z_q)^2 + 2K \sum_p \cos \left(\frac{2\pi z_p}{a} \right) \right]. \quad (25)$$

Заменяя дискретные суммы по p и q интегралом по $\rho = (x, y)$, можно получить статическую сумму в теории поля для синуса Гордона [65]

$$Z = \int d\vec{\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} dz(\vec{\rho}) \exp \left[-\frac{\alpha}{2} \int d\vec{\rho}' \int d\vec{\rho}'' (z(\vec{\rho}) - z(\vec{\rho}'))^2 + \right. \\ \left. + 2K \int d\vec{\rho} \cos \left(\frac{2\pi z(\vec{\rho})}{a} \right) \right]. \quad (26)$$

Отказавшись от дискретной структуры решетки, мы можем регуляризовать (26), обрезав преобразование Фурье $z(\vec{\rho})$ по импульсам $\hat{z}(\mathbf{k})$ при $K = \Lambda = 2\pi/a_h$, где a_h — постоянная решетки в горизонтальной плоскости. Перенормировка теперь выполняется при интегрировании $\hat{z}(\mathbf{k})$ по импульсам внешней оболочки $\Lambda - \delta\Lambda < k < \Lambda$, а перенормированная масштабная длина такая, что новое обрезание $\Lambda - \delta\Lambda$ заменяется на Λ . Мы вновь получаем (26) с перенормированными значениями α и K . Костерлиц получил линии потока в плоскости α, K , вдоль которых перенормировка дает точно те же значения.

За подробностями расчетов, проведенных при помощи ренормализационной группы, мы отсылаем к оригинальным работам, а здесь мы только упомянем об основных результатах.

4.1.1. Температура огрубления. Хотя температура огрубления не является универсальной постоянной, метод регуляризационной группы Костерлица позволяет определить ее с хорошей точностью [66,25]. Для дискретной гауссовой модели предсказывается значение [25]

$$T_R \approx 1,45J/k_B,$$

которое находится в хорошем согласии с численными расчетами [66].

4.1.2. Поверхностное натяжение. В точке перехода огрубления поверхностное натяжение имеет очень слабую особенность следующего вида [66]

$$\gamma_{\text{sing}} \approx B \exp \left(-\frac{C}{|T - T_R|^{1/2}} \right) \quad (27)$$

при T вблизи T_R . Видно, что все производные γ_{sing} по температуре являются гладкими функциями T и обращаются в ноль при $T = T_R$. Постоянные B и C не являются универсальными.

4.1.3. Свободная энергия ступеньки. Было найдено, что свободная энергия ступеньки имеет следующий вид

$$f_s \approx f_0 \exp[-A/(T_R - T)^{1/2}], \quad T < T_R, \\ = 0, \quad T > T_R, \quad (28)$$

где f_0 и A вновь не являются универсальными постоянными. Этот результат

получен из того, что f_s дуально сопряжено с обратной корреляционной длиной в XY-модели [67, 68] (см. ниже), а из результатов Костерлица для этой модели [66]. Из (28) и пропорциональности между свободной энергией ступеньки и размером грани, что обсуждалось в разделе 3, очевидно, что исчезновение грани при приближении к T_R снизу является чрезвычайно плавным. Следовательно, это явление трудно наблюдать экспериментально.

4.1.4. Корреляционная длина. Для температур ниже, но близких к температуре огрубления корреляционная длина, которая является характеристической длиной для корреляций между тепловыми возбуждениями поверхности кристалла, ведет себя следующим образом^(8*) [25, 69]

$$\begin{aligned} \xi &\approx \xi_0 \exp[A/(T_R - T)^{1/2}], & T < T_R, \\ &= \infty, & T \geq T_R, \end{aligned} \quad (29)$$

где ξ_0 вновь не универсальная постоянная, а A — такое же как и в (28).

4.1.5. Корреляционная функция высота—высота. Корреляционная функция высота—высота, введенная в (17), ведет себя следующим образом [4, 69]

$$G(r) = \frac{1}{2\pi} K(T) a_v^2 \ln [a_h^2 (r^{-2} + \xi^{-2})^{-1}], \quad (30)$$

где $G(r) = \langle h_{ij} - h_{kl} \rangle r = R_{ij,kl}$, a_v и a_h — постоянные решетки в направлении, перпендикулярном и параллельном поверхности соответственно (здесь мы предполагаем для простоты, что a_h одинаково для различных главных направлений в этой плоскости), ξ — корреляционная длина, введенная в (29), следовательно, для $T > T_R$ $\xi^{-1} = 0$. Коэффициент $K(T)$ является возрастающей функцией температуры. Теория ренормализованной группы предсказывает ее поведение. При температуре огрубления значение K универсально [69]

$$K(T_R) = \frac{2}{\pi}. \quad (31)$$

Это значение аппроксимируется выше T_R корневым изломом [25]

$$K(T) = \frac{2}{\pi} + C(T - T_R)^{1/2} \quad (32)$$

для $T > T_R$, но при $(T - T_R)/T_R \ll 1$. Постоянная C вновь не универсальна. Универсальное значение (31) $K(T)$ использовали Шугард и др. [66] для оценки методом Монтекарло температуры огрубления модельных систем. Корневой излом в этих системах очень слабо выражен и не наблюдаем. Для температур ниже T_R и больших r корреляционная функция высота—высота выходит на постоянную $K(T) a_v^2 / \pi \cdot \ln(\xi/a_h)$. Следовательно, из (17в) и (29) следует, что толщина поверхности раздела расходится как $(T_R - T)^{-1/4}$ при T , стремя-

щемся к T_R снизу [69]. В заключение мы отметим, что (30) справедливо по крайней мере в пределе больших r и для анизотропных поверхностей [62].

4.1.6. Скачок кривизны и поверхностная жесткость. Одним из наиболее ярких предсказаний теории ренормализационной группы является то, что при $T = T_R$ радиус кривизны элемента поверхности с ориентацией на огрубляемую грань скачком изменяется от ∞ (для $T < T_R$) до универсальной величины [55]

$$R_c = \frac{z_0(k_B T_R)\pi}{2\gamma_0 a_v^2}; \quad (33)$$

здесь z_0 — расстояние от плоскости, касательной к поверхности, до центра кристалла, а γ_0 — поверхностное натяжение на единицу площади (раздел 2,1). Для анизотропной поверхности R_c в (33) следует заменить на $(R_c^{(1)}R_c^{(2)})^{1/2}$ [43, 70], где $R_c^{(1)}$ и $R_c^{(2)}$ — главные радиусы кривизны.

Другой путь состоит в выражении записанных выше соотношений через поверхностную жесткость, при помощи которой измеряется сопротивление поверхности кручению. Если $\gamma(p, q)$ поверхностное натяжение в направлении $(p, q, 1)$, то поверхностная жесткость относительно поворота вокруг оси $(-q, p, 0)$ определяется следующим образом:

$$\alpha^{(0)}(p, q) = \gamma(p, q) + \frac{\partial^2 \gamma(p, q)}{\partial \theta^2}, \quad (34)$$

где $\theta = \arctg(p^2 + q^2)^{1/2}$, а p/q удерживается постоянным. Универсальный скачок кривизны при $T = T_R$ теперь преобразуется в [20, 70]^(9*)

$$\left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial p^2} \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} - \left(\frac{\partial^2 f}{\partial p \partial q} \right)^2 \right\}_{p=q=0}^{1/2} = \frac{k_B T_R \pi}{2a_v^2} \quad (35)$$

для общего анизотропного случая. В приложении мы покажем, как вывести (35) из (33).

Для $T > T_R$, но при $(T - T_R)/T_R \ll 1$ поверхностная жесткость ведет себя как функция температуры следующим образом [20]:

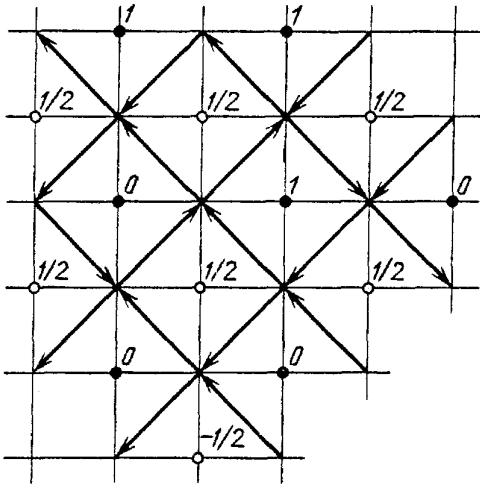
$$\alpha(T) = \alpha(T_R) \cdot [1 - C(T - T_R)^{1/2}], \quad (36)$$

где C — вновь не универсальная постоянная, которую, следуя Вольфу и др. [20], возьмем равной $C = \pi/2A$, где A — постоянная в (28), (29). В заключение отметим, что при температуре огрубления зависимость поверхностной жесткости от p и q является очень сильной, она может быть получена вновь по теории ренормализационной группы.

Экспериментальное подтверждение (33), (35) получили Вольф и др. [20],

однако эксперименты Бабкина и др. [37] противоречат этим предсказаниям. Следует, однако, заметить, что Вольф и др. использовали существенные поправки для объяснения угловой зависимости α (измеренное значение этой величины является несколько усредненным по углам), даже хотя интервал наблюдаемых ими углов очень мал.

4.2. Модель ОЦТНТ. Модель ОЦТНТ (объемноцентрированное твердое



тело на твердом теле) [53] является моделью твердое тело на твердом теле, определенной на квадратной решетке, которая разделяется на две подрешетки (рис. 21). Переменные высоты одной из подрешеток могут принимать только целые значения $(0, \pm 1, \pm 2, \dots)$, а другой только полуцелые значения $(\pm 1/2, \pm 3/2, \dots)$. Кроме того, разность высот между ближайшими ячейками ограничена значениями $\pm 1/2$. Эта модель изоморфна шестивершинной модели Либа: рисуя стрелки на связях в дуальной решетке, так что всегда верхний из двух соседних переменных высоты был по направлению стрелки, можно создать конфигурацию шестивершинной модели,

Рис. 21. Построение 6-вершинной конфигурации из конфигурации в модели ОЦТНТ

которая однозначно соответствует (с точностью до общего вертикального сдвига, который можно устранить, фиксируя значение одной переменной высоты) разрешенной конфигурации модели ОЦТНТ. Правило (в каждом узле двойной решетки две линии входят и две линии выходят) является непосредственным следствием единственности переменных высоты [53] (при наличии винтовых дислокаций это правило смягчается, см. раздел 5). Пример перехода от ОЦТНТ к шестивершинным конфигурациям показан на рис. 21. Присваивая энергии $\epsilon_1, \dots, \epsilon_6$, как показано на рис. 22, шести возможным вершинам можно ввести взаимодействие между переменными высоты. В [53] показано, что это взаимодействие вводится совершенно естественно из решеточного газа в объемноцентрированном кубическом кристалле с сильным притяжением ближайших соседей и очень слабым взаимодействием следующих ближайших со-

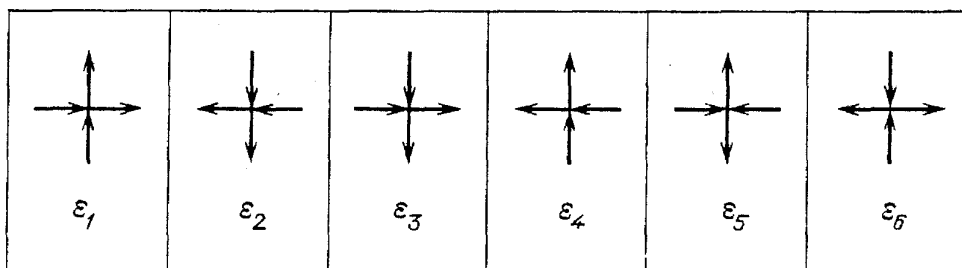


Рис. 22. Разрешенные конфигурации вершин с соответственными энергиями

седей. Если последнее взаимодействие является притяжением, то соответствующая шестивершинная модель называется F моделью, для которой Либ получил точное решение [71]. Из этого решения следует, что поверхностное натяжение в плоскости (001) испытывает фазовый переход типа Костерлица—Таулеса, Все предсказания теории ренормализационной группы, которые обсуждались в разделах 4.1.2, 3 [53], 4.1.4 [72] и 4.1.5, подтверждаются; по техническим соображениям они рассмотрены только при температуре $T = 2T_R$ [55]).

Сазерленд и др. [73б] обобщили результаты Либа на произвольный выбор вершин (результаты выражаются, однако, через решение довольно сложного нелинейного интегрального уравнения). Используя эти расчеты, можно получить поверхностное натяжение для всех температур и значений p и q , удовлетворяющих неравенствам $|p|, |q| \leq 1$. Последнее ограничение можно интерпретировать следующим образом. Равновесной формой в модели Изинга на объемно центрированной кубической решетке с бесконечно сильным притяжением ближайших соседей является ромбододекаэдр, ограниченный гранями типа (110), что непосредственно следует из построения Вульфа (рис. 23). Если взаимодействие ближайших соседей уменьшается до конечной величины, которая еще остается $\gg k_B T$, эта форма еще сохраняется, но края и углы закругляются. В таком случае модель ОЦТНТ описывает равновесную форму этих шести углов, образованных пересечением четырех граней типа (110). В случае модели F (следующие за ближайшими соседями притягиваются) из этих закругленных углов при низких температурах образуются грани типа (001), которые исчезают при температуре огрубления модели F . При еще более высоких температурах можно полностью пренебречь взаимодействием ближайших соседей и аппроксимировать направления (110) и соседние с ними при наличии другой модели F . Тогда, интерпретируя эти результаты для различных направлений типа (110), можно сконструировать приближенную равновесную форму кристалла целиком. Это показано в [55] и выполнено более детально для случая гранецентрированного кубического кристалла в [75], смотри также [26]. Заслуживает внимания то, что многие из полученных ранее результатов для термодинамических свойств шестивершинных моделей можно переосмыслить в моделях поверхностей раздела. Например, при помощи полученных Либом и Ву [71] графиков критических силовых полей при различных температурах рис. 24, а, б можно связать антиферромагнитную модель F с состоянием с нулевой поляризацией, а ферромагнитную модель KDP с состоянием, в котором поляризация не заморожена в максимальном значении. Они также могут рассматриваться и как графики для равновесных форм и размеров граней в модели ОЦТНТ.

В заключение подчеркнем, что модель ОЦТНТ также подтверждает универсальную неаналитическую форму площадок, соседних с гранями [55], что будет рассматриваться в разделе 4.4.

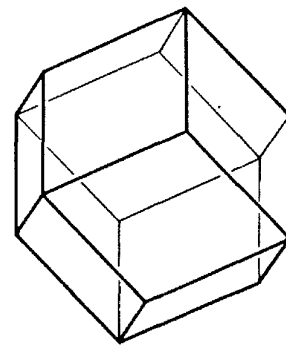


Рис. 23. Ромбододекаэдр

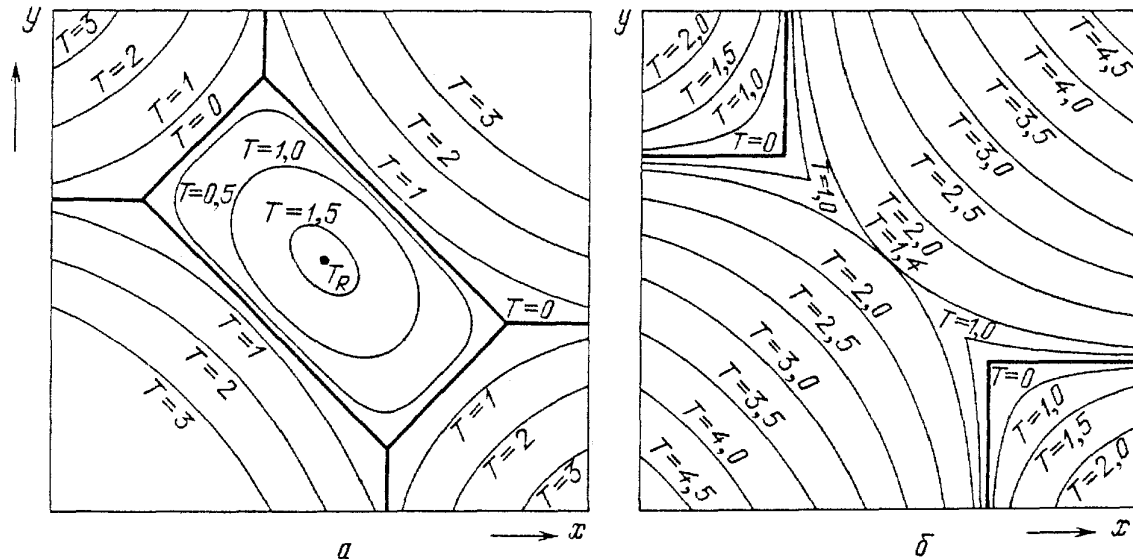


Рис. 24. *a* — Границы граней в анизотропной модели ОЦПТ с притяжением между следующими за ближайшими соседями для различных температур. Это является другим толкованием фазовой диаграммы F модели антиферроэлектрика Либа и Ву [71]. В выбранных здесь единицах $T_R = 2,08$. *б* — Границы граней в модели ОЦНТ с отталкиванием между следующими за ближайшими соседями для различных температур. Это является другим толкованием фазовой диаграммы модели KDP для ферроэлектрика Либа и Ву [71]

4.3. Модель терраса — ступенька — излом. Модель терраса—ступенька—излом (ТСИ) описывает поверхности с конечной плотностью ступенек, точнее поверхности $(p01)$ кубических кристаллов. Предполагая упругое и/или дипольное отталкивание ступенек (см. раздел 4.4), можно найти основное состояние такой поверхности, как правильное упорядочение идеальных ступенек с расстоянием $1/p$ между соседними ступеньками (т.е., если $1/p$ целое или полуцелое в случае грани- или объемноцентрированной кубической решетки, в противоположном случае основное состояние является более сложным [69]). При ненулевой температуре единственным возможным возбуждением является образование изломов на краях ступенек (рис. 14), т.е. вместо прямой, идущей в направлении $+y$, в местах изломов образуется поворот налево или направо в направлениях $\pm x$ и затем через 1, 2, 3... постоянных решетки опять поворот в направлении $+y$ (эквивалентным путем рассмотрения этого процесса является использование конфигураций двумерной модели ТНТ). Возбужденные состояния модели ТСИ можно фиксировать, задавая набор $\{\Delta_{ij}\}$, где Δ_{ij} отклонение j -го сегмента i -й ступеньки от его положения при нулевой температуре. Разумно предположить, что энергия такой конфигурации имеет следующий вид:

$$E = \sum_{ij} V(|\Delta_{ij} - \Delta_{ij+1}|) + \sum_{i,j,k,l} U(\Delta_{ij}, \Delta_{kl}), \quad (37)$$

где $V(\Delta)$ — энергия излома длины Δ , а $U(\Delta_{ij}, \Delta_{kl})$ описывает энергию взаимодействия между элементами ступеньки (ij) и (kl) . Пока $k_r T \ll V(1)$, очень хорошим является приближение $V(\Delta) = \varepsilon \Delta^2$, где $\varepsilon = V(1)$, так как изломы дли-

ны > 1 практически отсутствуют. Если, кроме того, положить, что $U(\Delta_{ij}, \Delta_{kl}) = \delta_{ik-1} \delta_{jl} \alpha (\Delta_{ij} - \Delta_{kj})^2$, то (37) даст значение энергии в анизотропной дискретной гауссовой модели. Следовательно, происходящий фазовый переход является переходом огрубления грани ($p01$) типа Костерлица—Таулеса. Он характеризуется делокализацией ступенек относительно их положения при нулевой температуре и флуктуациями $(\Delta_{ij} - \Delta_{ik})^2$ вдоль одной ступеньки, которые растут как $\ln |j - k|$ при увеличении расстояния между j и k . Из-за анизотропии флуктуации положения ступеньки много больше, чем флуктуации вдоль ступеньки.

Другой выбор потенциалов приводит к точно решаемой модели^(10*) [61, 74]

$$V(\Delta) = \delta_{\Delta 0} + \varepsilon \delta_{\Delta 1} \quad (\text{здесь } \Delta = 0 \text{ или } 1), \quad (38a)$$

$$U(\Delta_{ij}, \Delta_{kl}) = \delta_{ik-q} \delta_{jl} g(\Delta_{ij} - \Delta_{kj}), \quad (38б)$$

где

$$g(n) = -\infty, \quad n < -1$$

$$g(-1) = \alpha, \quad (38в)$$

$$g(n) = 0, \quad n \geq 0.$$

Эту модель можно представить цепью ХХЗ в поле [61, 75]. Эту задачу решили Янг и Янг [76]. В ней имеется переход огрубления типа Костерлица—Таулеса. По-видимому, эта модель дает хорошее описание поверхностей кристалла при следующих условиях:

1) энергия излома ε должна быть $\gg k_B T$, так что редки изломы, длина которых больше единичной (они запрещены (38a));

2) взаимодействие между соседними ступеньками быстро убывает с расстоянием, более реальным выбором, чем (38в) является $g(-2) \gg k_B T$ и $g(n) \ll k_B T$ для $n > 0$.

Очевидно, что в лучшем случае имеется всего лишь ограниченный интервал температур, в котором выполняются эти условия и которому будут соответствовать различные рациональные значения p . Бурков [77] и Шульц [74] на основании этого предсказали бесконечную последовательность температур огрубления для поверхностей ($m/n01$) с T_R , слабо зависящим от n , однако размер равновесных граней быстро уменьшается при увеличении n . Очевидно, что в моделях (37) и (38) свободная энергия ступеньки может быть отрицательной, как мы это рассматривали выше в разделе 3.3. Без взаимодействия между ступеньками $f(p, 0, 1)$ будет линейной функцией $|p|$. При низких температурах взаимодействие приводит к образованию изломов при рациональных значениях p , например при $p = 1/n$. Если линейный по $|p|$ вклад не обращается в нуль, получающийся излом в $f(p, 0, 1)$ имеет вид, изо-

браженный на рис. 19. В данном случае скачок $df/\partial p$ не так связан со свободной энергией ступеньки, как в разделе 3.2, так как теперь это уже не свободная энергия тех ступенек, которые переводят грань (001) в грань ($p01$). Если, однако, рассматривать переменные Δ_{ij} как переменные в модели ГНТ с энергией (37), то излом $f(p01)$ можно связать с появлением ступеньки в этой модели. В настоящей модели этот квазиизлом соответствует единичному сдвигу влево или вправо всех ступенек на некоторое расстояние x .

Селке и Сцпилка [78] численно исследовали модель (37) и подтвердили, что переход огрубления соответствует переходу Костерлица—Таулеса. Целью этой работы было сравнение с экспериментальными результатами по рассеянию на ступенчатых поверхностях. Имеется хорошее качественное согласие с экспериментами на Cu Лапужолада и др. [62], однако интерпретация этих экспериментов остается противоречивой; Конрад и др. [79] на основании похожих опытов на Ni нашли, что огрубление на ступенчатых поверхностях происходит при существенно более низких температурах. Очевидно, что необходимо большее число таких экспериментов. В заключение отметим, что если взаимодействие между ступеньками соответствует притяжению (оно может быть вызвано дипольными силами), то может происходить фазовый переход первого рода, то есть при низких температурах ступеньки на грани ($p01$) могут сливаться вместе, образуя резкую границу между гранями (001) и (100) [74]. При повышении температуры энтропийное отталкивание будет возрастать и стабилизировать направление ($p01$).

4.4. Универсальная форма поверхностей, близких к граням. Рассмотрим свободную энергию, приходящуюся на единицу спроектированной площади $f(p, q, 1)$, для поверхностей, близких к грани (001), как функцию p для $q = 0$. Для малых p эту функцию можно разложить [27, 55]

$$f(p, 0, 1) = |p|^f + |p|^3 C + \dots \quad (39)$$

Отсутствие квадратичного слагаемого наиболее удивительно. Разъяснение дано ниже. Из (39), следуя (7), получим

$$z = z_0 \left(1 - \frac{2C}{f^{(0)}} |p|^3 + \dots \right), \quad (40a)$$

$$x = \pm x_0 \left(1 + \frac{3C}{f} p^2 \right), \quad (40b)$$

где $z_0 = f^{(0)}/\lambda$, а $x_0 = f/\lambda$. Следовательно,

$$(z - z_0) = -\frac{2}{3} C^{-1/2} |x - x_0|^{3/2}. \quad (41)$$

Эта степенная зависимость (3/2) для $z - z_0$, как функции $|x - x_0|$ определяет неаналитический вид близких поверхностей, на что мы указывали выше. Следовательно, радиус кривизны на границе грани равен

$$R_y = \left(\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} \right)_{z_0^+}^{-1} = 0. \quad (42)$$

Заметим, что отличное от нуля квадратичное слагаемое в (39) приводит к параболическому профилю и дает конечный радиус кривизны.

Основное уравнение (39) можно интерпретировать следующим образом. Линейное по $|p|$ слагаемое соответствует вкладам в свободную энергию от одной невзаимодействующей ступеньки, а слагаемое с $|p|^3$ происходит от взаимодействия ступенек. Используя слишком простые предположения, мы бы получили, что свободная энергия взаимодействия пропорциональна квадрату плотности ступенек $|p|$, в то время как на самом деле она пропорциональна $|p|^3$. Объяснение этого требует привлечения как энтропийных, так и энергетических аргументов. Энтропийные взаимодействия качественно объясняются расчетами Грубера и Муллинса [60], в которых рассматривается влияние на поверхностное натяжение того, что соседние ступеньки не пересекаются. Для упрощения анализа они использовали одну ступеньку в модели ТСИ, заключенную между прямыми стенками, а не соседними ступеньками. Эти граничные условия приводят к энтропийному отталкиванию между ступенькой и стенками. Если имеется ступенька в направлении x , а стенки расположены в $x = \pm L$, то $P(n)$ плотность вероятности для ступеньки пройти через $x = n$ при некотором заданном y имеет следующий вид [60]

$$P(n) = \frac{1}{L} \cdot \cos^2 \frac{\pi n}{2L}, \quad (43)$$

а свободная энергия ступеньки равна

$$f^s(L) = f^s + CL^{-2}. \quad (44)$$

При отходе от стенок уменьшается вызванное условием непересечения понижение энтропии ступеньки и тем самым уменьшается рост свободной энергии от вклада пропорционального L^{-1} (что было бы, если бы $P(n)$ было постоянным) к вкладу, пропорциональному L^{-2} . Если фиксированные границы заменяются на соседние ступеньки, то эффективное расстояние L становится пропорциональным $|p|^{-1}$, следовательно, свободная энергия на ступеньку пропорциональна $f + Cp^2$, и мы получаем (39).

Кроме энтропийного отталкивания имеется еще и упругое взаимодействие, обусловленное локальными распределениями заряда. Оба эти типа взаимодействий на больших расстояниях между ступеньками имеют вид [62]

$$v = \frac{C}{A} \int_0^A dy |x_1(y) - x_2(y)|^{-2}, \quad (45)$$

где $x_i(y)$ означает x -координату i -й ступеньки в точке y , v — энергия взаимодействия на единицу длины, а интеграл берется между границами граней, на которых возникают ступеньки. Для малых p расстояние между ступеньками

обычно велико, так что на взаимодействие ступенек вряд ли влияет профиль ступенек^(11*). Следовательно, используя (43), можно оценить, что

$$v \approx \int_{-\frac{1}{2}|p|^{-1}}^{\frac{1}{2}|p|^{-1}} 2|p| dx \cdot \cos^2(\pi p x) C(x + \frac{1}{2}|p|^{-1})^{-2} \sim p^3. \quad (46)$$

5. Обсуждение

С тех пор как Бёртон ввел понятие — переход огрубления [1], наше представление об этом явлении существенно расширилось. Как мы указывали в предыдущих разделах, переход огрубления может с одной стороны характеризоваться постепенным исчезновением в кристалле граней данного направления, а с другой стороны тем, что расходится толщина поверхности, соответствующая этому направлению. Эта расходимость такова, что толщина поверхности раздела возрастает, как квадратный корень логарифма диаметра поверхности раздела. Эта картина перехода следует, как из расчетов по теории ренормационной группы, так и их точно решаемых моделей поверхностей кристалла. Экспериментально переходы огрубления наблюдались в основном при изменении температуры в пластичных кристаллах, находящихся в равновесии со своим паром, в ⁴He в равновесии со сверхтекучей фазой, а также в некоторых других системах. Для ⁴He теоретические предсказания природы перехода подтверждаются количественно. Для поверхностей раздела жидкость—твердое тело в сплавах металлов переходы огрубления также наблюдались при изменении состава.

Несмотря на полученные достижения остались некоторые противоречия и нерешенные вопросы, два из которых мы рассмотрим ниже.

5.1. Огрубление или поверхностное плавление. Бёртон и др. [1] вместо термина огрубление часто использовали термин поверхностное плавление. В более поздних работах, например, в обзоре Ненова [80], также считаются одинаковыми понятия переход огрубления и поверхностное плавление или в более современной терминологии поверхностное предварительное плавление.

Имеем ли мы два понятия или одно? Огрубление, как было упомянуто выше, характеризуется расходимостью толщины поверхности или, более точно, делокализацией положения поверхности в перпендикулярном ей направлении. С другой стороны, поверхностное предварительное плавление может характеризоваться следующими двумя особенностями, первая из которых статическая, а вторая динамическая:

1) Внешний слой или слои плавящейся поверхности теряют свою двумерную кристаллическую структуру, то есть средняя плотность молекул в плоскости в этих слоях становится почти постоянной;

2) Молекулы, которые ниже перехода по существу были неподвижны в своих фиксированных позициях, при поверхностном предварительном плавлении становятся подвижными. В то же время поверхностный слой теряет

сопротивление к двумерному сдвигу.

Надо полагать, что в действительности эти отличия между твердым телом и поверхностным расплавленным состоянием преувеличены. Подвижность в твердом теле не равна в точности нулю, так как осуществляется прыжковая диффузия при обмене частицами и вакансиями в поверхностном слое. С другой стороны, влияние лежащего ниже кристалла приводит к тому, что в поверхностном слое нельзя считать, что плотность полностью трансляционно инвариантна. Должна оставаться хотя и слабая, но периодическая модуляция. Следовательно, поверхностное предварительное плавление должно быть переходом первого рода между двумя состояниями с той же симметрией, одно из которых — твердое состояние характеризуется сильной модуляцией и низкой подвижностью, а другое — поверхностное расплавленное состояние характеризуется слабой модуляцией и высокой подвижностью.

По-видимому, нет никаких причин, чтобы переход огрубления был связан с резким уменьшением решеточного упорядочения в поверхностном слое. Фактически и в численных расчетах и в экспериментах поверхностное предварительное плавление обычно наблюдается в неплотно упакованных кристаллах при температурах, близких к температуре объемного плавления, то есть далеко от температуры огрубления. Недавно Френкен и Ван дер Веен [81] наблюдали предварительное плавление в свинце при таких температурах, что рассматриваемая ими кристаллическая грань согласно Хейроду и Метуа [10] является шероховатой. С другой стороны, поверхностное предварительное плавление может происходить на малом участке поверхности без делокализации в перпендикулярном направлении. Джаянти и др. [82] предположили, что это может происходить на поверхностях с низкими индексами в Cu , хотя и при температурах, очень близких и даже более высоких, чем температура объемного плавления. По-видимому, можно надежно заключить, что поверхностное предварительное плавление и поверхностное огрубление являются совершенно различными явлениями, хотя они конечно могут оказывать взаимное влияние. Предмет поверхностного предварительного плавления, по-видимому, является таким же нерешенным вопросом, как и переход огрубления. Например, не ясно, является ли поверхностное предварительное плавление резким фазовым переходом, а не непрерывным переходом с быстрым, но гладким изменением подвижности и поверхностной модуляции в узком интервале температур. Очевидно, что о взаимном влиянии огрубления и поверхностного предварительного плавления известно очень мало. Подчеркнем еще, что в исходной модели Бёртона и др. [1] имеются различные типы поверхностного предварительного плавления. Напомним, что в этой модели ниже температуры перехода растущий слой может существовать в двух фазах. Разреженная фаза описывает пустые части слоя, а плотная фаза описывает растущие части. Эти две фазы могут сосуществовать, причем граница этих фаз хорошо определена. Выше температуры перехода имеется только одна равновесная фаза. Это означает, что рост происходит однородно по всему слою. Характер фазового перехода такой же, как в двумерной модели Изинга или в решеточном газе.

Переходы этого типа могут происходить на кристаллических гранях с такими направлениями, в которых неэквивалентные слои расположены один на другом. Это показал Кнопс [83] на примере ОЦТНТ с неэквивалентными

подрешетками, то есть связи следующих за ближайшими соседями в одной из неэквивалентных подрешеток сильнее, чем те же связи в другой подрешетке. В этом случае отсутствует переход огрубления при конечной температуре, однако в неплотно упакованных решетках имеется фазовый переход типа Изинга. Выше температуры перехода верхний слой сильно связанной подрешетки остается гладким, но он покрыт наполовину нерегулярным способом расположенными частицами слабо связанной фазы. Беспорядок в распределении этой фазы препятствует образованию больших террас сильно связанной фазы наверху, что подавляет переход огрубления при конечных температурах. Нет никаких оснований для двумерной демодуляции или сильного повышения подвижности в слабо связанном верхнем слое при температуре перехода, следовательно, переход нельзя называть поверхностным предварительным плавлением в описанном выше смысле.

Модель Блёте—Хилхорста может также описывать кристаллические грани, построенные из неэквивалентных слоев, в рассматриваемом случае трех различных типов [59]. Вновь при конечных температурах отсутствует переход огрубления, а в решетках точно решаемых моделей нет также и переходов типа Изинга. Можно получить переходы типа Изинга, вводя дополнительные взаимодействия между частицами в том же самом слое, хотя эта модель уже не будет точно решаемой известными методами.

Интересным является вопрос, будут ли переходы типа Изинга возможны без упорядочения неэквивалентных слоев. Например, имеется ли на поверхностях ${}^4\text{He}$ при понижении температуры квантовое огрубление, как утверждают Андреев и Паршин [84], переход огрубления по Фишеру и Виксу [70] или же на самом деле, по-видимому, переход типа Изинга. В связи с этим следует отметить, что Кастаинг и др. [17, 85] наблюдали критическое замедление в ${}^4\text{He}$ при 0,21 К, для чего пока нет удовлетворительного объяснения.

5.2. Все ли переходы огрубления являются переходами типа Костерлица—Таулеса. Пока все простые расчеты переходов огрубления дают переходы типа Костерлица—Таулеса. Означает ли это, что все переходы огрубления того же типа? Ниже мы рассмотрим три возможные причины, по которым переходы огрубления могут быть другого типа.

5.2.1. Неэквивалентные слои. В разделе 5.1 мы отметили, что в моделях ОЦНТ и в моделях Блёте—Хилхорста нет переходов огрубления при конечных температурах. Огрубление имеется только лишь в пределе $T \rightarrow 0$. Как функция температуры эти переходы не могут быть типа Костерлица—Таулеса, так как в этом случае температура перехода была бы конечной, но даже и как функция обратной температуры тип этих переходов отличается от переходов Костерлица—Таулеса [59, 83]. В известном смысле бесконечная температура огрубления обусловлена тем, что в этих моделях допускается условие, по которому имеется твердое тело при всех температурах. Снятие этого условия, по-видимому, приведет к тому, что эти переходы станут переходами типа Костерлица—Таулеса при конечной температуре.

5.2.2. Примеси и дефекты решетки. Наличие дефектов решетки или примесей может изменить характер переходов огрубления. Для простоты рассмотрим два примера.

5.2.2-1. Винтовая дислокация. — Концевые точки винтовых дислокаций, находясь на поверхности кристалла, приводят к возникновению ступенек, расположенных между дислокациями с противоположными вращениями. Эти ступеньки представляют собой хорошо известную причину спирального роста гладких поверхностей [1]. В модели ОЦНТ винтовые дислокации с вектором Бюргерса ± 4 можно ввести, используя обобщение шестивершинной модели — симметричную восьмивершинную модель [53]. Решение этой модели Бакстером [86] показало, что изменяется критическое поведение, а следовательно, и критические экспоненты могут принимать различные допустимые значения. Эти результаты нельзя, однако, использовать непосредственно для описания свойств действительных поверхностей кристалла, так как в восьмивершинной модели концевым точкам винтовых дислокаций придается энергия, а затем все термодинамические свойства определяются усреднением по равновесному ансамблю. Это означает, что плотность винтовых дислокаций и корреляции их положения зависят от температуры и, следовательно, могут сильно изменяться при переходе через критическую точку. В реальных кристаллах концевые точки винтовых дислокаций фиксируются структурой объема кристалла, на который почти не влияет переход огрубления, проходящий вблизи поверхности. Следовательно, переход от восьмивершинной модели к реальным кристаллам является пока сложным и ненадежным.

5.2.2-2. Влияние примесей. — Недавно Хьюз и Хенли [87] показали, что в двумерном кристалле наличие фиксированных случайных примесей (в частности, случайных связей в двумерной модели Изинга) сильно влияет на огрубление поверхности раздела (температура огрубления равна нулю в этом случае). Анализ по теории ренормализационной группы показывает, что и в трехмерном случае случайные примеси будут изменять характер перехода огрубления. По нашему мнению, этот вопрос требует дальнейшего исследования как экспериментально, так и теоретически.

5.2.3. Переходы первого рода. Если поверхность кристалла может быть в двух состояниях, одно из которых приданной температуре является гладким, а другое шероховатым, между этими состояниями возможен фазовый переход первого рода. Это будет переход огрубления первого рода [88]. Это может произойти как вторичный эффект объемного перехода первого рода. Например, в тройной точке поверхность раздела твердое тело — газ заменяется на поверхность раздела твердое тело — жидкость и в основном первые поверхности раздела гладкие (по крайней мере для малых индексов), а вторые — шероховатые. Недавно Дам [89] рассмотрел другой пример, когда структурный переход в объеме кристалла также приводит к изменению поверхности раздела от гладкой к шероховатой. Нам не известны ясно выраженные примеры переходов огрубления первого рода, которые не вызваны объемными фазовыми переходами. Еустатопулос [41] привел, однако, некоторые экспериментальные результаты для поверхностей раздела между твердым Zn и жидким In, которые производят впечатление того, что фазовый переход первого рода имеется в данном случае [88].

В заключение подчеркнем, что наши знания теории перехода огрубления за последнее время существенно возросли, в то же время накапливается обширное экспериментальное подтверждение его. Остается еще несколько не-

решенных задач, например, возможности других типов переходов огрубления, влияние примесей, неидеальности решетки и условий роста на переход огрубления [90]. Экспериментально переход огрубления является одним из самых сложных для изучения переходов, и хотя за последние годы достигнуты большие успехи, нельзя быть уверенным в получении новых результатов в будущем.

5.3. Многослойная адсорбция и огрубление. В заключение мы обсудим связь между огрублением и многослойной адсорбцией. Когда адсорбируются слои кристаллического материала на притягивающей подложке, можно наблюдать фазовые переходы, связанные с адсорбцией n -го слоя. При достаточно низкой температуре и соответствующем значении $p_n(T)$ давления (или, что эквивалентно, плотности адсорбата в жидкой фазе), как состояние n адсорбированных слоев, так и $n - 1$ слоев должны находиться в равновесии. Это приводит к фазовому переходу первого рода, при этом на изотерме адсорбата при $p = p_n(T)$ количество адсорбированного вещества изменяется скачком от величины, соответствующей $(n - 1)$ -слойному адсорбату, до величины, соответствующей n -слойному адсорбату. Теоретические расчеты [91], машинное моделирование [92] и эксперименты Миранды и др. [93] показали, что при постоянной температуре $p_n(T)$ является возрастающей функцией n . Для каждого слоя n , по-видимому, имеется критическая температура T_n^c , выше которой рост n -го слоя происходит непрерывно, а не по механизму образования зародышей. Для каждого конечного n фазовый переход, по-видимому, будет универсального класса, соответствующего двумерной модели Изинга. В пределе $n \rightarrow \infty$ T_n^c должно стремиться к температуре огрубления для соответствующей поверхности чистого кристалла адсорбата. Обращение в нуль барьера образования зародышей будет одной из характеристик перехода огрубления.

Когда температура возрастает до температуры огрубления, скачки в величине адсорбированного вещества остаются только для достаточно больших значений n , а при или выше температуры огрубления изотермы становятся гладкими и стремятся к бесконечности при p , стремящемся к объемному давлению пара. Приведенная выше картина подтверждается экспериментами Миранды и др. [93] для Хе, адсорбированного на Pd, хотя и нет других независимых измерений температуры огрубления на соответственной поверхности Хе.

Приложение

Поверхностная жесткость и универсальный скачок кривизны.

Рассмотрим сперва кручение вокруг оси y . В (7) можно разложить f и df/dp около $(p, q) = (0, 0)$, получим

$$z(p) = \frac{1}{\lambda} f^{(0)} - \frac{1}{2} p^2 \frac{\partial^2 f^{(0)}}{\partial p^2} + \dots, \quad (\text{П.1})$$

где индексом (0) обозначено значение при $(p, q) = (0, 0)$. С другой стороны, если R_x — радиус кривизны в плоскости x, z , то

$$z(p) = z_0 + \frac{1}{2} p^2 R_x. \quad (\text{П.2})$$

Из (3) следует, что для малых p поверхностное натяжение γ и поверхностное натяжение на единицу спроектированной площади f связаны следующим образом

$$\gamma(p, 0) = f^{(0)}(1 - \frac{1}{2} p^2 + \dots). \quad (\text{П.3})$$

В пределе $p \rightarrow 0$ частная производная $\partial^2/\partial\theta^2$ становится равной $\partial^2/\partial p^2$, следовательно, из (34) и (П.3) получим

$$\alpha_y^{(0)} = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial p^2} \right)^0; \quad (\text{П.4})$$

здесь индекс y означает ось кручения. Следовательно, из (П.1), (П.2) получим

$$\alpha_y^{(0)} = \lambda R_x. \quad (\text{П.5})$$

Постоянную λ можно выразить согласно (П.1), (П.3) следующим образом

$$\lambda = \gamma_0 / z_0. \quad (\text{П.6})$$

Подставляя в (П.5) и используя (33) для R_x , найдем, что

$$\alpha_y^{(0)} = \pi k_B T_R / 2a_v^2. \quad (\text{П.7})$$

В общем случае $\alpha_y^{(0)}$ следует заменить на

$$(\alpha_y^{(0)} \alpha_x^{(0)})^{1/2} = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial p^2} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} \right)^{1/2}, \quad (\text{П.8})$$

если главные радиусы кривизны лежат в плоскостях x, z и y, z . Если главные оси лежат в произвольных плоскостях, (П.7) обобщается на (35).

Благодарности

Для нас были очень полезны дискуссии, в которых участвовали доктора Балибар, Галлет, Нозьер, Шоммерс, Селке, ван дер Веен и Вилэн. Мы очень благодарны за рисунки доктору Метуа (рис. 1), доктору Виксу (рис. 16, 17), доктору Либу (рис. 24 из [71]).

(Перевод с англ А.П. Силина)

ПРИМЕЧАНИЯ

¹ Здесь мы пренебрегаем вкладами, обусловленными кривизной, что оправдано в термодинамическом пределе, когда объем кристалла стремится к бесконечности.

² Отметим аналогично с построением Максвелла для ван-дер-ваальсовой жидкости [39].

³ Следует отметить, что мы имеем дело с поверхностями кристаллов, в которых отсутствуют дислокации (см. раздел 5.2.3).

⁴ За направление ступеньки принимается направление градиента высоты ступеньки.

⁵ Это выражение снимается, если есть дальнедействующее взаимодействие между ступеньками, что и действительно наблюдается (см. раздел 4.4).

⁶ Используя (14), можно дать макроскопическое толкование f^s , как скачка в наклоне γ в точке изгиба, хотя ступенька является макроскопическим объектом.

⁷ Простой расчет (минимизация f^s по числу линейных участков) показывает, что средняя длина этих участков пропорциональна $\exp(E_c/k_B T)$, где E_c — энергия угла между двумя линейными участками. Следовательно, линейные участки остаются микроскопической длины, хотя они могут становиться довольно большими при низких температурах.

⁸ Соображения, которые приводят к (28), (29), довольно тонкие. Свободная энергия при дуальном сопряжении идентична логарифму корреляционной функции спин-спин в XY-модели при дуальной температуре [64,65]. Корреляционная длина в (29), с другой стороны, дуально сопряжена с корреляционной функцией вихрей в XY-модели [4]. Идентичность спин-спин- и вихрь—вихрь- корреляционных длин следует из анализа Костерлица [66].

⁹ Следуя Вольфу и др. [20], универсальное значение поверхностей жесткости при T_R свяжем с универсальным множителем в корреляционной функции высота—высота при температуре огрубления. Мы не можем объяснить эту связь особенно, так как в анизотропном случае две величины, по-видимому, ведут себя при T_R различно.

¹⁰ В [62], где также рассматривалась эта модель, накладывалось дополнительное условие, что Δ может принимать только значения > 1 , которое отсутствует в нашем случае.

¹¹ При условии, что ступеньки не притягиваются столь сильно, что близкие к граням поверхности становятся нестабильными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [I] *Burton W.K. et al.*// Phil. Trans. Roy. Soc. Ser. A. 1951. V. 243. P. 299.
 2. *Onsager L.*//Phys. Rev. 1944. V. 65. P. 117.
 3. *Yang C.N., Lee T.D.*//Ibidem. 1952. V. 87. P. 404, 410.
 4. *Chui S.T., Weeks J.D.*//Ibidem. Ser. B. 1976. V. 14. P. 4978.
 5. *Березинский В.Л.*//ЖЭТФ. 1970. Т. 59. С. 907; 1972. Т. 61. С. 1144.
 6. *Kosterlitz J.M., Thouless D.J.*// J. Phys. Ser. C. 1973. V. 6. P. 1181.
Kosterlitz J.M.//Ibidem. 1974. V. 7. P. 1046.
 7. *Jose J.V. et al.*//Phys. Rev. Ser. B. 1977. V. 16. P. 1217.
 8. *Hunt R.A., Gale B.*// J Phys. Ser. C. 1973. V. 7. P. 1046.
 9. *Heyraud J.C., Metois J.J.*//J. Cryst. Growth. 1980. V. 50. P. 571.
 10. *Heyraud J.C., Metois J.J.*//Surf. Sci. 1983. V. 128. P. 334.
 [II] *Pavlovskaya A., Nenov D.*//Ibidem. 1971. V. 27. P. 211.
 12. *Pavlovskaya A., Nenov D.*// J. Cryst. Growth. 1972. V. 12. P. 9.
 13. *Pavlovskaya A., Nenov D.*//Ibidem. 1977. V. 39. P. 346; Kristal und Technik. 1977. Bd 12. S. 473.
 14. *Ohachi T., Taniguchi I.*//J. Cryst. Growth. 1983. V. 65. P. 84.
 15. *Passerone A. et al.*//Scripta Meta. 1980. V. 14. P. 1089.
 16. *Avron J.E. et al.*//Phys. Rev. Lett. 1980. V. 45. P. 814.
 17. *Balibar S., Castaing E.*//J. Phys. Lett. 1980. V. 41. P. L329.
 18. *Кешишев К.О. и др.*//ЖЭТФ. 1981. Т. 80. С. 716.
 19. *Wolf P.E. et al.*//Phys. Rev. Lett. 1983. V. 51. P. 1366.
 20. *Wolf P.E., et al.*// J. de Phys. 1985. T. 46. P. 1987.
Gallet F. et al.// Europhys. Lett. (in press).
 [21] *Weeks J.D., Gilmer G.H.*// Adv. Chem. Phys. 1979. V. 40. P. 157.
 22. *Frank F.C.*//Disc. Farad. Soc. 1949. V. 5. P. 132.
 23. *Jackson K.A., Miller C.E.*// J Cryst. Growth. 1977. V. 40. P. 169.
Rolley E. et al.//Europhys. Lett, (in press).
 24. *Weeks J.D.*//Ordering in Strongly Fluctuating Condensed Matter Systems/Ed. T. Riste. — New York: Plenum Press, 1980. — P. 293.
 25. *Zia R.K.P.*//Statistical and Particle Physics: Common Problems and Technics. — Ediburg, England, 1984.
 26. *Rottman C., Wortis M.*//Phys. Rep, 1984. V. 103. P. 59.
 27. *Balibar S., Castaing B.*//Surf. Sci. Kept. 1985. V. 5. P. 87.
 28. *Balibar S., Saam W.* (in preparation).

29. *Nozieres P.* lecture at the College de France. — 1984 (to be published).
30. *Wulff G.*// *Z s. Krist. Mineral.* 1901. Bd. 105. S. 449.
- [31] *Herring C.*//*Phys. Rev.* 1951. V. 52. P. 87.
32. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. — М.: Наука, 1964.
33. *Taylor J.E.*//*Symp. Matem.* 1974. V. 14. P. 499.
34. *Dinghas A.*// *Z s. Krist.* 1944. Bd. 105. S. 304.
35. *Андреев А.Ф.*//*ЖЭТФ.* 1981. Т. 80. С. 2042.
36. *Pieranski P. et al.*// *Phys. Rev.* 1985. V. A31. P. 3912.
37. *Бабкин А.В. и др.*//*Письма ЖЭТФ.* 1984. Т. 39. С. 519.
38. *Avron J.E. et al.*// *J. Stat. Phys.* 1983. V. 33. P. 493.
39. *Fisher M.E.*// *J. Math. Phys.* 1964. V. 5. P. 944.
40. *Watson J.H.L. et al.*// *J. Chem. Phys.* 1948. V. 16. P. 997.
- [41] *Eustathopoulos N.*// *Intern. Met. Rev.* 1983. V. 28. P. 189.
42. *Cann J.W., Hoffman D.W.*// *Acta Met.* 1974. V. 22. P. 1205.
43. *Jayaprakash C., Saam W.F.*//*Phys. Rev.* 1984. V. B30. P. 3916.
44. *Kossel W.*//*Nachr. Ges. Wiss. Gottingen. Matem. und Phys. Kl.* 1927. S. 135.
45. *Stranski J.N.*// *Zs. Phys. Chem.* 1928. Bd. 136. S. 259.
46. *Chui S.T., Weeks J.D.*//*Phys. Rev. Lett.* 1978. V. 40. P. 733.
47. *Bricmont J. et al.*// *J. Stat. Phys.* 1986. V. 42. P. 743.
48. *Leamy H.J., Gilmer G.H.*// *J. Cryst. Growth.* 1974. V. 24/25. P. 499.
49. *Van Beijeren H., Gallavotti G.*// *Lett. Nuovo Cimento.* 1972. V. 4. P. 699.
50. *Weeks J.D. et al.*//*Phys. Rev. Lett.* 1973. V. 31. P. 549.
- [51] *Van Beijeren H.*//*Commun. Math. Phys.* 1975. V. 40. P. 1.
52. *Bricmont J., Lebowitz J.L.* (частное сообщение).
53. *Van Beijeren H.*// *Phys. Rev. Lett.* 1977. V. 38. P. 993.
54. *Frbhlich J., Spencer T.*// *Commun. Math. Phys.* 1981. V. 81. P. 527.
55. *Jayaprakash C. et al.*// *Phys. Rev. Utt.* 1983. V. 50. P. 2017.
56. *Blote H.W.J., Hilhorst H.J.*// *J. Phys. Ser. A.* 1982. V. 15. P. 631.
57. *Rottman C., Wortis M.*// *Phys. Rev. Ser. B.* 1984. V. 29. P. 328.
58. *Rottman C. et al.*//*Phys. Rev. Lett.* 1984. V. 52. P. 1009.
59. *Nienhuis B. et al.*// *J. Phys. Ser. A.* 1984. V. 17. P. 3559.
60. *Gruber E.E., Mullius W.W.*// *J. Phys. Chem. Sol.* 1967. V. 28. P. 375.
- [61] *Jayaprakash C. et al.*//*Phys. Rev. Ser. B.* 1884. V. 30. P. 6549.
62. *Villain J. et al.*// *J. Phys. Ser. F.* 1985. V. 15. P. 809.
63. *Villain J.*// *J. de Phys.* 1975. T. 36. P. 581.
64. *Ohta T., Jasnov D.*//*Phys. Rev. Ser. B.* 1979. V. 20. P. 139.
65. *Wiegmann P.B.*// *J. Phys. Ser. C.* 1978. V. 11. p. 1583.
66. *Shugard W.J. et al.*// *Phys. Rev. Lett.* 1978. V. 41. P. 1399.
67. *Van der Eerden J.P., Knops H.J.F.*//*Phys. Lett. Ser. A.* 1978. V. 66. P. 334.
68. *Swendsen R.H.*//*Phys. Rev. Ser. B.* 1978. V. 17. P. 3710.
69. *Ohta T., Kawasaki K.*// *Prog. Theor. Phys.* 1978. V. 60. P. 365.
70. *Fisher D.S., Weeks J.D.*//*Phys. Rev. Lett.* 1983. V. 50. P. 1077.
- [71] *Lieb E.H., Wu F.Y.*// *Phase Transition and Critical Phenomena* Ed. C. Domb, M.S. Green. V. 1. — New York: Academic Press, 1972.
72. *Forrester P.J.*// *J. Phys. Ser. A.* 1986. V. 19. P. 143.
73. *Yang C.P.*//*Phys. Rev. Lett.* 1967. V. 19. P. 586.
Sutherland B. et al.//*Ibidem.* P. 588.
74. *Schulz H.J.*// *J. de Phys.* 1985. T. 46. P. 257.
75. *Jayaprakash C., Saam W.F.*//*Phys. Rev. Ser. B.* 1984. V. 30. P. 3917.
76. *Yang C.N., Yang C.P.*//*Phys. Rev.* 1966. V. 150. P. 321, 327.
77. *Burkov S.E.*// *J. de Phys.* 1985. V. 46. P. 317.
78. *Selke W., Szp lka A.M.*//*Zs. Phys.* 1986. Bd. 1362. S. 381.
79. *Conrad E.H. et al.*// *J. Chem. Phys.* 1986. V. 84. P. 1015.
80. *Nenow D.*// *Prog. Cryst. Growth, and Charact.* 1984. V. 9. P. 185.
- [81] *Frenken J.W.M., van der Veen J.F.*//*Phys. Rev. Lett.* 1985. V. 54. P. 134.
82. *Jayanti C.S. et al.*// *Surf. Sci.* 1984. V. 152/153. P. 155.
83. *Knops H.J.F.*//*Phys. Rev.* 1979. V. B20. P. 4670.
84. *Андреев А.Р., Паршин А.Я.*//*ЖЭТФ.* 1978. Т. 75. С. 1511.

85. *Puech L. et al.*// J. Phys. Lett. 1983. V. 44. P. L159.
 86. *Baxter R.L.*//Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. — London: Academic Press, 1982.
 87. *Huse D.A., Henley C.L.*//Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. P. 270S.
 88. *Nozieres P.* (частное сообщение).
 89. *Dam B.*//Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. P. 2806.
 90. *Van Saarloos W., Gilber G.H.*// Phys. Rev. Ser. B. (in press).
 [91] *De Oliveira M.J., Griffiths R.B.*//Surf. Sci. 1978. V. 71. P. 687.
Weeks J.D.// Phys. Rev. Ser. B. 1982. V. 26. P. 3998.
Pandit R. et al.//Ibidem. P. 5112.
Saam W.F.//Surf. Sci. 1983. V. 125. P. 253.
 92. *Kim J.M., Landau D.P.*// Ibidem. 1981, V. 110. P. 415.
 93. *Miranda R. et al.*// Phys. Rev. Lett. 1983. V. 51. P. 782.
Miranda R. et al.// J. Chem. Phys. 1984. V. 80. P. 2931.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА (С НАЗВАНИЯМИ)

- Abraham D.B.* Surface structures and phase transitions-exact results//Phase Transitions and Critical Phenomena/Eds. C. Domb, J.L. Lebovitz. — London: Academic Press. — 1986. — V. 10. Surface reconstruction in crystals//Phys. Rev. Lett. 1983. V. 51. P. 1279.
Andrews G.F., Forrester P.J. Height probabilities in solid-on-solid models// J. Phys. Ser. A. 1986. V. 19. P. L923.
Bonzel H.P. et al. The dynamic behavior of periodic surface profiles on metals under the influence of anisotropic surface energy// A ppl. Phys. Ser. A. 1984. V. 35. P. 1.
Conrad E.H. et al. Observation of surface roughening on Ni(115)// J. Chem. Phys. 1986. V. 84. P. 1015; V. 85. P. 4756.
Garmi Y. et al. The critical behaviour of vicinal surfaces of ^4He . — Preprint.
Falle F. et al.//An experimental study of the roughening transition on a stepped surface Cu(115)// Europhys. Lett. 1987. V. 3. P. 737.
Forrester P.J. Exact calculation of the local height probabilities in the body-cent-red SOS model// J. Phys. Ser. A. 1986. V. 19. P. L143.
Corse D. et al.//A molecular dynamics study of the thermal behaviour of Cu(115)//Surf. Sci. 1986. V. 178. P. 434.
Heyraud J.C., Metois J.J. Surface free energy anisotropy measurement of indium//Ibidem. V. 117. P. 213; Growth shapes of metallic crystals and roughening transition// J. Cryst. Growth. 1986. V. 75. P. 173.
Levi A.C., Tossatti E. On the roughening of molten surfaces//Surf. Sci. 1986. V. 178. P. 425.
Lapujoulade J. Molecular beam study of surface roughening transitions//Ibidem. P. 406.
Metois J.J., Heyraud J.C. Analysis of the critical behaviour of curved regions in equilibrium shapes of in crystals//Ibidem. P. 406.
den Nijs M.//Antiferromagnetic restricted solid-on-solid model: Ising models of rough surfaces//Phys. Rev. Ser. B. 1986. V. 32. P. 4785; Correlations to scaling and self-duality in the restricted solid-on-solid model// J. Phys. Ser. A. 1985. V. 18. P. 549.
Rys F.S. Critical and noncritical roughening of surfaces//Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 624. On the roughening of solid surfaces//Surf. Sci. 1986. V. 178. P. 382.
Saito Y., Muller-Krumbhaar H. Two-dimensional Coulomb gas: A Monte Carlo study//Phys. rev. Ser. B. 1981. B. 23. P. 308.
Swendsen R.H.//Monte Carlo study of the Coulomb gas and the villain XY model in the discrete Gaussian roughening representation//Ibidem. 1978. V. 18. P. 492.
Trayanov A., Nenov D. Surface roughening and quasi-liquid layer// J. Cryst. Growth. 1986. V. 74. P. 375.
Veen J.F. et al. Dynamic and melting of surfaces//Surf. Sci. 1986. V. 178. P. 382.
Villain J. Healing of rough surface at low temperature//Europhys. Lett. 1986. V. 2. P. 531.
Zia R.K.P., Cittis A. Effects of gravity on equilibrium crystal shapes: droplets hung on a Wall//Phys. Rev. Ser. B. 1987. V. 35. P. 5907.