Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Навчально-науковий інститут комп'ютерної фізики та енергетики

Кафедра фізики нетрадиційних енерготехнологій та екології

Пояснювальна записка

до дипломної роботи магістра

на тему:

НЕЛІНІЙНІ ХВИЛІ ГУСТИНИ СХОДИНОК НА ВІЦИНАЛЬНІЙ ПОВЕРХНІ КРИСТАЛУ

Виконав: студент 2 курсу, групи НФ-61

спеціальності 105

прикладна фізика та наноматеріали

Міхнич В.О.

Керівник: Кулик О.П.

Рецензент: Скоромна С.Ф.

Харків – 2020

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна
Навчально-науковий інститут комп'ютерної фізики та енергетики
Кафедра __ фізики нетрадиційних енерготехнологій та екології_____
Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) _магістр___
Спеціальність 105 прикладна фізика та наноматеріали_____

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ __Ткаченко В.І.___

підпис ініціали,прізвище

"____"_____20___року

З А В Д А Н Н Я

НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ (ПРОЕКТ)

_____Міхнича Владислава Олексійовича_____

(прізвище, ім'я, по батькові студента)

1. Тема роботи «Нелінійні хвилі густини сходинок на віцинальній поверхні кристалу»,

керівник роботи Кулик Олександр Петрович, канд. фіз.-мат. наук, доцент

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від "___"_____20__року №___

2. Строк подання студентом роботи_____

3. Перелік питань, які потрібно розробити: Проаналізувати основні способи отримання низькорозмірних структур в умовах гетероепітаксії, зокрема, на віцинальних поверхнях кристалів; дослідити процес формування нелінійної хвилі густини сходинок для одновимірної моделі термодинамічно стабільної віцинальної поверхні в умовах росту кристалу із парової фази.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Аналітичний огляд основних фізичних властивостей, сфер застосування, фізичних способів отримання та технологій формування нанорозмірних систем, зокрема, на віцинальних підкладках в умовах гетероепітаксії
2	Аналіз фізичних основ процесів, що призводять до формування кінематичних хвиль та огляд основних нелінійних рівнянь, що описують їх еволюцію
3	Аналіз числових методів розв'язання еволюційних рівнянь типу Кортевега-де Фріза – Бюргерса з метою вибору найбільш оптимального для вирішення поставленої задачі
4	Отримання рівняння Кортевега де Фріза - Бюргерса для одновимірної моделі термодинамічно стабільної віцинальної поверхні кристалу, що знаходиться в умовах росту з парової фази, побудова алгоритму його розв'язання, якісний аналіз еволюції графічних розв'язків
5	Інтерпретація аналітичного розв'язку рівняння Кортевега де Фріза - Бюргерса для кінематичної хвилі елементарних сходинок на віцинальній поверхні типу (100) монокристалу NaCl при рості з парової фази
6	Висновки

5. Дата видачі завдання _____

Студент _____ Міхнич В. О.

підпис ініціали, прізвище

Керівник роботи _____ Кулик О.П. __

РЕФЕРАТ

«Нелінійні хвилі густини сходинок на віцинальній поверхні кристалу». Виконав Міхнич Владислав Олексійович, студент фізико-енергетичного факультету, Харківського Національного Університету імені В. Н. Каразіна, 2020.

Робота складається зі вступу, 3 розділів та висновків; містить 26 рисунків, 4 таблиці, список використаних джерел з 38 найменувань.

Показано, що одним із перспективних способів організації наноточок є самовпорядкований зріст нанокристалів на макросходинках, які визначають профіль віцинальної поверхні в нерівноважних умовах. Формування і кінетична взаємодія макросходинок досліджені на основі результатів загального аналізу кінематичних хвиль для одновимірної моделі макроскопічно викривленої віцинальної поверхні при рості із парової фази. Запропоновано алгоритм розв'язання і отримані числові розв'язки еволюційного рівняння з періодичними граничними умовами, яке описує кінематичну хвилю. Показано, що нелінійні ефекти в умовах конкуренції дисперсійних і дисипативних процесів можуть призводити до виникнення ударних хвиль. Аналітичний розв'язок для монотонної ударної хвилі інтерпретовано для умов реального експерименту.

Ключові поняття: нелінійні хвилі**,** віцинальна поверхня, густина елементарних сходинок, низькорозмірні структури, наноточки, еволюційні рівняння, числові методи

РЕФЕРАТ

«Нелинейные волны плотности ступеней на вицинальной поверхности кристалла». Выполнил Михнич Владислав Алексеевич, студент физико-энергетического факультета, Харьковского Национального Университета имени В. Н. Каразина, 2020.

Работа состоит из введения, 3 глав и вывода; содержит 26 рисунков, 4 таблицы, список использованных источников из 38 наименований.

Показано, что одним из перспективных способов организации наноточек является самоупорядоченый рост нанокристаллов на макроступенях, которые определяют профиль вицинальной поверхности в неравновесных условиях. Формирование и кинетическое взаимодействие макроступеней исследованы на основе результатов общего анализа кинематических волн для одномерной модели макроскопически искривленной вицинальной поверхности при росте из паровой фазы. Предложен алгоритм и получены числовые решения эволюционного уравнения с периодическими граничными условиями, описывающего кинематическую волну. Показано, что нелинейные эффекты в условиях конкуренции дисперсионных и диссипативных процессов могут приводить к возникновению ударных волн. Аналитическое решение для монотонной ударной волны интерпретировано для условий реального эксперимента.

Ключевые понятия: нелинейные волны, вицинальная поверхность, плотность элементарных ступеней, низкоразмерные структуры, наноточки, эволюционные уравнения, численные методы

ABSTRACT

"Nonlinear density waves of steps on the vinicial crystal surface". Conducted by Vladyslav Mikhnych, student of the Physics and Energy Department, Kharkiv National University named after V.N. Karazin, 2020.

The work consists of the introduction, 3 chapters and conclusion; contains 26 drawings, 4 tables, list of used sources from 38 titles.

It is shown that one of the promising methods for organizing nanodots is the self-ordered growth of nanocrystals on macro steps, which determine the profile of the vicinal surface under nonequilibrium conditions. The formation and kinetic interaction of macrosteps are investigated based on the results of a general analysis of kinematic waves for a one-dimensional model of a macroscopically curved vicinal surface during growth from the vapor phase. An algorithm is proposed and numerical solutions of the evolution equation with periodic boundary conditions that describe the kinematic wave are obtained. It is shown that nonlinear effects under conditions of competition between dispersion and dissipative processes can lead to the appearance of shock waves. The analytical solution for a monotonic shock wave is interpreted for the conditions of a real experiment.

Key words: nonlinear waves, vicinal surface, density of elementary steps, low-dimensional structures, nanodots, evolution equations, numerical methods

ЗМІСТ

Вступ……..... 8

Розділ 1. Низькорозмірні структури як основа наноматеріалів для потреб сучасної енергетики

1.1 Класифікація нанорозмірних систем ……..... 10

1.2 Основні фізичні властивості та застосування наноматеріалів …….. 18

1.3 Фізичні способи та технології отримання нанорозмірних систем 25

1.4. Спонтанне утворення та упорядкування нанокристалів в умовах гетеро-епітаксії …….. 29

Розділ 2. Нелінійні хвилі та рівняння, що описують їх еволюцію

2.1 Кінематичні хвилі. Ударні хвилі ……... 34

2.2. Ударні хвилі на віцинальній поверхні кристалу……..... 42

2.3 Числові методи розв'язання нелінійних рівнянь……..... 47

2.3.1 Методи розв'язання диференційних рівнянь……..……... 47

2.3.2 Різницеві схеми вирішення крайових задач (Задача Коші)….. 51

2.4 Розв'язання рівняння Кортевега-де Фріза……..... 57

2.4.1 Постановка задачі.……. 57

2.4.2 Різницеві схеми та результати…….. 60

Розділ 3. Нелінійні хвилі густини сходинок на віцинальній поверхні NaCl

3.1 Побудова рівняння КдФ- Бюргерса для умов росту кристалу з парової фази…… 63

3.2 Розв'язання рівняння Кортевега де Фріза - Бюргерса …..... 69

3.3 Інтерпретація аналітичного розв'язку рівняння для кінематичної хвилі елементарних сходинок на віцинальній поверхні (100) NaCl…….. 76

Висновок……... 86

Список використаних джерел

Додаток

Вступ

Фізика низьковимірних структур - найактуальніший та найбільш динамічно прогресивний розділ фізики твердого тіла у наш час. Перспективність цієї області полягає у тому, що ми продовжуємо спостерігати відкриття категорично нових квантових пристроїв та інших систем для опто- і наноелектроніки, інформаційних технологій, енергетики тощо. Відкриття таких явищ як квантовий та дробовий ефект Холла в електронному газі (двовимірний), у той же час, вінгеровскька кристалізація квазідвумірних дірок та електронів, виявлення блохівських осциляцій з високою частотою, а також композитних квазічастинок та збуджень електронів із дробовими зарядами, стало результатом того, що низьковимірні системи почали активно вивчатися науковцями. Низьковимірні системи - це структури, які складаються перш за все з квантових ям, квантових точок та ниток. Ці системи також є основою напівпровідникових лазерів на деяких гетеропереходах. Три Нобелівські премії в області фізики були отримані за досягнення в галузі низькорозмірних структур, а саме: у 1985 р. був відкритий квантовий ефект Холла, у 1998 році був відкритий дробовий квантовий ефект Холла, 2000 р. - премія була надана за досягнення у сфері сучасних інформаційних технологій.

Зонна інженерія, а також інженерія хвильових функцій стали можливі лише завдяки розвитку низькорозмірних структур. Такі наноструктури як надрешітки, квантові нитки, точки, ями та контакти, а також атомні кластери дають можливість виготовлення штучно створених матеріалів із властивостями, які відомі наперед.

Немає сумнівів, що ті елементи, які використовуються у різних ниькорозмірних структурах являють собою найперспективнішу базу для електронної техніки майбутнього. Але у той же час, квантовомеханічна основа квазічастинок починає проявлятися при роботі у нанометровому

масштабі у твердому тілі. У цій ситуації різноманітні квантові ефекти мають величезний вплив на функціонування приладів та загалом у фізичних процессах. Рівень розвитку певних технологій, які спроможні сформувати наноструктури необхідної конфігурації, а також характерні способи діагностики властивостей цих наноструктур (контроль виготовлення та управління) визначають результат створення та розробки наноструктур найрізноманітнішого призначення. Згідно прогнозів, XXI століття буде визначено тим, як швидко будуть розвиватися нанотехнології, як у свій час атомна енергія, лазер и транзистор зіграли свою визначну роль у вигляді XX століття.

РОЗДІЛ 1. НИЗЬКОРОЗМІРНІ СТРУКТУРИ ЯК ОСНОВА НАНОМАТЕРІАЛІВ ДЛЯ ПОТРЕБ СУЧАСНОЇ ЕНЕРГЕТИКИ

Нанокристали, такі як квантові точки та квантові дроти, викликають інтенсивний науково-технічний інтерес. Їх електронні структури можуть бути адаптовані за розмірами та формами, що призводить до появи нових застосувань: від інфрачервоних детекторів, лазера, фотолюмінесценції до сонячних батарей. Наноструктури утворюються за рахунок зменшення структури, що виникає внаслідок утримання її електронів. Зменшення одного виміру призведе до квантової ями, двох вимірів до квантового дроту та, зрештою, трьох вимірів до квантової точки. Зміщення цих структур може розвиватися двома різними методами: підходами зверху вниз та знизу вгору. Після розробки наноструктур їх можна використовувати в багатьох міжгалузевих програмах, таких як енергетика, медицина, біологія та обчислення.

1.1 Класифікація нанорозмірних систем

Основним параметром напівпровідникового матеріалу є значення ширини забороненої зони Eg. Здатність варіювати енергетичний зазор матеріалу визначає можливості зміни його електронних і оптичних властивостей. Протягом другої половини XX ст. необхідної величини енергетичного зазору досягали ускладненням компонентного складу напівпровідникових матеріалів: від бінарних сполук груп AIIIBV, AIIBVI, AIVBVI і ін. до трьох- і чотирьох-компонентних твердих розчинів. [1]

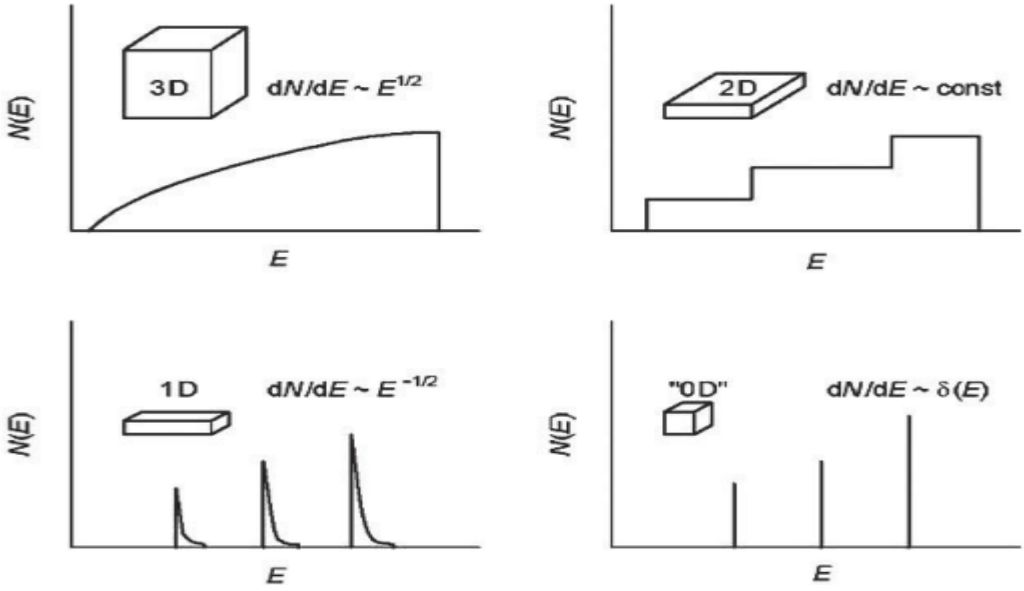


Рис. 1.1 Залежність спектра щільності електронних станів від просторової розмірності напівпровідника: 3D-, 2D-, 1D-, 0D-

Згодом на зміну цій парадигмі прийшли низькорозмірні матеріали, в яких зміна енергетичного зазору здійснюється за рахунок просторового обмеження матеріалу в одному, двох або одночасно трьох просторових напрямках - відповідно 2D- (квантові ями), 1D- (квантові нитки) і 0D-матеріали (квантові точки) (Рис. 1.1).

Аналогічно тому, як хвилі різної фізичної природи мають строго певну частоту, обмеження руху носіїв заряду призводить до дискретності енергетичного спектра - рівнів дозволених станів. При критичному зменшенні розмірів напівпровідника в одному просторовому напрямку безперервний спектр щільності електронних станів стає ступінчастим (Рис. 1.1). Втрачаючи другий ступінь свободи, напівпровідник проявляє шпилястий спектр щільності станів. Нарешті, матеріал, обмежений в трьох просторових напрямках, в силу подібності спектрів щільності станів зі спектром окремого атома (набір δ-функцій), називають штучним атомом або квантовою точкою.

Найбільш значущі наноструктури, необхідні для проектування наноелектронних пристроїв, - це квантові ями, квантові дроти та квантові точки. Вони є основними будівельними блоками наноелектронних пристроїв.

Коли розмір матеріалів зменшується від великого розміру, скажімо, сантиметрів до меншого розміру - ста нанометрів, ми можемо спостерігати зміни його властивостей.

Якщо один вимір зменшується до нано-діапазону, а інші два виміри залишаються великими, то ми отримуємо структуру, відому як квантова яма. Це зменшення розмірності призводить до обмеження електронів, що також відноситься до кількості ступенів свободи в імпульсі електронів. Якщо дві розмірності зменшити (обмежити), а одну залишити великою, отримана структура називається квантовим дротом. Останній випадок - зменшення або обмеження у всіх трьох вимірах називається квантовою точкою, у таблиці 1.1 показано отримання матеріалів. [2]

Табл.1.1 Обмеження структури

Структура	Обмеженння
Об’ємна	0
Квантова яма	1 (z)
Квантовий дріт	2 (x,y)
Квантова точка	3 (x,y,z)

Слово "квантовий" асоціюється з цими трьома типами наноструктур, оскільки зміни властивостей виникають внаслідок квантово-механічної природи фізики в надмалому інтервалі. На Рис. 1.2 показані різні випадки зменшення.

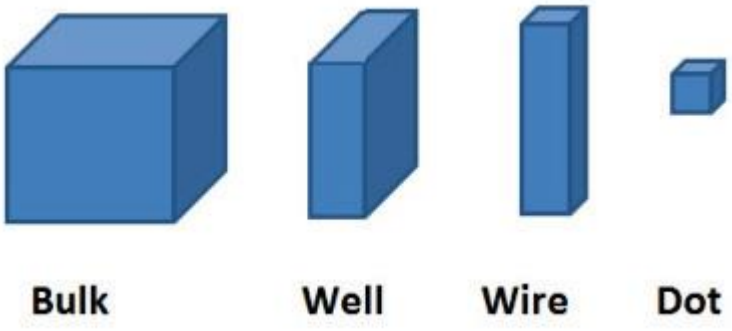


Рис. 1.2 Види наноструктур

У квантових точках носії заряду обмежені у всіх трьох вимірах, у яких електрони мають дискретний атомно-енергетичний спектр. Квантові дроти утворюються, коли два розміри системи обмежені. У квантовій ямі носії заряду (електрони та дірки) обмежені для руху в площині і вільні в двовимірному русі. Також рівень енергії одного з квантових чисел змінюється від безперервного до дискретного. У порівнянні з об'ємними напівпровідниками, квантова яма має більш високу щільність електронних станів біля країв діапазонів провідності та валентності, а тому більш висока концентрація носіїв може сприяти випромінюванню смуги на краю [3]. Чим більше число вимірювань обмежене, тим більше дискретних енергетичних рівнів можна виявити, іншими словами, рух носія сильно обмежений у заданому вимірі. Щільність електронних станів в об'ємі, 2D, 1D та 0D напівпровідниковій структурі показана на рис. 1.3. 0D структури мають дуже чітко визначені та квантовані рівні енергії. Ефект квантового обмеження, що відповідає розміру наноструктури, можна оцінити за допомогою простої моделі наближення ефективної маси.

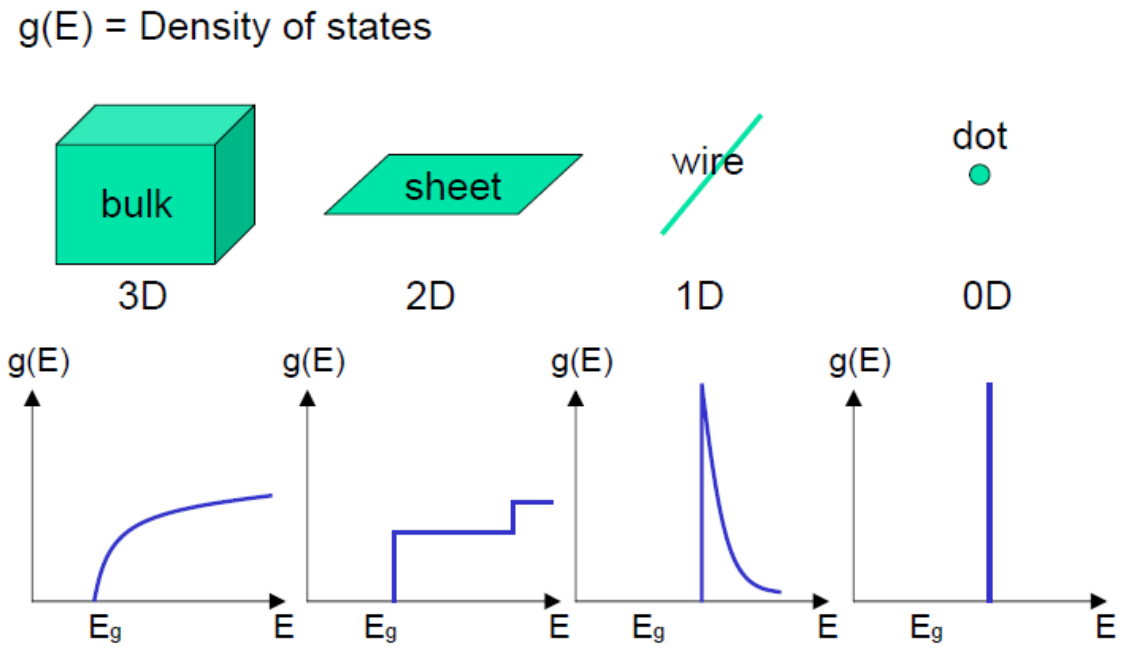


Рис. 1.3. Щільність електронних станів напівпровідника як функція розмірності. Оптичний спектр поглинання приблизно пропорційний щільності станів.

Цей метод дозволяє передбачити обмежені рівні енергії наноструктур, вирішивши рівняння Шредінгера, припускаючи, що бар'єри мають нескінченний обмежений потенціал. Розв'язком "ефективних мас" рівняння Шредінгера для електронів, обмежених квантовою точкою або нанокристалом, квантовим дротом і квантовою ямою, є

Квантова точка або нанокристали:

$$E_{n,m,l} = \frac{\pi^2 h}{2m^*}\left(\frac{n^2}{L_z^2} + \frac{m^2}{L_y^2} + \frac{l^2}{L_x^2}\right),\ \psi = \phi(z)\,\phi(y)\,\phi(x) \qquad (1.1)$$

Квантовий дріт:

$$E_{n,m,l} = \frac{\pi^2 h^2}{2m^*}\left(\frac{n^2}{L_z^2} + \frac{m^2}{L_y^2}\right) + \frac{h^2 k_x^2}{2m^*},\ \psi = \phi(z)\,\phi(y)\,exp(ik_x x) \qquad (1.2)$$

Квантова яма:

$$E_{n,m,l} = \frac{\pi^2 h^2 n^2}{2m^* L_z^2} + \frac{h^2}{2m^*}\left(k_x^2 + k_y^2\right) + \frac{h^2 k_x^2}{2m^*},\ \psi = \phi(z)\, exp\left(ik_x + k_y y\right) \quad (1.3)$$

де n, m, l = 1, 2… числа квантових обмежень, Lx, Ly і Lz - обмежуючі розміри, $\exp(ik_x + ik_y)$- хвильова функція, що описує електронний рух у напрямку x та y, подібно до вільного електрона хвильової функції.

Термін «квантова точка» був введений в 1988 р Рідом [4] при розгляді фізичних властивостей структур, які можуть бути отримані при літографії з високою роздільною здатністю. Хоча з позицій геометрії термін «квантова точка» не є прийнятним, так як частка має кінцевий розмір і тривимірну структуру, у фізиці, де поширене модельне поняття «матеріальна точка», він допустимий, і одночасно відображає дуже малі розміри частки і квантову природу зміни її енергетичного спектра.

Таким чином, квантова точка (КТ) - частка напівпровідникового матеріалу, що володіє залежним від розміру енергетичним спектром. Типові розміри КТ становлять 1 - 10 нм, проте ці межі істотно залежать від електронних властивостей матеріалу і структури частки [1].

Термін "квантова яма" відноситься до напівпровідникової області, яка вирощується з меншою енергією, так що вона діє як пастка для електронів і дірок (електрони і дірки тяжіють до їх найменших можливих енергетичних положень). Їх називають «квантовими» ямами, оскільки ці напівпровідникові області мають товщину лише декількох атомних шарів. Це, в свою чергу, означає, що їх властивості регулюються квантовою механікою, допускаючи лише конкретні енергії та проміжки смуг. Оскільки структури

квантових ям дуже тонкі, їх можна змінити дуже легко. Іншими словами, квантові ями - реальна реалізація проблеми "частинка в коробці"; вони виступають потенційними лунками для носіїв заряду і, як правило, експериментально реалізуються епітаксіальним ростом послідовності надтонких шарів, що складаються з напівпровідних матеріалів різного складу [5].

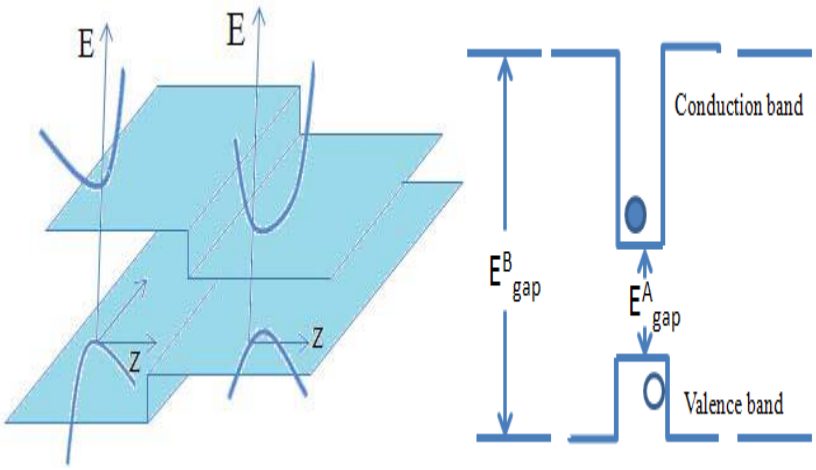


Рис. 1.4.

Два різнопровідні напівпровідники з різними зазорами можуть бути з'єднані для утворення гетеропереходу. Згідно з [5], розрив в провідності або у валентній смузі може бути використаний для формування потенційної ями. Якщо тонкий шар матеріалу "A", що звужує вузьку смугу, прошитий між двома шарами з ширшими смугами розриву матеріалу "B", вони утворюють подвійну гетероперехідність. Якщо шар 'A' досить тонкий для прояву квантових властивостей, то таке вирівнювання смуг називається одиночною квантовою ямою.

До складу гетероструктури можуть бути включені додаткові напівпровідникові шари, наприклад, ступінчаста або асиметрична квантова яма може бути сформована включенням сплаву між матеріалами A і B. Можуть утворюватися ще більш складні структури, такі як симетрична або асиметрична подвійна квантова яма

і множинні квантові ями або надрешітки. Різниця між останніми - це ступінь взаємодії між квантовими ямами. Зокрема, множинна квантова яма виявляє властивості колекції ізольованих одиночних квантових ям, тоді як у надрешітці взаємодіють квантові ями.

Мотивація впровадження все складніших структур - це спроба адаптувати електронні та оптичні властивості цих матеріалів для експлуатації в пристроях. Усі структури, проілюстровані до цього часу, були прикладами систем типу I. У цьому типі смуга одного матеріалу повністю розміщена у межах матеріалу ширшої смуги. Наслідком цього є те, що будь-які електрони чи дірки потрапляють у квантові ями, що знаходяться в одному шарі матеріалу. Таким чином, обидва типи носія заряду локалізовані в одній області простору, що забезпечує ефективну (швидку) рекомбінацію. У системах типу II смуги матеріалів, скажімо, "A" і "C", вирівнюються таким чином, що квантові ями, що утворюються в смугах провідності і валентності, знаходяться в різних матеріалах. Це призводить до обмеження електронів і дірок у різних шарах напівпровідника. Наслідком цього є довгий час рекомбінації електронів і дірок [5].

До недавнього часу фахівці у сфері електронних приладів в своїх розрахункових дослідженнях використовували виключно закони класичної фізики. Більш того, рух мікроскопічних електронів схожий на рух класичних тіл у процесорі комп'ютера. Завдяки зменшенню розмірів діодів, транзисторів ті інших елементів вдається підвищити щільність розміщення транзисторів.

У той же час науковці вже здобули великий досвід в розробці приладів, дія яких базується на квантовомеханічних принципах. Виявляється, що якщо атоми викладати з точністю до декількох шарів, то можливо створювати та контролювати властивості таких

елементів як штучні кристали, атоми і молекули. Вище наведені напівпровідникові структури мають розміри в кілька нанометрів або кілька десятків ангстрем. Електрони в таких структурах поводять себе як квантові об'єкти попри те, що розміри справжніх атомів не були перевищені. Виділяють 3 основні типи мікроструктур: квантові ями, дроти і квантові точки (штучні атоми). Вивчення цих структур надзвичайно важливе для майбутнього фізики та електронної інженерії.

1.2 Основні фізичні властивості та застосування наноматеріалів

Квантові ями в оптоелектронних пристроях

Напівпровідникові квантові ями - чудові приклади квантової механіки в дії. Знижена розмірність призвела до значного прогресу як у розумінні 2D фізики, так і в прикладній науці оптоелектроніці. Оптоелектронні пристрої, вбудовані в квантові ями, в кінцевому рахунку беруть найкраще як з електронного, так і з оптичного світу. Новий фізичний механізм у таких тонкошарових структурах квантових ям робить справжні пристрої з дуже привабливими експлуатаційними характеристиками та вражаючими врожаями. Особливі властивості дуже тонких шарів випливають із відносно простої квантової механічної проблеми обмеження частинок у коробці чи ямі. Тут ми зробимо опис декількох видів оптоелектронних пристроїв, вбудованих у структуру квантових ям, а саме світлодіодний та лазерний діод, квантово-каскадний лазер, детектори, такі як міждіапазонний детектор та сонячні батареї.

Світлодіоди та лазерні діоди

Квантові ями знайшли широке застосування в застосуванні світлодіодів та лазерних діодів протягом ряду років [6]. Для цього є три основні причини. По-перше, здатність контролювати енергію квантового утримання забезпечує додаткову свободу для проектування довжини хвилі випромінювання. По-друге, зміна щільності станів та посилення перекриття електрон-дірки призводять до кращих показників. Нарешті, можливість вирощування напружених шарів високої оптичної якості значно збільшує різноманітність комбінацій матеріалів, які можна використовувати, забезпечуючи тим самим набагато більшу гнучкість у дизайні активних областей. Значна частина ранньої роботи зосереджена на поєднаннях з гратчастими сполуками, такими як GaAs / AlGaAs [7].

Лазери GaAs / AlGaAs на основі квантових ям, що працюють близько 800 нм, стали стандартом для застосування в лазерних принтерах та компакт-дисках. Крім того, розробка масивів високої потужності відкрила нові програми для перекачування твердотільних лазерів, таких як Nd: YAG. Інші типи гратчастих комбінацій можуть бути використані для переміщення довжини хвилі у видиму область спектру, а також далі в інфрачервону. Квантові ями на основі четвертинного сплаву (AlyGa1 − y) x In1 − xP використовуються для лазерних показників червоного випромінювання, тоді як Ga0.47ln 0.53As квантові ями та варіанти, що містять Al, використовуються для важливих довжин хвиль телекомунікацій 1300 нм та 1550 нм.

Основне застосування квантових ям - у поверхнево-випромінювальних лазерах з вертикальною порожниною (VCSEL - vertical-cavity surface-emitting lasers) [8]. На рис.1.5 наведена принципова схема типового VCSEL на основі GaAs. Пристрій містить активну квантово-ямну-область, вставлену між двома розподіленими дзеркалами відбивача Брегга, що складаються з чвертьхвильових стеків AlGaAs, виконаних зі змінних шарів високого та

низького показника заломлення. Структура вирощується на GaAs підкладці n-типу, і дзеркала належним чином леговані p-типом, щоб утворити p – n-перехід. Електрони та дірки вводяться в активну область під прямим зміщенням, де вони захоплюються квантовими ямами та виробляють посилення при довжині хвилі λ. Квантові ями містяться у прозорому шарі товщиною $\lambda / 2n_0$, де n_0 - середній показник заломлення активної області.

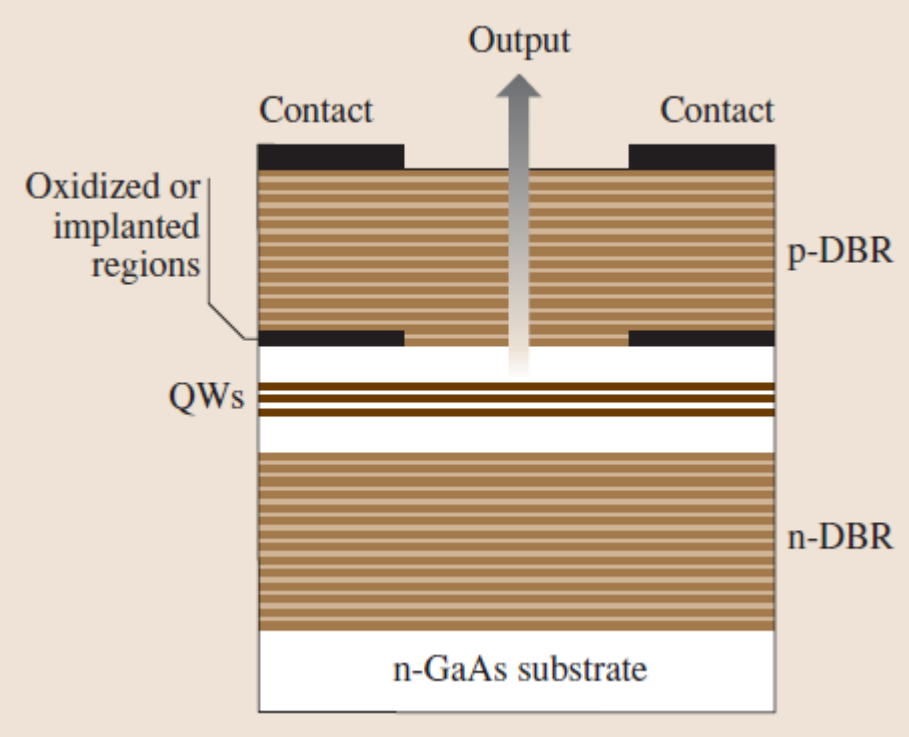


Рис. 1.5. Принципова схема VCSEL.

Квантові ями, що містять підсилювальне середовище, розміщуються в центрі порожнини, утвореної між двома розподіленими дзеркалами відбивача Брегга. Окислені або протонно-імплантовані області забезпечують бічне обмеження як для поточного, так і для оптичного режиму.

Світло на проектній довжині хвилі відбивається туди-сюди через посилювальне середовище і додається, утворюючи лазерний резонатор. Окислені або протонно-імплантовані області забезпечують бічне обмеження як поточного, так і оптичного режиму. Звичайні структури VCSEL, вирощені на субстратах GaAs, працюють в діапазоні довжин хвиль 700 - 1100 нм [8].

Деякі з цих структур є решітчастими, але інші не є, зокрема, пристрої більшої довжини хвилі, які містять напружені InGaAs квантові ями. Зараз велика робота зосереджена на розширенні діапазону експлуатації на довжину хвиль телекомунікацій 1300 нм та 1550 нм. Резонаторні структури, такі як VCSEL, показані на рис. 4, можуть експлуатуватися нижче порогу як резонансні світлодіодні порожнини. Наявність порожнини зменшує ширину лінії випромінювання, а отже, збільшує інтенсивність на піковій довжині хвилі. Крім того, більш вузька ширина лінії призводить до збільшення пропускної здатності системи зв'язку з волокон через зменшену хроматичну дисперсію.

Квантові каскадні лазери

Принципи інфрачервоного випромінювання за допомогою міждіапазонних переходів: електрони спочатку повинні бути введені у верхній обмежений електронний рівень. Потім можуть відбуватися радіаційні переходи до нижчих обмежених станів з різними паритетами. Випромінювання зазвичай дуже слабке, оскільки радіаційні переходи повинні конкурувати з дуже швидким нерадіаційним розпадом фононної емісії. Однак, коли щільність електронів у верхньому рівні досить велика, може відбутися інверсія популяції, що дасть швидке стимульоване випромінювання та подальшу роботу лазера. Це діюча концепція квантового каскадного лазера [9], вперше продемонстрована в 1994 р. Лазер працював при 4,2 мкм при температурі до 90 К. Хоча пороговий струм для оригінального пристрою був високим, прогрес у цій галузі був дуже швидким. Квантові структури ям, які використовуються в квантово-каскадних лазерах, дуже складні і часто містять сотні різних шарів. Інверсія популяції досягається резонансним тунелюванням між n = 1 основним станом однієї активної області та n = 3 верхнім рівнем лазера наступного. Основні принципи цього процесу були озвучені ще в 1971 році, але для демонстрації ідей у лабораторії знадобилося

більше 20 років. Активні області містять асиметричні зв'язані квантові ями, а лазерний перехід відбувається між n = 3 і n = 2 станами пов'язаної системи.

Розмежування рівнів n = 2 і n = 1 ретельно розроблено так, щоб збігатися з оптичною енергією фонона, так що відбувається дуже швидке розслаблення до основного стану і система поводиться як чотирирівневий лазер. Цей останній момент має вирішальне значення, оскільки час життя верхнього рівня лазера дуже короткий, а інверсія популяції можлива лише тоді, коли час життя нижнього рівня лазера коротший, ніж у верхнього. Довжина хвилі може бути змінена детальним дизайном сполученої квантово-ямної активної області. Дуже цікавою подією стала демонстрація квантово-каскадного лазера, що працює в дальній інфрачервоній спектральній області при 87 мкм [10]. Попередні роботи в цій спектральній області характеризувалися великими втратами через поглинання вільних носіїв та труднощами, пов'язаними з проектуванням оптичних хвилеводів. Пристрій працював до 50 К і постачав 2 мВт. Ці пристрої довгої хвилі потрібні для застосувань в частотному діапазоні ТГц, які з'єднуються між оптикою довгих хвиль і електронікою високої частоти.

Сонячні елементи з квантовими ямами

Фотодетектори для видимих та близьких до інфрачервоних спектральних областей, як правило, виготовляються із кремнію чи III-V сплавів, таких як GaInAs. Оскільки ці пристрої працюють дуже добре, головне застосування для квантово-ямних фотодетекторів знаходиться в інфрачервоній спектральній області та для особливо вимогливих застосувань, таких як фотодетектор ISB та сонячні батареї.

Потужність, що генерується сонячною батареєю, визначається добутком фотоструму та напругою на діоді. У звичайних сонячних елементах обидва ці параметри визначаються зазором, що використовується в напівпровідниках.

Великі фотоструми віддають перевагу матеріалам вузьких щілин, оскільки напівпровідники поглинають лише фотони з енергією, більшою за проміжок смуги, а матеріали вузького зазору, таким чином, поглинають більшу частку спектра сонячної енергії [11].

Однак найбільша напруга відкритого ланцюга, яка може генеруватися в p-n пристрої, - це вбудована напруга, яка збільшується із зазором у смузі напівпровідника. Прилади з квантовими ямами можуть давати кращі показники, ніж їх основні аналоги, оскільки вони дозволяють роздільну оптимізацію факторів генерації струму та напруги. Це пояснюється тим, що вбудована напруга визначається в першу чергу шириною забороненої зони бар'єрних областей, тоді як край поглинання визначається зазором смуги квантових ям. Сонячна клітина квантової ями складається з p-i-n діода з квантовими лунками, розташованими у внутрішній області пристрою.

Схематичне зображення комірки показано на рис. 1.6 (а), тоді як на рис. 1.6 (б) показана пов'язана діаграма діапазону разом з основними шляхами генерації фотографій та шляхами рекомбінації в бар'єрному та квантово-ямних шарах.

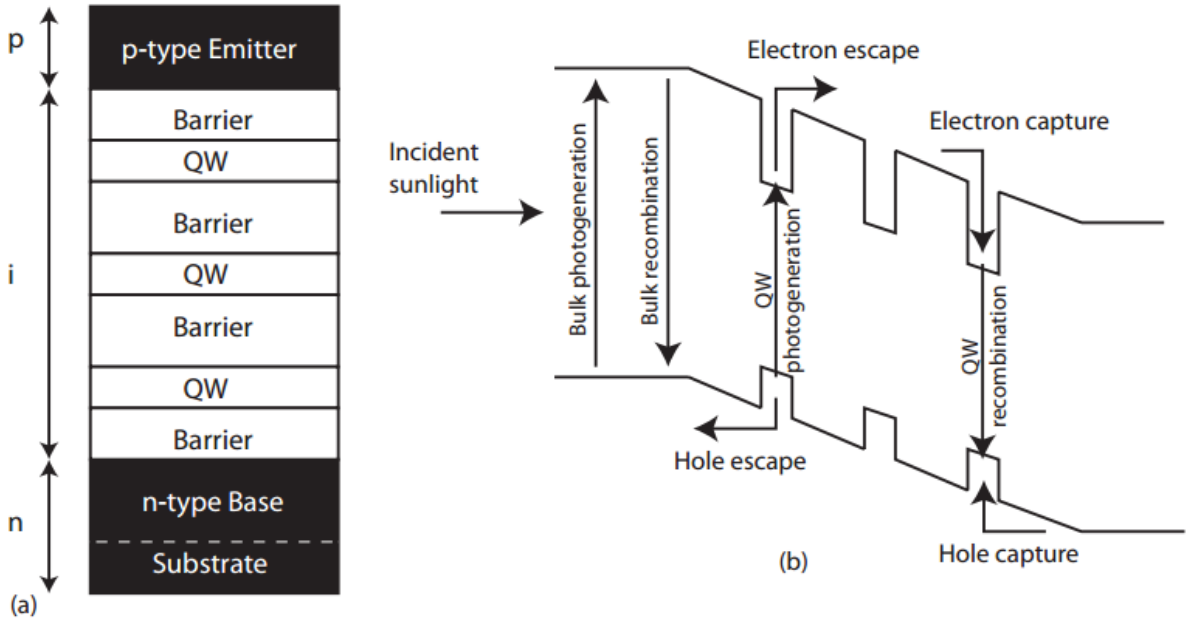


Рис.1.6: (a) Квантова структура p-i-n шару. (b) Діаграма діапазону для квантової ями p-i-n сонячної комірки, що показує процеси фотогенерації та рекомбінації разом із шляхами захоплення та втечі носія.

Світло, яке поглинається в квантових ямах, призводить до генерації електронно-діркових пар у обмеженій ямі. Перш ніж ці електрони і дірки можуть сприяти фотоструму, носії повинні вийти з квантової ями за допомогою комбінації термічних і тунельних процесів, схематично показаних на рис. 1.6, разом із відповідним процесом захоплення носія. Вихід носія є ефективним за умови наявності достатньої теплової енергії та поперечного електричного поля достатньо сильним. У багатьох сонячних елементах з квантовими ямами при кімнатній температурі процеси захоплення носіїв та виходу з носіїв протікають швидше, ніж конкуруючі процеси рекомбінації, що призводить до врівноваження в діапазоні провідності та валентності між носіями в бар'єрному та квантово-ямних шарах. З практичної точки зору це означає, що можна припустити, що всі фотогенеровані носії в неглибокій квантовій ямі виходять і сприяють фотоструму.

Міждіапазонні фотодетектори

Інфрачервоні детектори потрібні для застосувань у галузі захисту, нічного бачення, астрономії, теплового картографування, газового зондування та моніторингу забруднення. Квантові міждіапазонні фотоприймачі сконструйовані таким чином, щоб розділення енергії обмежених рівнів відповідало вибраній довжині хвилі. Основною перевагою таких детекторів в порівнянні зі звичайним підходом, що використовує вузькосмугові напівпровідники, є використання зрілих технологій на основі GaA. Крім того, ефективність виявлення повинна бути високою внаслідок великої сили генератора, що випливає з паралельної кривизни в плоских дисперсіях для станів в межах однієї смуги. Однак технічні проблеми виникають із умови, що електричне поле світла має поляризуватися вздовж напрямку росту (z). Для оптимального з'єднання світла було застосовано різні підходи, наприклад використання скошених країв, решіток або випадкових відбивачів.

1.3 Фізичні способи та технології отримання нанорозмірних систем

Утворення квантових ям - це досить нескладний процес. У ході процесу між двома шарами матеріалу, які мають більш широку заборонену зону, поміщається тонкий шар з вузькою забороненою зоною [12]. Як результат, електрон замикається в одному напрямку, що в свою чергу спонукає до квантування енергії поперечного руху. Рух цих електронів у двох інших напрямках буде вільним. Завдяки цьому електронний газ в квантовій ямі перетворюється на двовимірний. Аналогічно готується структура, що містить квантовий бар'єр. Для цієї процедури тонкий шар напівпровідника з широкою забороненою зоною поміщається між 2 напівпровідниками з вузькою забороненою зоною (рис. 1.7).

Метод молекулярно-променевої епітаксії надає можливість отримати найефективніші результати з точки зору приготування квантових структур. Цей метод полягає в тому, що струмінь атомів або молекул необхідно спрямувати на ретельно очищену підкладку, і це в свою чергу формує тонкий шар напівпровідника. Декілька потоків атомів, отриманих за допомогою випаровування речовини з підігрітих джерел, водночас летять на підкладку. Вирощування структури здійснюється у вакуумі, задля того щоб уникнути забруднення. Цей процес контролюється комп'ютером. Монокристалічні шари з товщиною у кілька періодів решітки вирощуються завдяки методу молекулярно – променевої епітаксії [12].

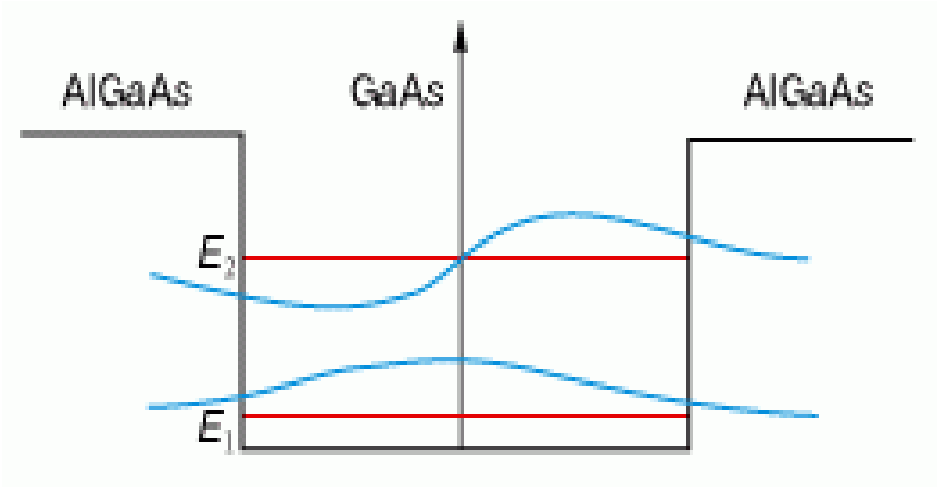


Рис.1.7. Квантова яма, яка сформована між 2 напівпровідниками, що володіють більш широкою забороненою зоною

Періоди кристалічних решіток для двох шарів, які знаходяться поруч та мають відмінну хімічну складову, повинні бути майже ідентичними. У цьому випадку ми спостерігаємо ситуацію, коли шари рухаються один за одним, а отже кристалічні решітки не мають дефектів. Ми можемо отримати чітко окреслений кордон між двома сусідніми шарами завдяки цьому методу, а

також гладку поверхню на атомному рівні. Квантові структури можливо вирощувати з найрізноманітніших матеріалів. Напівпровідник GaAs (арсенід галію) та твердий розчин AlxGa1-xAs – найефективніша пара, що застосовується для вирощування квантових ям. Величина x в основному змінюється в діапазоні від 0,15 до 0,35 та характеризує ту частину атомів галію, яка заміщена атомами алюмінію. Ширина забороненої зони в GaAs становить 1,5 еВ, у той же час в AlxGa1-xAs вона збільшується з ростом x. Наприклад, якщо x = 1, то ширина забороненої зони дорівнює 2,2 еВ. [12]

Необхідною умовою для вирощування квантової ями є зміна хімічної складової атомів (які прямують на зростаючий шар) у момент росту. Перш за все необхідно виростити шар напівпровідника з широкою забороненою зоною (AlxGa1-xAs), після цього шар з вузькою забороненою зоною матеріалу GaAs і, насамкінець, знову шар AlxGa1-xAs. Відомо також, що в районі, де потенційна енергія більша за повну, можливо також виявити електрон. Слід зазначити, що таку картину спостерігати можливо тільки в квантовій фізиці.

Стандартну квантову яму можна намалювати фотолітографією або, можливо, електронно-променевою літографією, і гравірувати, щоб залишити вільно стоячу смужку з матеріалу квантової ями. Останні можуть або не можуть бути заповнені заростанням бар'єрного матеріалу (у цьому випадку Ga (1-x) AlxAs). Будь-які носії заряду все ще обмежені вздовж осі росту гетероструктури (z-), як вони були у квантовій ямі, але крім того (за умови, що смужка досить вузька) вони тепер обмежені в додатковому напрямку, або x-, або y-, залежно від літографії. [5]

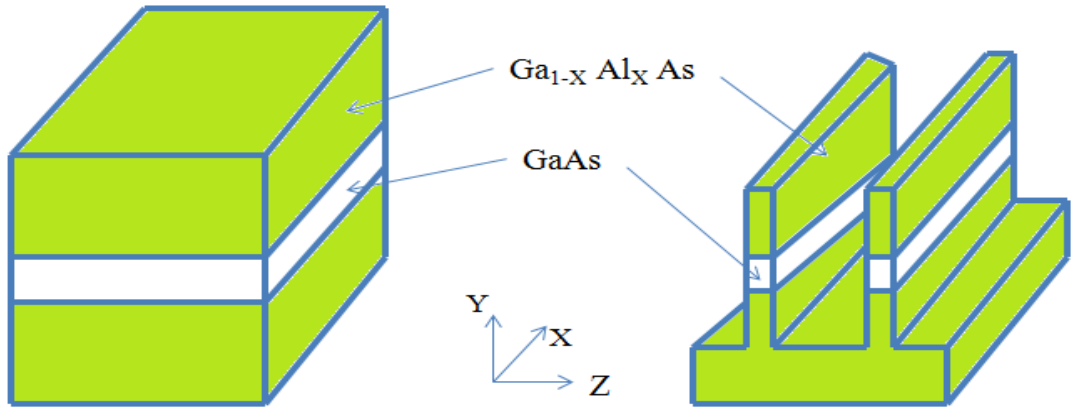


Рис. 1.8. Стандартна квантова яма

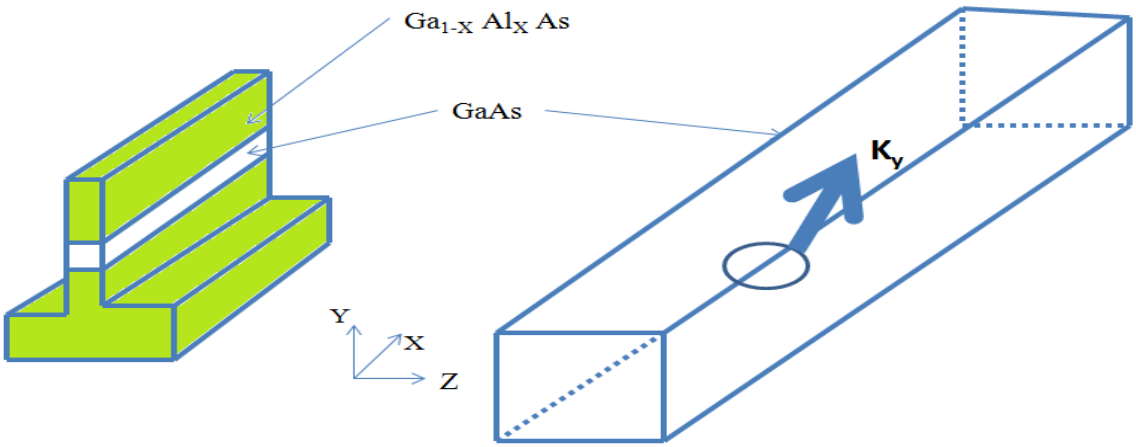


Рис. 1.9. Розгорнутий вигляд одного квантового дроту, де електрон може вільно рухатися лише в одному напрямку, в даному випадку по осі y.

Квантові точки можуть знову утворюватися шляхом подальшої літографії [5] та гравіювання, наприклад, якщо квантовий зразок ями зграviювався, щоб залишити стовпи, а не дроти, то носій заряду може обмежитися у всіх трьох вимірах, як показано на рис. 1.10:

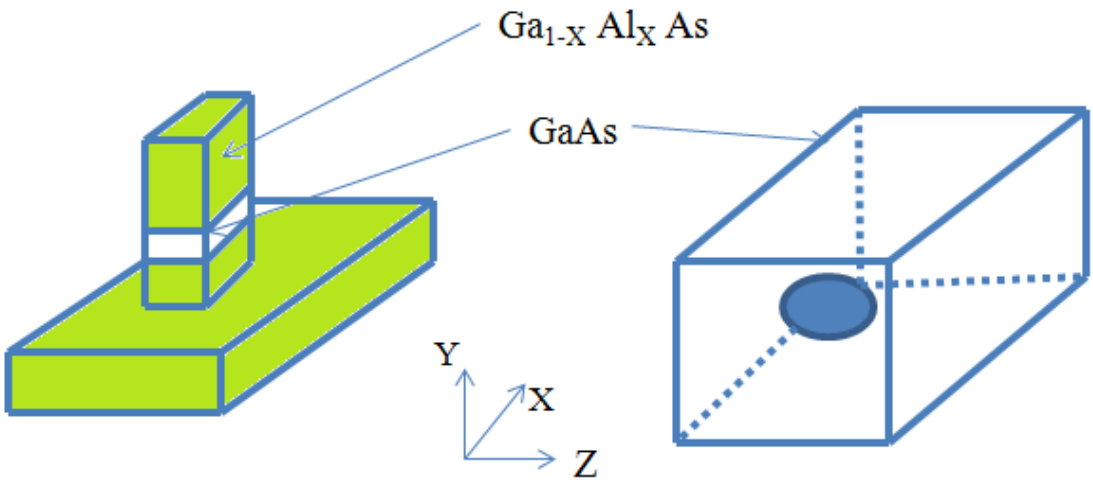


Рис. 1.10. Носій заряду обмежений у трьох вимірах

1.4. Спонтанне утворення та упорядкування нанокристалів в умовах гетеро-епітаксії

Необхідно контролювати розмір, форму і однорідність самоорганізованих нанокристалів, щоб використовувати їх в реальних пристроях. Спосіб досягнення цього в епітаксійних масивах нанокристалів полягає в управлінні об'ємними напруженнями і/або поверхневими напруженнями. У роботі [13] повідомляється про додатковий і принципово відмінний механізм відбору розмірів нанокристалів CoSi2 заснованому на кращій реакції атомів Co з атомами Si-зламів на східчастих пучках на віцинальній поверхні Si (111), де середній розмір нанокристалів силіциду і відстань між нанокристалами уздовж межі визначається висотою сходинкового згустку. Ці результати можуть мати важливі наслідки для літографічного виготовлення упорядкованих функціональних ансамблів наноструктур.

Проте, здатність металевих і метал-силіцидних наноструктур самоорганізовуватися в компактну або витягнуту форму в поєднанні з їх

кулонівською блоковою температурою (RT) і характеристиками кулонівських сходинок, робить їх потенційними компонентами в одноелектронних пристроях. Однак використання їх в реальних пристроях вимагає контролю над розміром, формою і однорідністю нанокристалів в масиві, а також для деяких додатків, таких як QCAs, у сфері просторового планування для потрібних зразків. Можливо, однією з найбільш складних проблем самовпорядкування і самоорганізації є запобігання дозрівання Оствальда, де більші нанокристали ростуть за рахунок менших через ефект Гіббса-Томсона, який, як правило, зменшує кордон вільної енергії за рахунок більш високого тиску пара навколо нього. Проблема в тому, що цей процес створює небажано широкі, негативно спотворені розподіли розмірів нанокристалів.

Гомоепітаксіальні острови за своєю природою нестабільні проти оствальдского дозрівання. Проте гетероепітаксійні можуть бути стабілізовані різницею тензорів поверхневих напружень між ними і підкладкою, що призводить до силових мультиполів на кордоні між ними і опору дозріванню, навіть якщо неузгодженість дуже мала. Якщо присутня досить висока (щонайменше, кілька відсотків) неузгодженість, зростання може бути обмеженим, оскільки бар'єр для приєднання адатома до зростаючого нанокристалу через натягнуту стрічку в області контакту нанокристалів-підкладки масштабується розміром острівців. У будь-якому випадку розмір і відстань поділу гетероепітаксійних нанокристалів визначаються пружними взаємодіями.

Нанокристали взаємодіють один з одним через підкладку, і це залежне від деформації відштовхування контролює середню відстань між ними . Краще, хоча і складніше, не тільки фіксувати розмір нанокристалів, а й середню відстань і порядок поділу, - це зростання напружених багатошарових нанокристалічних надрешіток, де нанокристали взаємодіють як в площині, так і поза площиною з сусідами в сусідніх шарах. Отже, можуть мати місце

вертикальні і просторово-корельовані нанокристали. В цьому випадку основну роль грають пружні взаємодії.

Однак, існує зовсім інший механізм вибору розмірів нанокристалів, де основну роль грає локалізована кінетика реакції Co-Si на ступінчастій поверхні Si, а не пружність, з атомами Si для реакції з адатомами Co, що поставляються майже виключно ступенями в пучках («ешелонах сходинок»), що призводить до близького збігу між розміром так званих нанокристалів CoSi2 і їх батьківською висотою пучка. Крім того, очевидна кореляція між цими розмірами нанокристалів і їх відповідними відстанями поділу уздовж батьківської межі згрупованих ступенів була очевидною, що вказувало на ступінь одновимірного самоорганізованого упорядкування.

Використовувана в роботі [13] поверхня кремнію була віцинальним Si (111), де прямі і періодичні ступінчасті або східчасто-згруповані структури можуть добре контролюватися шляхом зміни величини і напрямку струму нагріву під час підготовчих високотемпературних спалахів [14]. (Крім того, уникають нанокристалічного подовження CoSi2 на підкладках Si (001).)

В роботі [14] повідомляється про новий механізм вибору розміру самоорганізованих гетероепітаксійних нанокристалів, який не грунтується на пружних взаємодіях. Кінетика реакції Co-Si на ступінчастій поверхні Si (111) така, що обложений кобальт реагує переважно з атомами підкладки Si на згрупованих сходинках (а не на терасах). Саме по собі явище ступеневої поверхні не є чимось новим і дивним, воно просто залежить від дифузійної довжини відкладень щодо ширини тераси. Однак новою частиною тут є той факт, що середній розмір сформованих нанокристалів визначається висотою їх батьківського згустку.

Крім того, обраний середній розмір згустку впливає на середню відстань між нанокристалами і нанокристалами уздовж згустку (приблизно 1:2 відповідно), створюючи одномірні періодичні структури. Точна причина

спостерігаємої кореляції між вимірами в даний час невідома. Одним з можливих кандидатів є відштовхування, викликане невідповідністю (але у той же час, декорування ступені Si більш незбіжними острівцями Ge (~4.2%) не призвело до чітко визначених відстаней поділу уздовж краю). Однак за відсутності кращого пояснення, впорядкування по перекриваючих полях деформації залишається ймовірним варіантом.

На терасах також спостерігається локалізована слабша просторова кореляція між положеннями нанокристалів, з чого випливає, що шляхом подальшого зменшення ширини тераси (до ступеня, порівнянної з поділом нанокристали-нанокристали), можна створювати впорядковані двовимірні масиви нанокристалів. У той час як подвійна симетрія поверхні Si (001) була перенесена на епітаксіальні наноструктури CoSi2, викликаючи анізотропне подовження, сам факт подібної ступінчатої еволюції наноструктури вказує на загальну природу цього механізму, який, отже, повинен бути активним в будь-якій системі, в якій атоми субстратів є невід'ємною частиною зростаючих складних острівців. Ці результати можуть бути важливі для нелітографічного виготовлення функціональних наноструктур від низу до верху.

Отже, один з перспективних способів отримання низькорозмірних структур - це формування їх на макросходинах, які утворюються на віцинальних поверхнях в нерівномірних умовах. Саме тому актуальною є тема дослідження нелінійних хвиль густини сходинок на віцинальних поверхнях кристалів з метою отримання дальнього порядку.

РОЗДІЛ 2. НЕЛІНІЙНІ ХВИЛІ ТА РІВНЯННЯ, ЩО ОПИСУЮТЬ ЇХ ЕВОЛЮЦІЮ

Походження механізму розповсюдження хвилі буває різноманітним. У ході деформацій в середовищі виникають сили пружності, які у свою чергу утворюють міцні зв'язки між поверхнями в середовищі. Якщо спостерігається зміщення частинок середовища в одному напрямку з хвилею, то ми говоримо про так звані поздовжні хвилі. У той же час, при перпендикулярному зміщенню частинок до напрямку поширення хвилі ми можемо спостерігати поперечні хвилі. Ці процеси характерні для твердого пружного середовища. У таких середовищах як рідина або газ ми не спостерігаємо сили опору до зрушення, і завдяки цьому тільки поздовжні хвилі мають можливість розповсюджуватися. Добре відомий приклад поздовжніх хвиль в природі - звукові хвилі, які виникають через пружність повітря. У природі ми можемо спостерігати поздовжні хвилі у вигляді звукових хвиль, причиною виявлення яких є пружність повітря.

На прикладі електромагнітних хвиль ми бачимо коливання полів (електричного та магнітного), що у свою чергу передає збудження. Слід зазначити, що характерною відзнакою електромагнітних хвиль є можливість поширення в порожнечі.

Електромагнітні хвилі оточують нас усюди в повсякденному житті. Один із найяскравіших прикладів – це радіохвилі, які є загальновідомими (радіо та телебачення). Якщо розглянути інший діапазон частот, то на думку одразу спадає таке електромагнітне явище як світло, яке дає нам можливість бачити навколишнє середовище.

2.1 Кінематичні хвилі. Ударні хвилі

Кінематичні хвилі

У багатьох задачах про поширення хвиль розглядається безперервний розподіл будь-якої речовини або деякого середовища і (в одномірному випадку) можна визначити щільність Q (x, t) на одиницю довжини і витрати q (x, t) в одиницю часу. Далі можна визначити швидкість течії v (x, t) рівністю:

$$v = \frac{q}{p}$$

Припускаючи, що досліджувана речовина (або стан середовища) зберігається, можна вважати, що швидкість зміни її повної кількості в будь-якому інтервалі $x_1 > x > x_2$, повинна компенсуватися сумарним потоком через перерізи x_1 і x_2, тобто [15]:

$$\frac{d}{dt}\int_{x_1}^{x_2} p\,(x,t)dx + q\left(x_1,t\right) - q\left(x_2,t\right) = 0 \qquad (2.1)$$

Якщо Q (x, t) має безперервні похідні, то можна перейти до ліміту $x_1 \to x_2$, і отримати закон збереження:

$$\frac{dp}{dt} + \frac{dq}{dx} = 0 \qquad (2.2)$$

Найпростіша задача про поширення хвиль отримується в тому випадку, коли, виходячи з теоретичних або емпіричних міркувань, можна постулювати (у першому наближенні) деякий функціональний зв'язок між q і p. Якщо цей зв'язок записати у вигляді:

$$q = Q\,(p) \qquad (2.3)$$

то рівняння (2.2) і (2.3) утворюють повну систему. Зробивши підстановку, отримаємо

$$p_t + c(p)p_x = 0 \quad (2.4)$$

де $c(p) = Q'(p)$ (2.5)

Наявність перекидання змушує нас переглянути як математичне припущення про існування похідних функцій p і q, так і фізичне припущення про те, що співвідношення q = Q(p) є хорошим наближенням.

Ударні хвилі

Коли настає перекидання, виникає питання про справедливість припущення q=Q(p) (формула (2.3)), а також припущення про існування похідних функцій p і q, що входять в рівняння (2.2). Але вважаючи, що припущення про безперервність справедливе, ми все ще наполягаємо на виконанні закону збереження (2.1) [15].

Розглянемо спочатку математичне питання про допустимість розривів. Що стосується рівняння (2.1), то воно не суперечить наявності розривів першого роду функцій p і q: всі вирази в (2.1) при цьому зберігають сенс. Чи накладає рівняння (2.1) будь-які обмеження? Для того щоб відповісти на це питання, припустимо наявність розриву при x = s (t) і виберемо x_1 і x_2, так, що x_1> s (t) > x_2. Припустимо, що q і їх перші похідні неперервні при > s (t) і s (t) > ex, а при x (t) мають кінцеві межі зверху і знизу. Тоді рівняння (2.1) можна переписати наступним чином:

$$q\left(x_2,t\right)-q\left(x_1,t\right)=\frac{d}{dt}\int_{x_2}^{s(t)}p(x,t)dx+\frac{d}{dt}\int_{s(t)}^{x_1}p(x,t)dx=$$

$$=p(s^-,t)\dot{s}-p(s^+,t)\dot{s}+\int_{x_2}^{s(t)}p_t(x,t)dx+\int_{s(t)}^{x_1}p_t(x,t)dx$$

де $p(s^-,t), p(s^+,t)$- граничні значення p(x, t) при x→s(t) знизу і зверху відповідно, а $\dot{s}=\frac{ds}{dt}$. Оскільки p_t обмежена в кожному з інтервалів, то при $x_1 \to s^+$, $x_2 \to s^-$ інтеграли прагнуть до нуля. Отож,

$$q(s^-,t)-q(s^+,t)=\{p(s^-,t)-p(s^+,t)\}\dot{s}$$

Домовимося позначати індексом 1 величини перед розривом і індексом 2 за ним. Тоді, якщо U - швидкість поширення розриву, тобто $\dot{s}$, то

$$q_2-q_1=U\left(p_2-p_1\right) \quad (2.6)$$

Цю умову можна також переписати у вигляді:

$$-U[p]+[q]=0 \quad (2.7)$$

де дужки позначають стрибок даної величини. У цій формі ясно видно відповідність між отриманою умовою на лінії розриву і диференціальним рівнянням (2.11), а саме відповідність

$$\frac{d}{\partial t}\leftrightarrow -U[\ ],\quad \frac{\partial}{\partial x}\leftrightarrow[\ ] \quad (2.8)$$

Тепер ми можемо розширити поняття рішення рівняння (2.1) і допустити розриви зазначеного виду. В будь-якій області безперервності рішення рівняння (2.2) залишиться справедливим і допущення 2.3 можна зберегти.

Оскільки в області безперервності q=Q(p) на сторонах будь-якого розриву $q_2 = Q(p_2)$ і $q_1 = Q(p_1)$і умову (2.6) можна переписати так:

$$U = \frac{Q(p_2) - Q(p_1)}{p_2 - p_1} \quad (2.9)$$

Тепер завдання зводиться до введення в рішення розривів таким чином, щоб виконувалося рівність (2.9) і не виникали багатозначні рішення.

У найпростішому випадку маємо:

$p = p_1,\ c = c(p_1) = c_1,\ x > 0,$

$p = p_2,\ c = c(p_2) = c_2,\ x < 0,$

Для обох випадків t=0, де $c_2 > c_1$. Тепер ми можемо побудувати однозначне рішення у вигляді розриву, що рухається зі швидкістю (2.18):

$p = p_1,\ x > Ut,$

$p = p_2,\ x < Ut,$

Звичайним способом виведення умови на розриві є розгляд цього рішення в системі відліку, в якій розрив нерухомий. Відносні витрати при цьому рівні $q_1 - Up_1$ і $q_2 - Up_2$. Закон збереження можна відразу записати у вигляді:

$q_1 - Up_1 = q_2 - Up_2$, звідки і випливає (2.6).

Рівняння в виді часткових похідних є ключовою математичною моделлю, яка зазвичай використовується для того, щоб описати розповсюдження хвиль у тих чи інших середовищах. В цих рівняннях невідомі - це похідні характеристик конкретного явища. Причому оскільки

характеристика залежить від відстані до джерела і від часу, то і в рівнянні використовуються не одна, а дві (а іноді і більше) похідні. Одна або декілька похідних можуть бути присутні у рівнянні, тому що певна характеристика може залежати наприклад від часу та відстані до джерела у той самий час. Просте хвильове рівняння зазвичай записується у наступному вигляді:

$$u_{tt} = c^2 u_{xx} \quad (2.10)$$

Хвильова характеристика u рівнянні наведеному вище залежить від просторової координати x і часу t. u_{tt} - характеризує похідну другого порядку від u за часом, а u_{xx}- позначає другу похідну від u по змінній x. Хвиля в струні - це аналог плоскої одновимірної хвилі, яка описується рівнянням (2.10)

Рішення хвильового рівняння має наступний вигляд:

$$u(x,t) = f(x - ct) + g(x + ct) \quad (2.11)$$

Тут функції f і g знаходять з початкових умов для u. Рівняння містить другу похідну від u по t, а отже для нього треба задавати 2 початкові умови: u при t = 0 та похідну u_t при t = 0 [16].

У рівняння (2.10) спостерігається дуже цікава особливість, яка має назву принцип суперпозиції (сумма рішень рівняння є знову таки вирішенням цього рівняння). Ця властивість характеризує лінійність описаного явища. Для нелінійних моделей це властивість не виконується, що призводить до суттєвих відмінностей протікання процесів у відповідних моделях. У випадку нелінійних моделей принцип суперпозиції не виконується, що у свою чергу витікає у різний хід процесів у поданих моделях.

Підстановкою в (2.10) можна побачити, що залежність

$$u(x, t) = a\cos(kx - wt) \quad (2.12)$$

в якій a, k і ω - const, і, при ω = ± k є рішенням рівняння (2.10). Тут a - амплітуда, k - хвильове число, а ω - частота. Це рішення являє собою монохроматичну хвилю, яка розповсюджується в середовищі з такою фазовою швидкістю

$$c_p = \frac{w}{k} \qquad (2.13)$$

Зазвичай ми маємо справу не з монохроматичною хвилею (коли кожна хвиля має свою швидкість), а з пакетом хвиль, де групова швидкість характеризує швидкість його розповсюдження:

$$c_g = \frac{dw}{dk} \qquad (2.14)$$

Групова швидкість знаходиться через похідну від частоти w за хвильовим числом k.

Аналіз хвиль на воді проводиться завдяки рівняння гідродинаміки, які є нелінійними. Завдяки цьому факту ми характеризуємо і самі хвилі на воді як нелінійні. Хвилі вважаються лінійними, коли ми спостерігаємо малі амплітуди (граничний випадок). Попри це, лінійне рівняння не описує поширення звуку у всіх випадках.

Відокремлена хвиля була відкрита Расселом, який наполягав, що вона займає ключове місце у різноманітних явищах природи. Перш за все, Рассел помітив, що хвиля рухається з постійною швидкістю і не змінює свою форму[17]. Потім він зауважив, що швидкість хвилі C залежить від глибини каналу h та висоти хвилі a:

$$C = \sqrt{g(a+h)} \qquad (2.15)$$

де g - прискорення вільного падіння, а також $a < h$.

Більш того, Рассел наголосив на тому, що:

- одна велика хвиля може розпадатися на кілька менших
- хвилі піднесення можна побачити експериментально

Але одну найважливішу деталь Рассел не помітив.

По-перше, аналітична формула, яка показувала піднесення вільної поверхні на воді, та розрахунки швидкості розповсюдження хвилі були представлені в роботах Буссінеска (1872 рік) та Релея (1876 рік).

Датські вчені Д.Д. Кортевег та Г. де Фріз вивели рівняння, яке описує довгі хвилі на воді. Вчені вирішили використовувати рівняння гідродинаміки та розглянули відхилення u (x, t) від положення рівноваги водної поверхні. Згідно їх припущенням, безрозмірні параметри мають наступні умови при розповсюдженні хвилі:

$$\varepsilon = \frac{a}{h} \ll 1, \qquad \delta = \frac{h}{l} \ll 1 \qquad (2.16)$$

де a - амплітуда хвилі, h - глибина басейну, в якому досліджуються хвилі, l - довжина хвилі.

Вони розглядали випадок, коли глибина басейну була набагато більшою ніж амплітуда хвиль, але та ж глибина була набагато меншою ніж довжина хвилі. Саме завдяки цьому наближенню вчені розглядали випадок довгих хвиль.

Вигляд рівняння, яке було отримано Кортевегом і де Фрізом:

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0 \qquad (2,17)$$

де u (x, t) - це відхилення від положення рівноваги водної поверхні. Це рівняння є рівнянням в часткових похідних. Це рівняння має назву “рівняння в

часткових похідних". Якщо ми знайдемо залежність x і t від u та отримаємо тотожність після підстановки, то вважається що ми знайшли рішення цього рівняння.

Хвильове рішення рівняння (2.17) виражається завдяки еліптичній функції, яка має назву "функція Якобі". Якщо виконуються певні умови, то функція Якобі трансформується в гіперболічний секанс і ми маємо наступне рішення:

$$u(x,t) = 2k^2 ch^{-2}\left\{k\left(x - 4k^2 t\right) + \varphi_0\right\} \qquad (2.18)$$

де φ_0 - довільна константа.

Саме рішення (2.18) рівняння (2.17) є відокремленою хвилею, яку спостерігав Рассел в 1834 році. Біжуча хвиля - рішення (2.18) рівняння $\xi = x - c_0 t$ Кортевега-де Фріза. А отже, рівняння Кортевега-де Фріза у порівнянні з рішенням Д'Аламбера (2.11) утворює хвилю, що розповсюджується тільки в одному напрямку. Рівняння також враховує більш складі ефекти внаслідок наявності додаткових членів uu_x і u_{xxx}.

У ході виведення рівняння використовувались малі параметри (2.15) ε і δ, що у свою чергу говорить про те, що воно є наближеним. Одна частина вирішення Д'Аламбера отримується завдяки нехтуванню впливу малих параметрів (спрямувати до 0).

Отже, отримане вище рішення рівняння КдФ є корректним виключно у певний час та на певній відстані від області формування хвилі. Більш строга модель необхідна для опису нелінійних хвиль на величезних відстанях. Рівняння КдФ розглядається у вигляді наближеної математичної моделі, але не як точний інструмент для опису процесу розповсюдження хвиль на воді. Неважко перевірити, що рівняння КдФ характеризує нелінійні хвилі завдяки тому, що не виконується принцип суперпозиції.

2.2. Ударні хвилі на віцинальній поверхні кристалу

Швидкість переміщення ешелону елементарних сходинок залежить від відстані між ними, тобто від кількості сходинок, які перетинають одиничний інтервал, паралельний осі x і перпендикулярний до фронту сходинок [18]. Цю кількість природно називати густиною сходинок, яка, взагалі кажучи, залежить від координати x і часу t. Позначимо густину сходинок через p (x, t). Якщо a - висота кожної із сходинок, то ap є тангенс кута нахилу макоскопічної межі утвореної ступенями. Швидкість ступенів: $v = v(|p|)$

Оскільки має місце збереження числа ступенів, щільність ρ (x, t) повинна задовольняти рівнянню

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(pv) = 0 \quad (2.19)$$

Потік ступенів $J = pv$, помножений на висоту сходинки, являє собою нормальну швидкість росту (розчинення, плавлення) тієї межі, на якій розглядаються ступені. Чим більше щільність p ступенів в ешелоні, тим менше швидкість їх руху і $\frac{\partial^2 J}{\partial p^2} < 0$. Функція p(x, t) постійна при таких значеннях x і t, які лежать на характеристиках рівняння (2.19), тобто задовольняють умові $\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial J(p)}{\partial p}$ для відповідних величин p.

Нехай в початковий момент часу t = 0 розподіл щільності ступенів $p_0(x)$ має характер, зображений на рис. 2.1, б. Побудувавши з кожної точки осі x характеристики з нахилами $\left.\frac{\partial J}{\partial p}\right|_{p_0(x)}$, отримаємо що в моменті часу τ_+ (рис. 2.1, а) виникає розрив щільності ступенів, тобто на профілі поверхні кристала з'явиться кутова точка A (рис. 2.1 г). Швидкість V_t переміщення, виникшого таким чином розриву щільності елементарних ступенів (тобто кінематичної, або «ударної» хвиль ступенів) визначиться з умов збереження

числа ступенів в точці розриву щільності, яка рухається вздовж осі x за законом x=X(t):

$$p_1\left(v_1 - X_t'\right) = p_2\left(v_2 - X_t'\right)$$

тобто

$$V_t = X_t' = \frac{J_2 - J_1}{p_2 - p_1} \quad (2.20)$$

деи $J\ 〚_1〛 = J(p_1)$, $J\ 〚_2〛 = J(p_2)$, а p_1і p_2- значення щільності ступенів по обидві сторони від розриву, тобто розділений на висоту ступенів стрибок тангенса кута нахилу поверхні кристала в кутовій точці А (рис. 2.1, г). Утворення «ударних хвиль» ступенів вперше досліджувалося Франком, а також Кабрерою і Вермілі.

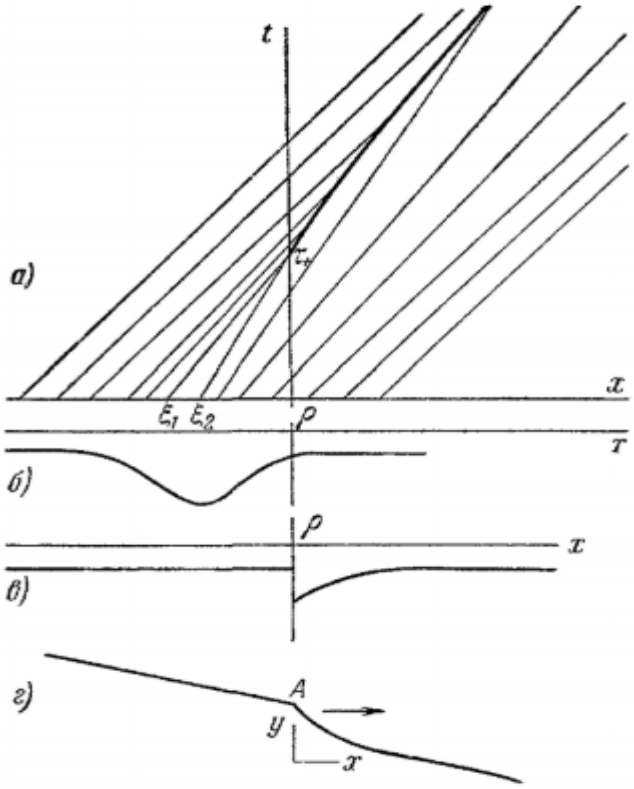


Рис. 2.1. Виникнення (а) розриву щільності ступенів (x=0, рис в) з початкового обурення $p_0(x)$ (б). г - профіль поверхні.

Дослідимо більш докладно, аналогічно загальній теорії, виникнення розриву щільності і еволюцію його величини з часом. Для визначення розглянемо випадок зростання: v > 0, p < 0. Початкову форму збурення густини задамо у вигляді функції $p_0(x)$такої, що $p_0(\pm\infty) = p_\infty = const$ (рис. 2.1, б). Таке збурення викликається, наприклад, коротко-тимчасовим зростанням потужності гвинтової дислокації, що є джерелом аналізованого ешелону ступенів. Зростання потужності може бути наслідком випадкового збільшення пересичення або розпаду спіральної ступені. Збурення іншого типу будуть розглянуті нижче.

Оскільки значення щільності ступенів постійне уздовж кожної характеристики $x = \xi + \left.\frac{\partial J}{\partial p}\right|_{p_0(\xi)}(t)$ (ξ- значення x при t=0 і $p = p_0$), розрив виникає через час τ_+ , який визначається умовою

$$\tau_+ = -\frac{\xi_2 - \xi_1}{J'\left(p_0\left(\xi_2\right)\right) - J'\left(p_0\left(\xi_1\right)\right)} \sim -\frac{1}{J''\left(p_\infty\right)\dfrac{dp_0}{dx}}$$

де $J' = \frac{\partial J}{\partial p}, \quad J'' = \frac{\partial^2 J}{\partial p^2}$

а ξ_1і ξ_2-деякі залежні від форми початкового збурення значення x, різниця між якими по порядку величини дорівнює напівширині збуреної області. Чим більше перенасичення, чим різкіше початкове збурення, і чим більше анізотропія нормальної швидкості росту, тим швидше виникають розриви густин.

З'ясуємо тепер закон руху розриву щільності і зміну величини розриву з часом. Оскільки нас цікавить поведінка вже виникшого розриву щільності, можна вважати, що він має вигляд, зображений на рис. 24в: при x<0 $p_0(x) = p_\infty$, і рахувати в (6,2) .

Використаємо замість t змінну ξ, яка представляє собою x-координату того значення щільності ступенів при t=0, яке в момент t визначає розрив щільності в ударній хвилі, тобто:

$$X(\xi) = \xi + J'\left(p_0(\xi)\right)t \quad (2.21)$$

За допомогою рівнянь 22.2 і 22.3 отримуємо диференційне рівняння для $X(\xi)$і вирішуючи його при початковій умові X(0)=0, знаходимо:

$$X(\xi) = \xi + exp\left(\int \Phi(\xi)d\xi\right)\int_0^{\xi} F(\xi)exp\left(-\int \Phi d\xi\right)d\xi \quad (2.22)$$

де

$$\Phi(\xi) = \frac{J_0 - J_\infty}{p_0 - p_\infty}\frac{J'' p_0'}{J'}\left[\frac{J_0 - J_\infty}{p_0 - p_\infty} - J_0'\right]^{-1},$$

$$F(\xi) = J_0'\left[\frac{J_0 - J_\infty}{p_0 - p_\infty} - J_0'\right]^{-1}$$

Рівняння 2.21 і 2.22 визначають $t(\xi)$та $X(\xi)$, тобто в параметричному виді точне рішення поставленої задачі. Якщо величина $p_0(\xi) - p_\infty$, то з точністю до членів порядку $p_0(\xi) - p_\infty$:

$$X(\xi) = \xi - \frac{2J'_\infty}{J''_\infty\left(p_0 - p_\infty\right)^2}\int_0^{\xi}\left(p_0 - p_\infty\right)d\xi \quad (2.23)$$

При $t \to \infty$мі отримаємо $p_0 \to p_\infty$, а $X'_t \to J'_\infty$, тобто ударна хвиля прагне згладитися і перейти в однородний ешелон ступенів.

Коли t і ξ приймають великі значення, інтегрування в 2.23 можна поширити до нескінченності і за допомогою 2.21 отримати асимптотичну формулу

$$p_0 - p_\infty \sim \frac{1}{\sqrt{t}}\left(-\frac{2}{J''_\infty}\int_0^{\infty}\left(p_0 - p_\infty\right)d\xi\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.24)$$

з якої можна зауважити, що величина розриву щільності падає з часом $\sim t^{\frac{1}{2}}$. Кінематична хвиля елементарних ступенів повинна візуально сприйматися як розмита макроскопічна ступінь.

Отже, збурення щільності елементарних ступенів призводить до виникнення "ударної хвилі" і вже після цього розсмоктується. Відповідні часи релаксації, а також шлях, яке проходить збурення до свого зникнення, виявляються достатніми для спостереження розглянутих явищ.

Досі досліджувалися збурення щільності, що мають характер, зображений на рис. 2.1, г. Однак вони - не єдино можливі.

Розрив щільності виникає при найрізноманітніших збуреннях, аби в результаті цих збурень на поверхні виникали ділянки, де щільність ступенів за абсолютною величиною зростає.

У кінематичної хвилі є стрибок щільності елементарних ступенів, тобто (макроскопічно) є кутова точка на профілі поверхні, причому нахили ліворуч і праворуч від неї змінюються в часі і не збігаються з тими, які диктуються анізотропією поверхневої енергії. Протиріччя не вийде, якщо у вираженні для J врахувати поверхневу енергію:

$$J = J\left(p, p'_x\right) = p\nu(|p|)\left[1 + \frac{\Omega}{a\left(\mu_c - \mu_{ко}\right)} \frac{\partial^2 F}{\partial p^2} \frac{\partial p}{\partial x}\right]$$

де μ_cі $\mu_{ко}$ - хімічні потенціали середовища і кристала. При малій щільності р елементарних ступенів енергетична взаємодія між ступенями практично відсутня, $\frac{\partial^2 F}{\partial p^2}$ мале і роль поверхневої енергії не істотна. Тому при досить слабких відхиленнях поверхні кристала від орієнтації щільної упаковки енергетичними ефектами можна знехтувати і розглядати лише кінематичні явища, як це і було зроблено. Всі результати очевидно, переносяться на випадок розчинення (випаровування і т. д.) кристалів.

Отже, на поверхні кристалів можливе існування макроскопічних сходинок двох типів. Це, по-перше істинні сходинки, стійкість при виникненні ударних хвиль яких визначається анізотропією поверхневої енергії і які мають стаціонарну форму і постійну по відношенню до часу швидкість. По-друге, макросходинки, що представляють собою слабкі кінематичні хвилі густини елементарних сходинок. Кінематичні хвилі з великими значеннями щільності повинні переходити в ступені першого типу. У цьому може складатися один з механізмів формування «справжніх» сходинок.

2.3 Числові методи розв'язання нелінійних рівнянь

2.3.1 Методи розв'язання диференційних рівнянь

У багатьох наукових і інженерних задачах потрібно вирішити рівняння виду

$$f(x) = 0 \quad (2.25)$$

де $f(x)$- задана безперервна нелінійна функція.

В аналітичному вигляді вдається знайти рішення тільки для найпростіших рівнянь. У більшості ж випадків доводиться розв'язувати рівняння виду (2.25) чисельними методами. Чисельне рішення рівняння (2.25) зазвичай проводять в два етапи. На першому етапі знаходять такі інтервали зміни змінної x, де розташований тільки один корінь. Це завдання зазвичай вирішується графічно. На другому етапі проводять уточнення окремих коренів. Для цього використовують різні методи, частина яких буде розглянута нижче.

Метод половинного ділення

Нехай на відрізку [a, b] розташований один корінь рівняння (2.25), який необхідно уточнити з похибкою ε (рис. 2.2).

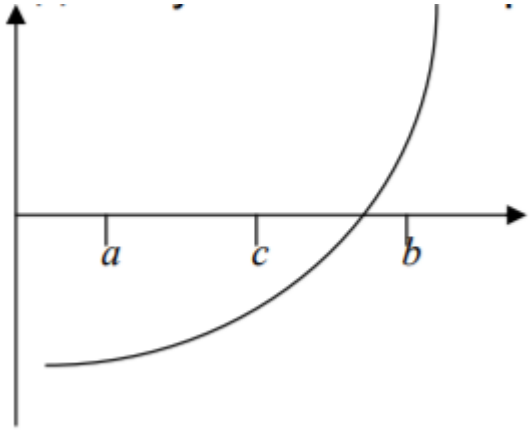


Рис. 2.2. Метод половинного ділення

Оскільки відомо, що на інтервалі [a, b] рівняння має тільки один корінь і f (x) - безперервна функція, то виконується умова f (a) f (b) <0.

Суть методу половинного ділення полягає в наступному. Знаходимо середину відрізка [a, b]: $c = \frac{a+b}{2}$ і знаходимо f (c).

Тепер необхідно зробити вибір, яку з двох частин відрізка взяти для подальшого уточнення кореня. Оскільки f (x) - безперервна функція, то корінь буде знаходитися в тій половині відрізка, на кінцях якого f (x) має різні знаки. На рис. 2.2 це буде відрізок [c, b], тобто для чергового кроку уточнення точку a переміщуємо в середину відрізка c і продовжуємо процес ділення як з початковим інтервалом [a, b]. Ітераційний процес продовжується, поки інтервал [a, b] не стане менше заданої похибки ε.

До переваг даного методу слід віднести високу надійність і простоту. Недоліком його є той факт, що необхідно попередньо знайти дві точки, значення функції в яких мають різні знаки.

Метод простої ітерації

Від вихідного рівняння (3.1) перейдемо до еквівалентного рівняння

$$x = \varphi\,(x) \quad (2.25)$$

де $\varphi(x) = f(x) + x$. Нехай є деяке початкове наближення до кореня $x = x_0$. Підставимо його в праву частину рівняння (3.2) і отримаємо нове наближення: $x_1 = \varphi(x_0)$, потім аналогічним чином отримаємо $x_2 = \varphi(x_1)$ і т.д.,

$$x_{k+1} = \varphi(x_k) \quad (2.26)$$

Вважаємо, що корінь знайдений, якщо $|x_{k+1} - x_k| \leq \varepsilon$, де ε -задана похибка.

Необхідно встановити за яких умов ітераційний процес (2.26) буде сходитися до кореня рівняння $x^\star$. Нехай в ітераційній формулі (2.26)

$$x_k = x^* + \varepsilon_k,\ x_{k+1} = x^* + \varepsilon_{k+1}$$

де ε_k і ε_{k+1}- відхилення k-го і (k +1)-го наближень від кореня.

Якщо процес уточнення здійснюється поблизу кореня $x^\star$, то функцію $\varphi(x)$ можна наближено представити двома членами ряду Тейлора. Тоді (2.26) набуде вигляду:

$$x^* + \varepsilon_{k+1} \cong \varphi(x^*) + \varepsilon_k \varphi'(x^*) \quad (2.27)$$

Оскільки $x^\star$ - корінь рівняння, то $x^\star = \varphi(x^\star)$ і, отже,

$$\varepsilon_{k+1} = \varepsilon_k \varphi'(x^*)$$

Для того, щоб ітераційний процес був збіжним, необхідним є дотримання умови $\varepsilon_{k+1} < \varepsilon_k$, що можливо лише коли $|\varphi'(x) < 1|$.

Метод Ньютона (дотичних)

Метод Ньютона або дотичних полягає в наступному. Якщо x_n є деяке наближення до кореня x^*, а $f(x)$ має безперервну похідну, то рівняння (2.25) можна перетворити в такий спосіб:

$$0 = f(x^*) = f(x_n + (x - x_n)) = f(x_n) + (x^* - x_n) f'(\xi) \quad (2.28)$$

Наближено замінюючи $f'(\xi)$ на значення в відомій точці x_n, отримаємо такий ітераційний процес:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (2.29)$$

Геометрично цей процес означає заміну на кожній ітерації графіка $y = f(x)$ дотичної до нього.

Метод Ньютона можна розглядати як окремий випадок методу простих ітерацій. Нехай $\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$. Тоді $\varphi'(x) = \frac{ff''}{(f')^2}$. Отже, тому що $\varphi'(x) < 1$, ітераційний процес сходиться при виконанні умови $|f''| < (f')^2$.

Недоліком методу Ньютона є необхідність обчислення похідної на кожному кроці ітераційного процесу.

Метод хорд (січних)

Щоб уникнути обчислення похідної, метод Ньютона можна спростити, якщо зробити заміну похідної $f'(x_n)$ в алгоритмі Ньютона (2.29) на її неточне наближене значення, яке має вигляд відношення зростання функції $\Delta f = f(x_n) - f(x_{n-1})$ до зростання аргументу $\Delta x = x_n - x_{n-1}$. Отже, ми отримуємо вираз, який характерний для методу січних:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n) \quad (2.30)$$

Заданням 2 початкових наближень x_0 і x_1, ми розпочинаємо ітераційний процес. Згодом за формулою (2.30) обчислюємо нові наближення до кореня до виконання умови $|x_{n+1} - x_n| \le \varepsilon$, де ε - задана похибка обчислення.

Зауважимо, що метод Ньютона має швидшу збіжність, але у той же час метод січних не зобов'язує обчислювати похідні.

2.3.2 Різницеві схеми вирішення крайових задач (Задача Коші)

Всі методи розв'язання задачі Коші для ОДУ діляться на точні, наближені і чисельні. Точні методи дозволяють виразити рішення рівняння через елементарні функції або за допомогою квадратур від елементарних функцій. Клас задач, рішення яких можна отримати точними методами, порівняно вузьке.

При використанні наближених методів рішення задачі Коші для ОДУ визначається як межа деякої послідовності функцій. При цьому кожен член послідовності виражається через елементарні функції або квадратури від елементарних функцій. До наближених методів відносяться: розкладання рішення в узагальнений статечної ряд, метод Чаплигіна, метод Пікара, Канторовича і ін.. Наближені методи зручно застосовувати тоді, коли вдається знайти явне вираження для коефіцієнтів ряду.

Чисельні методи застосовні до широких класів рівнянь і систем рівнянь. Ці методи стали одним з основних способів вирішення практичних завдань для ОДУ. Вони призначені для обчислення наближених (а іноді точних) значень часних рішень задач на заздалегідь обраній сітці аргументу x - кінцевій множині точок $x_i \in [a,b]$, $i = \overline{1,N}$. У підсумку шукане рішення отримується у вигляді таблиці.

Отже, нехай потрібно знаходити значення $y_i \approx y(x_i)$, $i = \overline{1, N}$, наближеного рішення задачі в вузлах сітки:

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = b \quad (2.31)$$

Більшість числових методів рішення задачі можна представити у вигляді:

$$y_{m+1} = F\left(y_{m-q}, y_{m-q+1}, \ldots, y_m, y_{m+1}, \ldots, y_{m+s}\right) \quad (2.32)$$

Тут F - деяка функція зазначених аргументів, яка визначається обраним методом, видом рівняння і побудованої сіткою.

При $q = 0,\ 0 \le s \le 1$ чисельні методи називають однокроковими, а при $q \ge 1$або $s \ge 1$- багатокроковими. Однокрокові методи називають явними при $s = 0$, неявними при $s = 1$. Багатокрокові методи при $s > 1$називають забігаючими наперед.

Чисельні методи можна застосовувати тільки до коректно поставлених завдань. Однак формальне виконання умов коректності може виявитися недостатнім для використання чисельних методів. Необхідно, щоб завдання було добре обумовлено (стійке) щодо вхідних даних. Якщо цю умова не враховувати, то невеликі зміни початкових умов або невеликі похибки чисельних методів можуть сильно спотворити рішення.

Метод розкладання рішення в ряд Тейлора

Нехай на відрізку [a b], потрібно знайти рішення $y(x)$диференціального рівняння

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \quad (2.33)$$

яке задовольняє при x=a початковій умові

$$y(a) = y_0 \quad (2.34)$$

Будемо вважати, що виконані умови існування і єдиності рішення задачі Коші (2.33) - (2.34). Крім того, припустимо, що функція $f(x,y)$в деякій області зміни аргументів x і y володіє необхідною гладкістю.

Широке застосування на практиці отримав аналітичний метод, заснований на ідеї розкладання в ряд рішення розглянутої задачі Коші (2.33) - (2.34).

Найчастіше для цих цілей використовується ряд Тейлора. Наближене рішення $y_m(x)$ вихідної задачі шукається у вигляді:

$$y_m(x) = \sum_{j=0}^{m} \frac{(x-a)^j}{j!} y^{(j)}(a),\ a \le x \le b \qquad (2.35)$$

де

$$\begin{cases} y^{(0)}(a) = y(a) = y_0 \\ y^{(1)}(a) = y'(a) = f\left(a, y_0\right) \\ y^{(2)}(a) = y''(a) \dfrac{\partial f\left(a, y_0\right)}{\partial x} + \dfrac{\partial f\left(a, y_0\right)}{\partial y} f\left(a, y_0\right) \\ y^{(3)}(a) = y'''(a) \dfrac{\partial^2 f\left(a, y_0\right)}{\partial x} + 2f\left(a, y_0\right) \dfrac{\partial^2 f\left(a, y_0\right)}{\partial x \partial y} + \\ + \dfrac{\partial^2 f\left(a, y_0\right)}{\partial y^2} f^2\left(a, y_0\right) + \dfrac{\partial f\left(a, y_0\right)}{\partial y} \left[\dfrac{\partial f\left(a, y_0\right)}{\partial x} + \dfrac{\partial f\left(a, y_0\right)}{\partial y} f\left(a, y_0\right) \right] \\ - \\ y^{(m)}(a) = F_m \left(f, f_x, f_y, f_{xx}, f_{xy}, f_{yy}, \ldots, \dfrac{\partial^{m-1} f}{\partial x^{m-1}}, \ldots, \dfrac{\partial^{m-1} f}{\partial y^{m-1}} \right) \Bigg|_{x=a,\ y=y_0} \end{cases}$$

Зі збільшенням m зростає складність застосування методу, пов'язана з обчисленням похідних високого порядку від $f(x, y)$.

Якщо права частина рівняння (2.33) в околиці точки (a, y_0) є аналітичною функцією своїх аргументів, то при значеннях x, досить близьких до a, існує єдине рішення задачі Коші (2.33) - (2.34), яке розкладається в ряд Тейлора. Тоді часткова сума ряду (2.35) буде наближеним вирішенням цього завдання.

Зі збільшенням відстані $|x - a|$ похибка $y(x) - y_m(x)$, взагалі кажучи, зростає за абсолютною величиною. Формула (2.35) стає непридатною, якщо x виходить з кордонів області збіжності відповідного ряду Тейлора.

В цьому випадку бажаними стають числові методи розв'язання задачі Коші. З їх допомогою можна визначити значення $y_m \approx y(x_m)$, $m = 1,2, \ldots, N$, наближеного рішення в, так званих, вузлах сітки $a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_N = b$.

Перевагою чисельних методів є те, що їх збіжність не залежить від довжини відрізка [a, b].

Аналогічно метод розкладання рішення в ряд Тейлора застосовується для розв'язання систем звичайних диференціальних рівнянь.

Метод Рунге-Кутти

Ідея методу, запропонованого німецькими математиками К. Рунге і М.В. Кутти, заснована на обчисленні наближеного рішення y_{i+1} у вузлі $x_{i+1} = x_i + h$ у вигляді лінійної комбінації з постійними коефіцієнтами:

$$y_{i+1} = y_i + p_{q1}k_1(h) + p_{q2}k_2(h) + \ldots + p_{qq}k_q(h) \quad (2.36)$$

де

$k_1(h) = hf(x_i, y_i)$,

$k_2(h) = hf(x_i + \alpha_2 h, y_i + \beta_{21}k_1(h))$,

– – – – – – – – – – – – – – – – –

$k_q(h) = hf(x_i + \alpha_q h, y_i + \beta_{q1}k_1(h) + \ldots + \beta_{q,q-1}k_{q-1}(h))$

При цьому коефіцієнти α_i, β_{ij} і p_{qi} вибираються так, щоб розкладання виразу (2.36) за ступенями h збігалося до максимально можливого ступеню при довільній правій частині $f(x, y)$ і довільному кроці h з розкладанням Тейлора шуканого рішення:

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \ldots + \frac{h^s}{s!}y^{(s)}(x_i) + \frac{h^{s+1}}{(s+1)!}y^{(s+1)}(x_i) + \ldots$$

Це еквівалентно тому, що якщо ввести допоміжну функцію

$$\varphi_q(h) = y(x_{i+1}) - y_{i+1} = y(x_i + h) - y_i - \sum_{i=1}^{q} p_{qi}k_i(h) \quad (2.37)$$

то її розкладання має починатися з максимально можливого ступеня

$$\varphi_q(h) = \frac{h^{s+1}}{(s+1)!}\varphi_q^{s+1}(0) + O\left(h^{s+1}\right) \quad (2.38)$$

Можна показати, наприклад, що формула 1-го порядку малості в даному випадку, яка також називається методом Рунге-Кутта першого порядку, буде збігатися з формулою Ейлера.

Метод Ейлера

Для простоти викладу надалі обмежимося рішенням задачі Коші, записаної у вигляді:

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x, y(x)),\ a \le x \le b \quad (2.39)$$

з однією невідомою функцією y і початковою умовою $y(a) = \hat{y}$

Перший крок на шляху числового рішення полягає в розбитті відрізка [a, b] на кінцеве число частин введенням вузлових точок $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = b$. Якщо позначити через h відстань між вузлами (крок сітки), то $h = \frac{a-b}{N}$ і $x_k = a + kh, k = (0,1,\ldots,N)$, де N - ціле число відрізків розбиття. Надалі будемо через $y(x_k)$позначати значення точного рішення (2.39) в точці x_k, а через y_k - відповідне наближене значення, побудоване за допомогою розглянутого чисельного методу.

Найпростішою чисельної схемою є метод Ейлера, який визначається формулами

$$y_{k+1} = y_k + hf\left(x_k, y_k\right),\ y_0 = \hat{y},\ k = 0,1,\ldots, N-1 \quad (2.40)$$

Виведення методу Ейлера випливає з розкладу в ряд Тейлора функції $y(x)$(інтегральної кривої рівняння (2.39)) в околиці точки x_k

$$y\left(x_{k+1}\right) = y\left(x_k\right) + hy'\left(x_k\right) + \frac{h^2}{2}y''\left(z_k\right) = y\left(x_k\right) + hf\left(x_k, y\left(x_k\right)\right) + \frac{h^2}{2}y''\left(z_k\right)$$

де z_k лежить всередині відрізка $[x_k, x_{k+1}]$. Будемо вважати, що всі виписані похідні існують. Якщо обмежитися першими двома членами розкладання, то можна записати

$$y_{k+1} \approx y_k + hf\left(x_k, y_k\right) \quad (2.41)$$

Геометричний сенс методу Ейлера полягає в апроксимації шуканого рішення (інтегральної кривої $y(x)$ на відрізку $[x_k, x_{k+1}]$ відрізком дотичної, проведеної до графіка рішення в точці x_k. На малюнку 2.3 наведено графічне уявлення методу Ейлера. Суцільними лініями на рис. 2.3 зображено поле інтегральних кривих, що відповідають рівнянням (2.40). Стартуючи з деякою початкової точки x_k, проводимо дотичну до інтегральної кривої, що проходить через дану точку. Тоді наступною точкою чисельного рішення стане точка y_{k+1}, яка виходить при перетині відповідної дотичної з інтегральною кривою в точці x_{k+1}, і т.д. Таким чином чисельним рішенням вихідного рівняння буде ламана лінія проведена по дотичній.

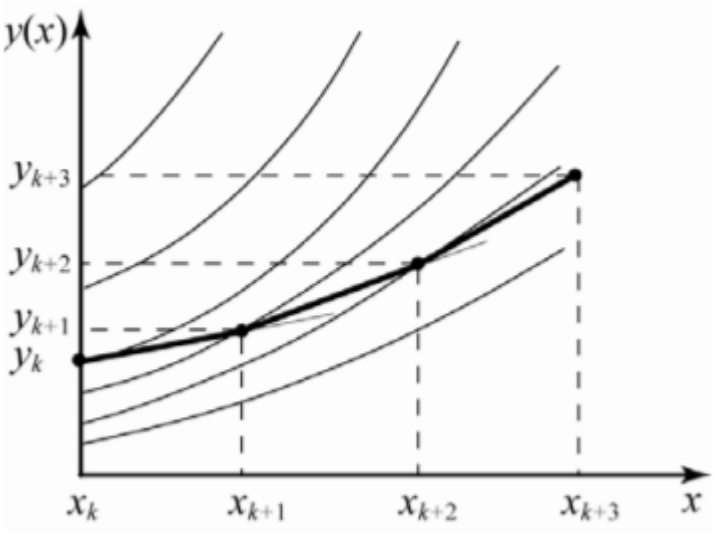


Рис. 2.3. Геометрична інтерпретація методу Ейлера

Метод Ейлера простий для чисельної реалізації: на кроці k обчислюється значення $f(x_k, y_k)$, яке потім підставляється в (2.40). Недоліком цього методу є те, що він володіє високою похибкою обчислень.

Основним джерелом похибки обчислень в даному випадку виступає помилка дискретизації, яка виникає в результаті заміни диференціального рівняння (2.39) на різницеву апроксимацію (2.40). Можна показати, що глобальна помилка дискретизації є $O(h)$. Це означає, що при зменшенні кроку h наближене рішення буде все більш точним, і при прагненні h до нуля буде сходитися до точного рішення з лінійною швидкістю по h. Цей факт висловлюється твердженням, що метод Ейлера має перший порядок. Настільки повільна збіжність при зменшенні кроку h характерна для всіх методів першого порядку.

2.4. Розв'язання рівняння Кортевега-де Фріза

2.4.1 Постановка задачі

Рівномірні сітки вводяться в область

$\overline{\mathbb{Q}} = \{(x,t)\colon 0J\ xJ\ l, 0J\ tJ\ T\}$, де

$\overline{w_h} = \left\{x_i = ih,\ i = 0,1,\ldots,N,\ hN = l\right\}$, $\overline{w_\tau} = \left\{t_n = n\tau,\ n = 0,1,\ldots,M,\ \tau M = T\right\}$.

Лінійний простір W_h характерний для сіткових функцій повинен бути введений. Він визначається на сітці $\overline{\Omega}_{h\tau}$ із показниками $y_i = y^h(x_i)$для вузлів сітки. Також формуємо кондиції періодичності: $y_0 = y_N$. Вважаємо що для і і 1 $y_{i+N} = y_i$.

Вводимо скалярний добуток у просторі W_h:

$$\left(y^h,\ z^h\right) = \frac{h}{2}y_0^h z_0^h + h\sum_{i=1}^{N-1} y_i^h z_i^h + \frac{h}{2}y_N^h z_N^h$$

$$\left(y^h, z^h\right) = h\sum_{i=1}^{N} y_i^h z_i^h = h\sum_{i=0}^{N-1} y_i^h z_i^h \qquad (2.42)$$

Завдяки періодичним функціям, які формують простір W_h, ми маємо еквівалент двох скалярних добутків:

$\|y\|L^2(\Omega_h) = \sqrt{(y,y)}$

Ми вводимо значення різницевих апроксимацій для того, щоб побудувати різницеві схеми на сітці, в якій виконуються періодичні крайові умови.

Стандартні вирази для розв’язку рівняння на n-му часовому шарі повинні бути введені, а саме:

$$y = y^n,$$

$$\widehat{y} = y^{n+1},$$

$$\overset{\vee}{y} = y^{n-1},$$

Різницеві апроксимації похідних. Для першої похідної за часом:

$$y_t = \frac{\widehat{y} - y}{\tau},$$

$$y_{\underset{t}{-}} = \frac{y - \overset{\vee}{y}}{\tau},$$

$$y_{\underset{t}{\circ}} = \frac{\hat{y} - \overset{\vee}{y}}{2\tau}$$

Так само для першої похідної за простором:

$$y_{x,i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h},$$

$$y_{\underset{x}{-},i} = \frac{y_i - y_i - 1}{h},$$

$$y_{\underset{x}{\circ},i} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$$

Для других похідних:

$$y_{\underset{x}{-}x,i} = \frac{y_{x,i} - y_{\underset{x}{-},i}}{h} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2},$$

$$y_{\underset{x}{\circ}\underset{x}{\circ},i} = \frac{y_{\underset{x}{\circ},i+1} - y_{\underset{x}{\circ},i+1}}{2h^2} = \frac{y_{i+2} - 2y_i + y_{i-2}}{4h^2},$$

Для третіх похідних:

$$y_{\bar{x}\overset{\circ}{x}x,i} = \frac{y_{\bar{x}x,i+1} - y_{\bar{x}x,i+1}}{2h} = \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + 2y_{i-1} - y_{i-2}}{2h^3}$$

Позначаємо апроксимацію y^2 літерою Q і маємо:

$$Q_i = \frac{y_i^2 + y_i y_{i+1} + y_{i+1}^2}{3},$$

$$\bar{Q} = \frac{Q_i + Q_{i-1}}{2}$$

Врівноважена апроксимація використовується для рівняння на півцілих шарах:

$$\tilde{y}_i = \frac{\hat{y}_i + y_i}{2},$$

$$\tilde{y}_x = \frac{\hat{y}_x + y_x}{2},$$

$$\tilde{y}_{\bar{x}\overset{\circ}{x}x} = \frac{\hat{y}_{\bar{x}\overset{\circ}{x}x} + y_{\bar{x}\overset{\circ}{x}x}}{2},$$

y^2 - виняток. Покажемо можливу апроксимацію y^2:

$$\tilde{Q}_{1,i} = \frac{1}{12}\left(\hat{y}_{i+1}^2 + \hat{y}_{i+1}\hat{y}_i + \hat{y}_i^2 + \hat{y}_{i+1}y_i + \hat{y}_i y_{i+1} + y_{i+1}^2 + y_{i+1}y_i + y_i^2 + 2\hat{y}_{i+1}y_{i+1} + 2\hat{y}_i y_i\right)$$

Зазначимо, що для $\tilde{Q}_1$ має сенс рівняння:

$$\frac{1}{2}\frac{\left(\tilde{Q}_{1,i} - \tilde{Q}_{1,i-1}\right)}{h} = \frac{1}{3}\left(\tilde{y}_{i+1} + \tilde{y}_i + \tilde{y}_{i-1}\right)\frac{\tilde{y}_{i+1} - \tilde{y}_{i-1}}{2h}$$

Консервативна різницева схема - це схема для якої працює сітковий аналог першого інтегрального закону збереження [19].

L_2 консервативна різницева схема - це схема для якої працює сітковий аналог другого інтегрального закону збереження [19].

2.4.2 Різницеві схеми та результати

Явні різницеві схеми

Лінеаризоване рівняння КдФ не змінює властивості рівняння КдФ, якщо ми говоримо про 2 перші закони збереження. Саме тому ми орієнтуємося на цю різницеву схему з роботи [19].

$$y_t + \alpha y_{\overset{\circ}{x}} + \beta y_{\underline{}\overset{\circ}{xxx}}, \; i = 0.1,\ldots, N, \; t \in \omega_\tau$$

$$y_{i+N} = y_i, \; y(x,0) = u_0(x), \; x \in \bar{\omega}_h \qquad (2.43)$$

Схему (2.43) слід дослідити на консервативність. Очевидно, що 1 закон збереження виконується. Для цього достатньо помножити рівняння на 1. У цій ситуації друга і третя складові схеми (2.43) дадуть 0, а для першого маємо:

$$\begin{aligned} &\left(y_{n+1} - y_n, 1\right) = 0, \\ &\tau.e.\left(y_n, 1\right) = \left(y_0, 1\right), \; \forall n > 0 \end{aligned} \qquad (2.44)$$

Це і є сітковий аналог 1 закону збереження.

Достатньо помножити рівняння (2.43) на 2ty, щоб отримати 2 закон збереження:

$$\|y(t)\|^2 - \sum_{t'=\tau}^{t} \tau \left\| y_{\underline{}t}(t') \right\|^2 = \|y(0)\|^2, t \in \omega_\tau \qquad (2.45)$$

Двокрокова схема Лакса-Вендрофа є ще одним прикладом явної двошарової схеми [21]. Це схема являє собою категорію предиктор-коректор:

$$y_{j+0.5}^{n+0.5} = \frac{1}{2}\left(y_{j+1}^n + y_j^n\right) - \frac{\tau}{4h}\left[\left(y_{j+1}^n\right)^2 - \left(y_j^n\right)^2 + \frac{2\beta}{h^2}\left(y_{j+2}^n - 3y_{j+1}^n + 3y_j^n - y_{j-1}^n\right)\right]$$

$-$ *предиктор*

$$y_j^{n+1} = y_j^n - \frac{\tau}{2h}\left[\left(y_{j+0.2}^{n+0.5}\right)^2 - \left(y_{j-0.5}^{n+0.5}\right)^2 + \frac{2\beta}{h^2}\left(y_{j+1.5}^{n+0.5} - 3y_{j+0.5}^{n+0.5} + 3y_{j-0.5}^{n+0.5} - y_{j-1.5}^{n+0.5}\right)\right]$$

$-$ *коректор*

Тришарові схеми вважаються найефективнішими, якщо ми маємо справу з рівняннями КдФ, тому що вони є зручними, точними та мають просту реалізацію:

$$y_{\overset{\circ}{t}} + yy_{\overset{\circ}{x}} + \beta y_{\overline{xxx}^{\circ}} \quad (1.46)$$

Найпростіша тришарова схема:

$$y_j^{n+1} = y_j^n - \frac{\tau}{h} y_j^n \left(y_{j+1}^n - y_{j-1}^n\right) - \beta \frac{\tau}{h^3}\left(y_{j+2}^n - 2y_{j+1}^n + 2y_{j-1}^n - y_{j-2}^n\right) \quad (1.47)$$

Перші чисельні рішення КдФ були отримані за допомогою використання цієї схеми [22]. Ця схема спрощує диференціальну задачу з порядком $O\left(t^2 + h^2\right)$.

Відповідно до [23], при малих h ця схема стійка:

$$\tau \le \frac{2h^3}{3\sqrt{3}\beta} \simeq 0.384\frac{h^3}{\beta}$$

Наведемо тришарову явну схема з наступним порядком апроксимації $O\left(t^4 + h^4\right)$[21]:

$$y_j^{n+1} = y_j^n + \frac{\tau}{6h} y_j^n \left(y_{j+2}^n - 8y_{j+1}^n + 8y_{j-1}^n - y_{j-2}^n\right) -$$

$$-\beta \frac{\tau}{4h^3}\left(y_{j+3}^n - 8y_{j+2}^n + 13y_{j+1}^n - 13y_{j-1}^n + 8y_{j-2}^n - y_{j-3}^n\right)$$

Відповідно до [23], при малих h ця схема стійка: $\tau \lesssim 0.216\frac{h^3}{\beta}$

Робота [19] пропонує нам явну різницеву схему з порядком апроксимації $O\left(t^2 + h^2\right)$:

$$y_{\overset{\circ}{t}} + \overline{y} y_{\overset{\circ}{x}} + \beta y_{\overline{xxx}^{\circ}},\ i = \overline{0,N},\ \text{де } \overline{y} = \frac{1}{3}\left(y_{i+1} + y_i + y_{i-1}\right) \quad (1.48)$$

Рівняння (1.7) в дивергентному вигляді:

$$y_{\overset{\circ}{t}} + Q_x + \beta y_{\overline{xxx}^{\circ}},\ i = \overline{0,N}, \quad (1.49)$$

помноживши рівняння (1.8) на 1, ми маємо:

$$\left(\frac{1}{2}\left(y_n + y_{n+1}\right), 1\right) = \left(\frac{1}{2}\left(y_n + y_{n-1}\right), 1\right),$$

отже, виконується наступне відношення:

$$\left(\frac{1}{2}\left(y_n + y_{n+1}\right), 1\right) = \left(\frac{1}{2}\left(y_0 + y_1\right), 1\right),$$

яке є сітковим аналогом 1 закону збереження.

Отже, схема (1.48) є консервативною. У [19] показано, що різницева схема (1.48) є L_2-консервативною та її рішення задовольняє сітковому аналогу інтегрального закону збереження:

$(y_{n+1}, y_n) = (y_1, y_0)$.

Неявні різницеві схеми

Двошарова неявна схема, яка є абсолютно стійкою та має порядок апроксимації $O\left(t^4 + h^4\right)$ [23]:

$$\frac{y_j^{n+1} - y_j^n}{\tau} + \frac{y_j^n}{24h}\left(y_{j-2}^{n+1} - 8y_{j-1}^{n+1} + 8y_{j+1}^{n+1} - y_{j+2}^{n+1}\right) + \frac{y_{j+1}^{n+1}}{24h}$$

$$\left(y_{j-2}^n - 8y_{j-1}^n + y_{j+1}^n - y_{j+2}^n\right) - \frac{\beta}{16h^3}\left(y_{j+3}^{n+1} - 8y_{j+2}^{n+1} + 13y_{j+1}^{n+1} - 13y_{j-1}^{n+1}\right) -$$

$$- \frac{\beta}{16h^3}\left(8y_{j-2}^{n+1} - y_{j-3}^{n+1} + y_{j+3}^n - 8y_{j+2}^n + 13y_{j+1}^n - 13y_{j-1}^n + 8y_{j-2}^n - y_{j-3}^n\right)$$

Рішення різницевої схеми обчислюється за допомогою семидіагональної циклічною прогонки [24]. Тришарова схема з вагами [25]:

$$y_{\overset{\circ}{t}} + \overline{y}^{(\sigma,\sigma)} y_{\overset{\circ}{x}}^{(\sigma,\sigma)} + \beta y_{\overline{x}x\overset{\circ}{x}}^{(\sigma,\sigma)} = 0, \text{ де}$$

$$y^{(\sigma,\sigma)} = \sigma\widehat{y} + (1-2\sigma)y + \sigma\overset{\vee}{y} \qquad (1.50)$$

$$\left(\frac{y^{n+1} + y^n}{2}, 1\right) = \left(\frac{y^1 + y^0}{2}, 1\right),$$

Схема (1.50), яка має періодичні за простором рішення водночас консервативна та L_2-консервативна.

Чисельне рішення може бути отримано для будь-якої з вище представлених схем. Для цього перш за все треба обрати інтервал на якому повинна бути вирішена задача та початкові умови. Для явного аналітичного рішення застосовується пакет прикладних програм для числового аналізу MATLAB.

РОЗДІЛ 3. НЕЛІНІЙНІ ХВИЛІ ГУСТИНИ СХОДИНОК НА ВІЦИНАЛЬНІЙ ПОВЕРХНІ NACL

3.1 Побудова рівняння КдФ- Бюргерса для умов росту кристалу з парової фази

Розглянемо стабільну в термодинамічному сенсі віцинальну поверхню, що має малий кут відхилення $\theta << 1$ від однієї з кристалографічних площин кристала, наприклад (1k0). В ідеальному випадку поверхня плоска, і складається з елементарних сходинок висотою a, що чергуються терасами рівної довжини $l_0 = a / tg(\theta) \approx a / \theta$ (див. Рис. 3.1).

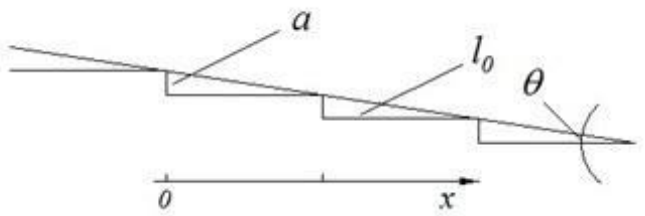


Рис.3.1. Елементарні сходинки термодинамічно-рівноважної віцинальної поверхні

На Рис.3.1 віцинальна поверхня відповідає прямій лінії. Таке розташування сходинок будемо вважати термодинамічно рівноважним, а їх концентрацію на одиничній довжині визначимо як рівноважну $\xi_0 = 1/l_0$ (см / см). На таких поверхнях рост кристалу з пересиченої парової фази буде відбуватися так, що рисунок буде зміщуватися вправо, зберігаючи свою форму. Однак в реальних умовах поверхня не є плоскою, тому що на ній є локальні макроскопічні нерівності.

Для аналізу розподілу концентрації адатомів при наявності макроскопічної нерівності представимо віцинальну поверхню сходинками постійної висоти a (висота ступеня порядку розміру адатома), але зі змінною довжиною терас l_i. Графічно таке розташування сходинок зображено на Рис. 3.2.

Концентрація сходинок $\xi(x)$ буде відрізнятися від рівноважної концентрації (див. Рис. 1), і може бути задана у вигляді:

$$\xi(x) = \xi_0 + \xi'(x) \quad (3.1)$$

де, через малість макроскопічних нерівностей, будемо вважати, що концентрація сходинок слабо відрізняється від рівноважної концентрації, тобто збурення концентрації малі $\xi'(x) << \xi_0$.

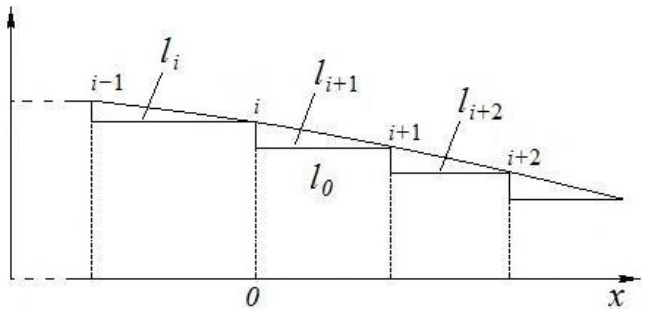


Рис.3.2. Профіль макроскопічної викривленої віцинальної поверхні кристалу

Відомо, що розподіл концентрації адатомів $\xi(x)$ на i-ій терасі задовольняє рівнянню [26, 27]:

$$\lambda_s^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} - (\xi - \xi_{st}) = 0, \quad (3.2)$$

де $\lambda_s = (D_a t_a)^{1/2}$ - середня відстань, яку долає адатом за час його існування t_a, D_a - коефіцієнт самодифузії адатомів по поверхні терас, ξ_{st} - концентрація адатомів, що знаходяться в рівновазі з пересиченим паром поза кристалом.

Рівняння (3.2) має бути доповнене граничними умовами на i і $i+1$ сходинках (торцях сходинок):

$$\xi(x=0) = \xi_i^0, \xi(x + l_0 = l_0) = \xi_{i+1}^0 \quad (3.3)$$

На сусідніх сходинках граничні умови будуть мати вигляд:

$$\xi(x - l_0 = -l_0) = \xi_{i-1}^0, \xi(x + 2l_0 = 2l_0) = \xi_{i+2}^0 \quad (3.4)$$

Рішення рівняння (3.2) з граничною умовою (3.3) має вигляд:

$$\xi(x) = \xi_{st} + (\xi_{i+1}^0 - \xi_{st}) \frac{sh\left(\frac{x}{\lambda_s}\right)}{sh\left(\frac{l_0}{\lambda_s}\right)} - (\xi_i^0 - \xi_{st}) \frac{sh\left(\frac{x - l_0}{\lambda_s}\right)}{sh\left(\frac{l_0}{\lambda_s}\right)}. \quad (3.5)$$

Рішення (3.5) справедливо в інтервалі $0 \le x \le l_0$. Для опису розподілу сходинок в більш широкому інтервалі зміни координати x усереднимо розподіл (3.5) на інтервалі $0 \le X \le (N+1) l_0$, де $N >> 1$ - велике ціле число, $X = N l_0 + x$ - нова координата. Оскільки ξ_i^0 і ξ_{i+1}^0 постійні величини, то усереднення буде діяти тільки на гіперболічні функції.

У результаті усереднення маємо:

$$\xi(X) = \lim_{X \to 0} \frac{\int_0^X \xi(x)\,dx}{X} = \xi_{st} + (\xi_{i+1}^0 - \xi_{st}) \frac{sh\left(\frac{X}{\lambda_s}\right)}{sh\left(\frac{l_0}{\lambda_s}\right)} - (\xi_i^0 - \xi_{st}) \frac{sh\left(\frac{X - l_0}{\lambda_s}\right)}{sh\left(\frac{l_0}{\lambda_s}\right)}. \quad (3.6)$$

При отриманні (3.6) використано правило Лопіталя через малість інтервалу усереднення. Наприклад, для 20 сходинок маємо:

$X \le (N+1) l_0 = (20+1) \cdot 4 \cdot a \approx 84a << \lambda_s \approx 4 \cdot 10^2 a$ [18].

Густина адатомів на макроскопічно викривленій поверхні $\rho(X)$ визначається їх концентрацією: $\rho(X)=\xi(X)/\lambda_s$.

Таким чином, вираз (3.6) описує розподіл щільності адатомів на макроскопічно викривленій поверхні $\rho(X)$. Воно отримано без застосування методу багатьох масштабів [28], використаного в [27, 29, 30].

За проміжки часу t, що значно перевищують час життя адатома на поверхні кристалу $t>>t_a$, локальна щільність стає залежною від часу величиною. Тому прийнято вважати, що зміна в часі і просторі щільності $\rho(t,X)$ підпорядковується рівнянню безперервності [27, 30]:

$$\frac{\partial\rho(t,X)}{\partial t}+\frac{\partial\left(\rho(t,X)u(X)\right)}{\partial X}=0, \qquad (3.7)$$

де $\rho(t,X)=\rho_0+\rho'(t,X)$, $\rho'(t,X)<<\rho_0$, $u(X)$ - середня локальна швидкість руху елементарних сходинок. Варто зазначити, що $\rho'(t,X)=\xi'(t,X)/\lambda_s$.

Швидкість $u(X)$ можна знайти, усереднюючи, аналогічно (3.6), швидкість ешелону паралельних елементарних сходинок v_i, що становлять макроскопічно нерівну поверхню:

$$u(X)=\lim_{X\to 0}\frac{\int_0^X \mathrm{v}_i(x)\,dx}{X}, \qquad (3.8)$$

Для визначення $u(X)$ знайдемо швидкість i- ї елементарної сходинки кристалу при його зростанні. Вона визначається різницею дифузійних потоків адатомів на цю сходинку з утворюючих її терас [27, 30]:

$$\mathrm{v}_i=\lim_{\varepsilon\to 0}D_a\left(\frac{\partial\xi(x=0-\varepsilon)}{\partial x}-\frac{\partial\xi(x=0+\varepsilon)}{\partial x}\right), \qquad (3.9)$$

.

де перший доданок в (3.9) визначається похідною від функції $\xi(x)$ в точці $x=0$ ліворуч від сходинки, а другий доданок - похідною від функції $\xi(x+l_0)$ в точці $x=0$ праворуч від сходинки.

В результаті маємо:

$$\mathrm{v}_i = \frac{2D_a}{\lambda_s}\left(\xi_i^0 - \xi_{st}\right)F\left(\frac{l_0}{\lambda_s}\right) \quad (3.10)$$

де $F(x)=\dfrac{ch(x)-1-0.5\cdot x^2}{sh(x)}$ функція, яка обертається в нуль при $x=0$, і яка прагне до 1 при $x>>1$.

На Рис. 3.3 показаний графік функції $F(x)$.

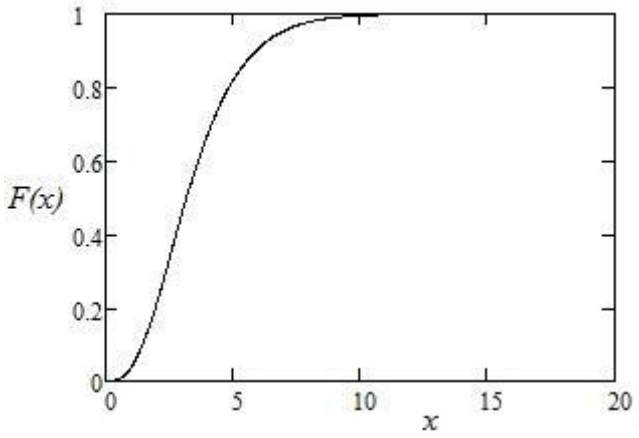


Рис. 3.3. Графік функції $F(x)$

З Рис. 3.3 випливає, що швидкість руху сходинки масштабується функцією $F(x)$ і може, в залежності від відношення довжини тераси і дифузійної довжини пробігу адатома, змінюватися від нуля до максимальної - $\mathrm{v}_i = \dfrac{2D_a}{\lambda_s}\left(\xi_i^0 - \xi_{st}\right)$.

З (3.10) випливає, що елементарна сходинка рухається в позитивному напрямку осі x.

У виразі (3.10) врахуємо залежність концентрації адатомів від кривизни [27, 30]:

$$\xi_i^0(X)=\xi_0\left(1+\frac{\sigma V_a}{kT}a\frac{\partial\rho}{\partial X}\right)\left(1+\frac{\sigma V_a}{kT}a\frac{\partial^2\rho}{\rho\partial X^2}\right)+\xi'(X), \quad (11)$$

де σ - поверхневий натяг кристалу, V_a - атомний об'єм, ξ_0 - рівноважна концентрація адатомів на сингулярній поверхні.

З огляду на введене раніше визначення щільності $\rho(X)=\xi_i^0(X)/\lambda_s$, перепишемо (3.10) у вигляді:

$$\mathrm{v}_i=2D_a\left(\rho_0\left(1+\frac{\sigma V_a}{kT}a\frac{\partial\rho}{\partial X}\right)\left(1+\frac{\sigma V_a}{kT}a\frac{\partial^2\rho}{\rho\partial X^2}\right)+\rho'-\rho_{st}\right)F\left(\frac{l_0}{\lambda_s}\right), \quad (3.12)$$

де ρ_{st} - густина пересиченого пару.

Усереднення (3.8) дає значення середньої локальної швидкості руху елементарних сходинок:

$$u(X)=2D_a\left(\rho_0\left(1+\frac{\sigma V_a}{kT}a\frac{\partial\rho}{\partial X}\right)\left(1+\frac{\sigma V_a}{kT}a\frac{\partial^2\rho}{\rho\partial X^2}\right)+\rho'-\rho_{st}\right)F\left(\frac{l_0}{\lambda_s}\right). \quad (3.13)$$

Підстановка (3.13) в (3.7) дає рівняння, що описує нелінійну динаміку руху ешелону паралельних елементарних сходинок:

$$\frac{\partial\xi'}{\partial\tau}+\left(1+\frac{\delta_{\text{п}}}{\rho_0}\right)\frac{\partial\xi'}{\partial Y}+\frac{2}{\rho_0\lambda_s}\xi'\frac{\partial\xi'}{\partial Y}+\frac{\sigma V_a\rho_0\lambda_s a}{kT\lambda_s^2}\frac{\partial^2\xi'}{\partial Y^2}+\frac{\sigma V_a a}{kT\lambda_s^2}\frac{\partial^3\xi'}{\partial Y^3}=0 \quad (3.14)$$

де $\tau=2D_a\rho_0\lambda_s^{-1}F\left(\frac{l_0}{\lambda_s}\right)\cdot t$ - безрозмірний час, $Y=X\lambda_s^{-1}$ - безрозмірна координата, $\delta_{\text{п}}=\rho_0-\rho_{st}$ - перевищення рівноважної щільності над щільністю парової фази.

Рівняння (3.14) є рівнянням Кортевега-де Фріза - Бюргерса:

$$a\frac{\partial\xi'}{\partial\tau}+b\frac{\partial\xi'}{\partial Y}+c\xi'\frac{\partial\xi'}{\partial Y}+d\frac{\partial^2\xi'}{\partial Y^2}+e\frac{\partial^3\xi'}{\partial Y^3}=0$$

В залежності від співвідношення коефіцієнтів *d* при другій похідній (дисипативний член) та *e* при третій похідній (дисперсійний член) маємо справу або з рівнянням Бюргерса ($e\ll d$), або з рівнянням Кортевега-де Фріза ($d\ll e$). Для цих рівнянь відомі точні вирази для еволюції широкого класу

початкових умов. Інтерпретація деяких з них представлена, зокрема в [28]. Для наших задач представляє інтерес розв'язання рівняння (3.14) для періодичних початкових умов у випадку, коли коефіцієнти d i e є близькими за порядком величини.

3.2 Розв’язання рівняння Кортевега-де Фріза - Бюргерса - (КдФ-Бюргерса)

Рівняння типу Кортевега-де-Фріза-Бюргерса можливо вирішити за допомогою використання числових методів. Як вже було показано у розділі 2, існує декілька числових методів розв’язання нелінійних рівнянь, а також задачі Коші для диференціальних рівнянь.

Для розв’язання рівняння КдФ-Бюргерса був обраний метод Ейлера. Рішення було успішно реалізовано у демонстративній версії пакету прикладних програм для числового аналізу MATLAB. Детальне рішення представлено у розділі “Додаток”. У якості початкових умов були розглянуті нормовані на амплітудне значення безрозмірні функції $U(x) = \sin(2x)$ та $U(x) = -\sin(2x)$. У ході вирішення рівняння Кортевега-де-Фріза-Бюргерса для різних коефіцієнтів були отримані числові розв'язки, графічна еволюція яких представлена на рис. 1-6 у дво- та тривимірному зображенні.

Якісний аналіз розв’язків представлених на рис 1-4 може вказувати, передусім, на дві особливості процесу еволюції макроскопічно викривленої поверхні, характерний профіль якої зображений на рис. 3.10. По-перше, спостерігається асиметричне зростання крутості початкового профілю і, по-друге, розрив значень функції на одній із границь (рис. 3.4, 3.5). З огляду на еволюцію профілю поверхні, який визначається густиною елементарних сходинок це може означати утворення кінематичної ударної хвилі, стрімкість зростання якої суттєво залежить від співвідношення коефіцієнтів біля

дисперсійного та дисипативного членів рівняння КдФ-Бюргерса (рис. 3.6, 3.7). Асиметрія профілю може пояснювати відмінність елементарних процесів, що відбуваються на поверхнях з різним кутом відхилення середньої площини від щільно упакованої поверхні (див рис. 3.10). Аналогічним чином це може пояснювати і результати, отримані для функції $U(x) = -\sin(2x)$(див. рис. 3.8, 3.9). В основі цих процесів в будь-якому випадку лежать нелінійні ефекти, пов'язані з дифузійною взаємодією елементарних сходинок, що рухаються в нерівноважних умовах. Щоб з'ясувати, яким чином проявляються нелінійні ефекти в умовах конкуренції дисперсійних і дисипативних процесів, необхідний аналіз аналітичних розв'язків рівняння КдФ-Бюргерса.

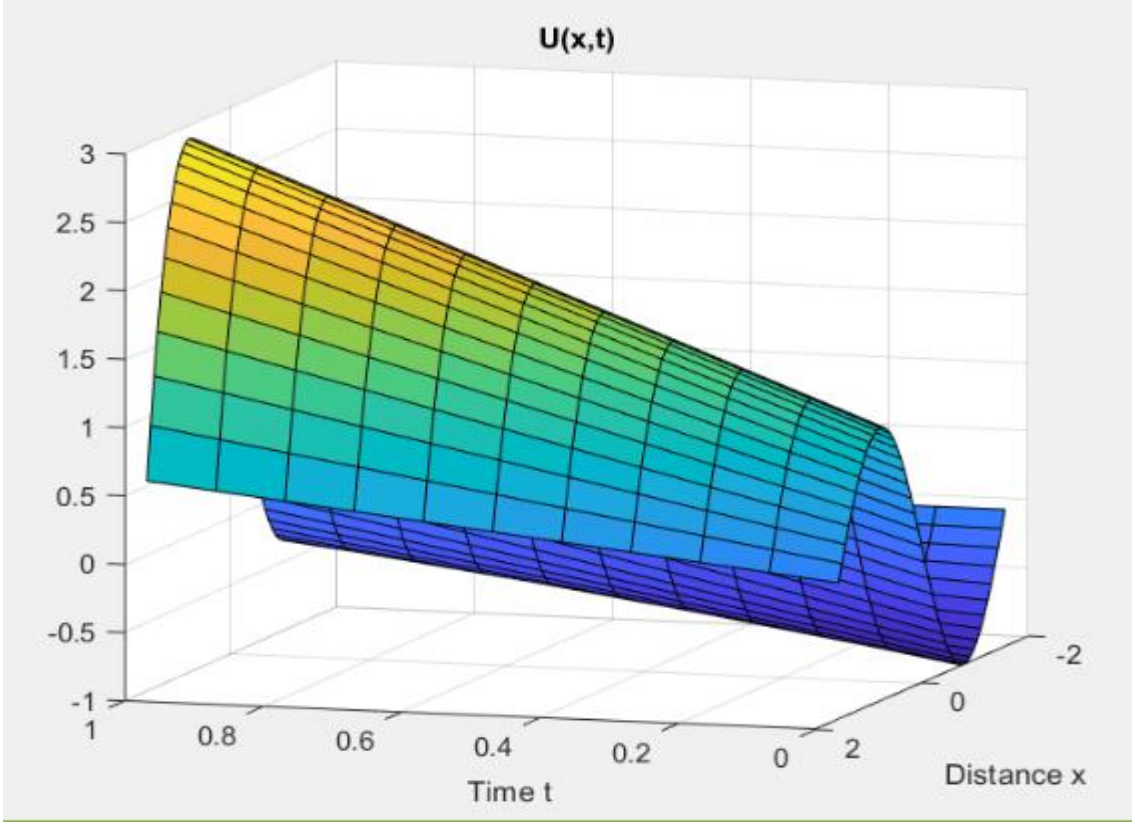


Рис. 3.4. e/d=0.50

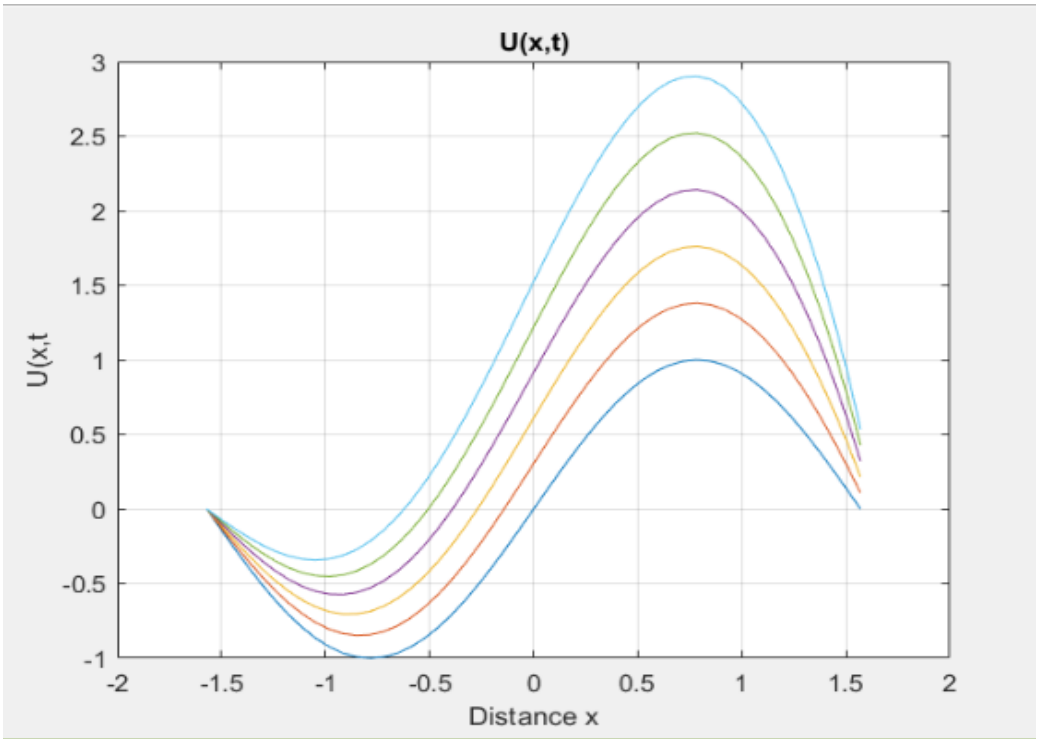


Рис. 3.5. e/d=0.50

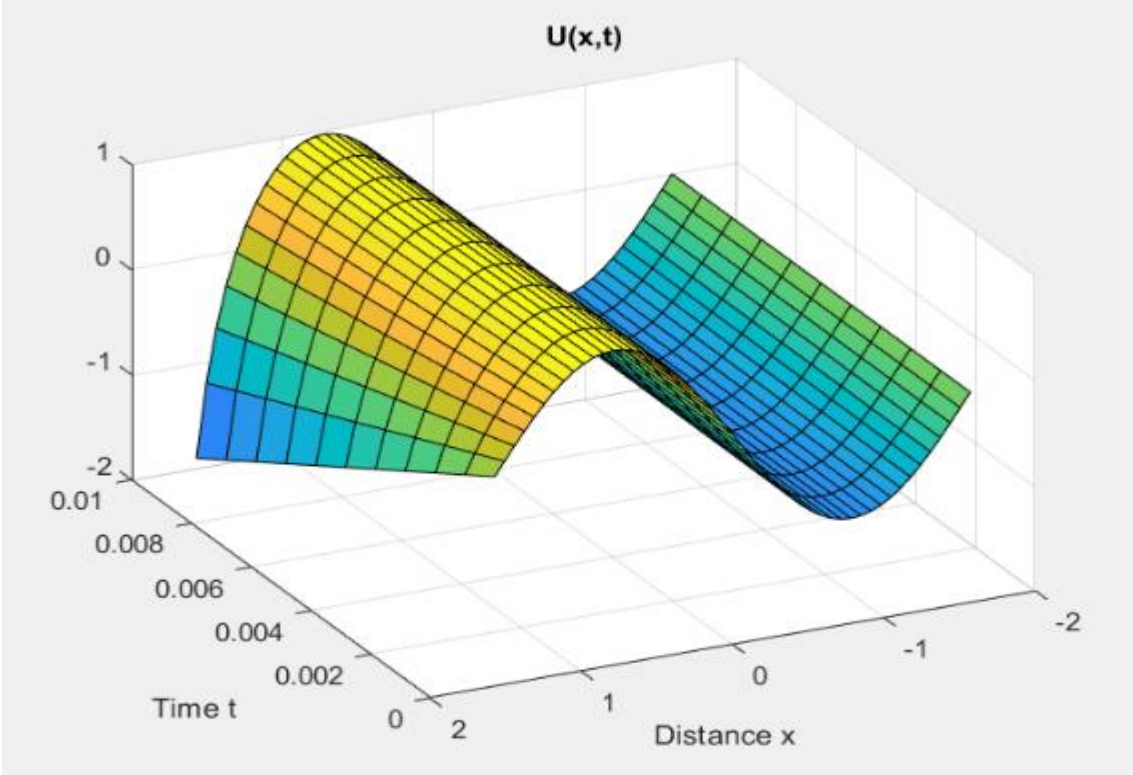


Рис. 3.6. e/d=0.22

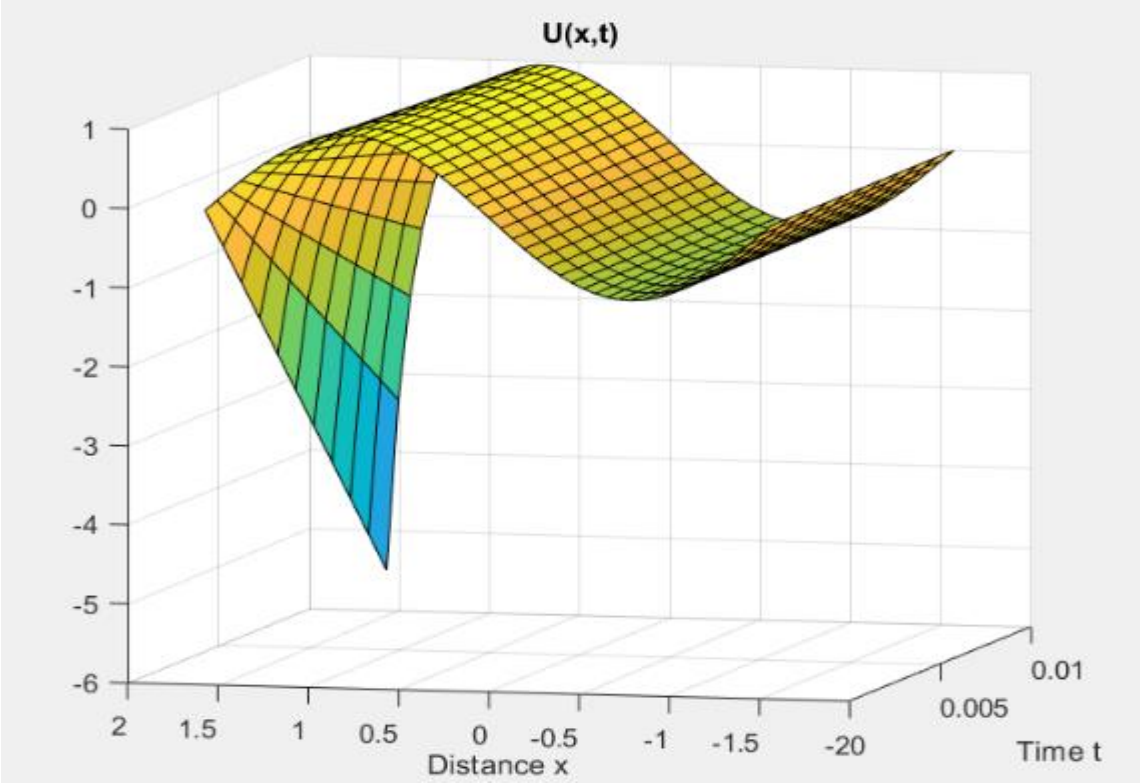


Рис. 3.7. e/d=0.20

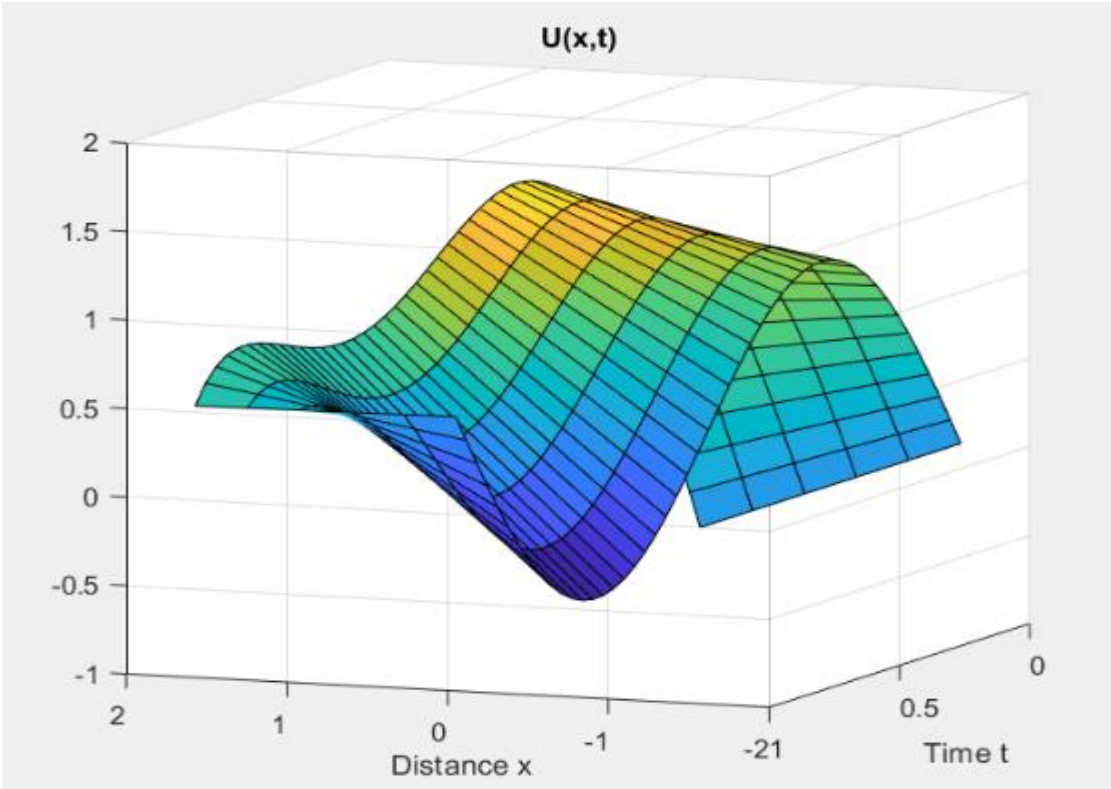


Рис. 3.8. e/d=0.50; □(□) =-U

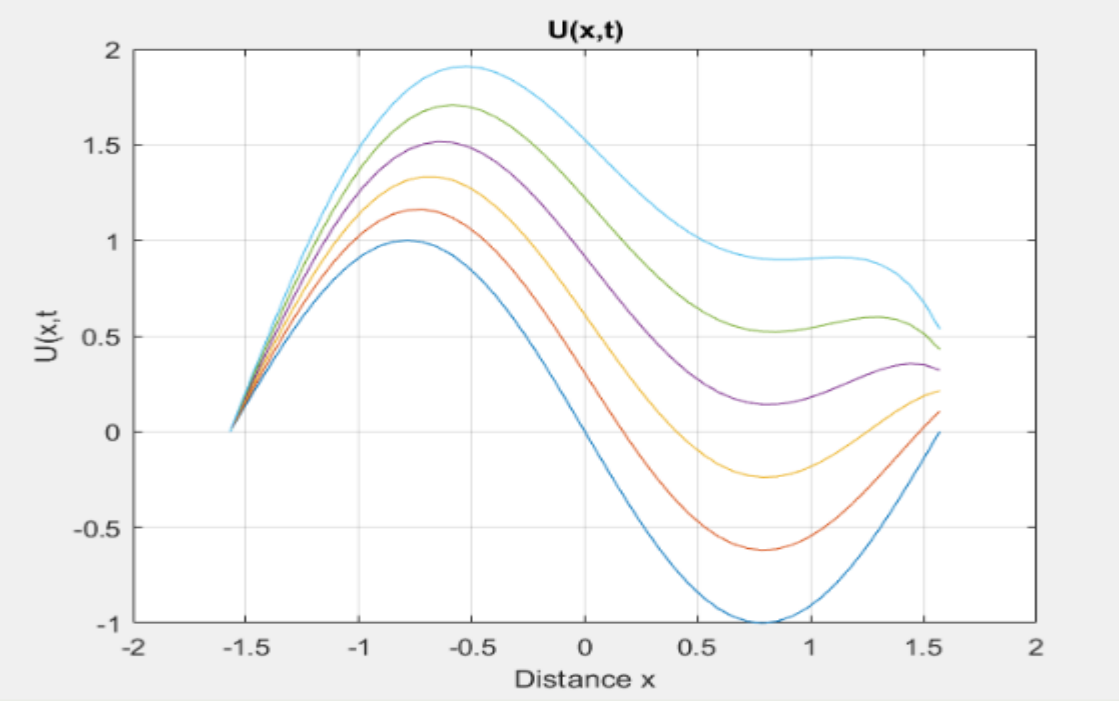
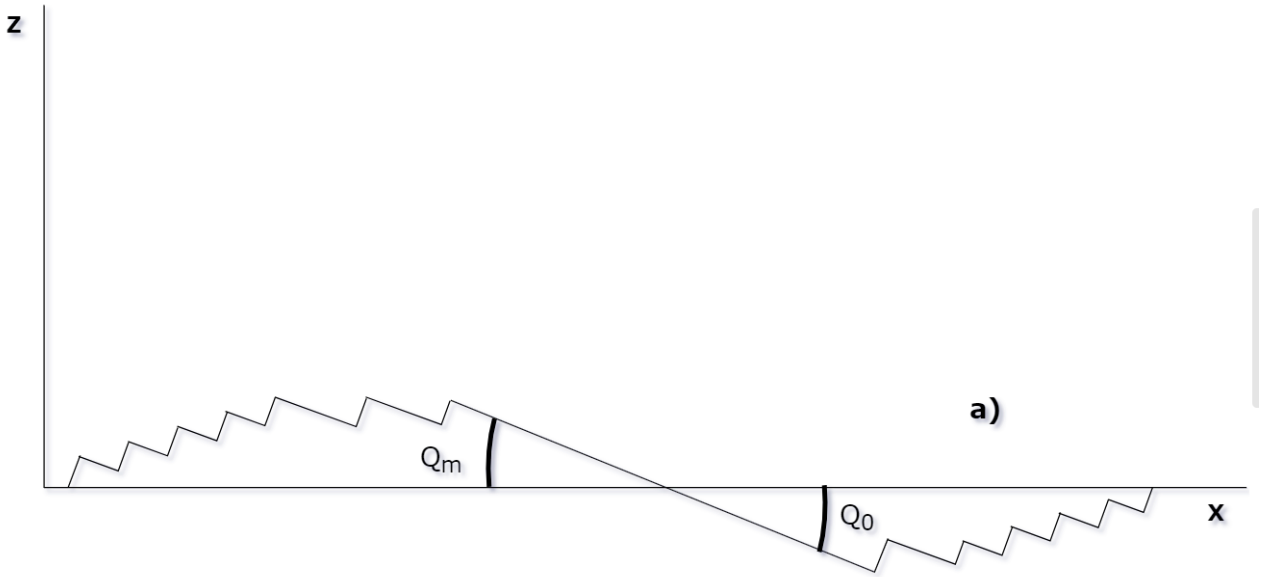


Рис. 3.9. e/d=0.50; □(□) =-U



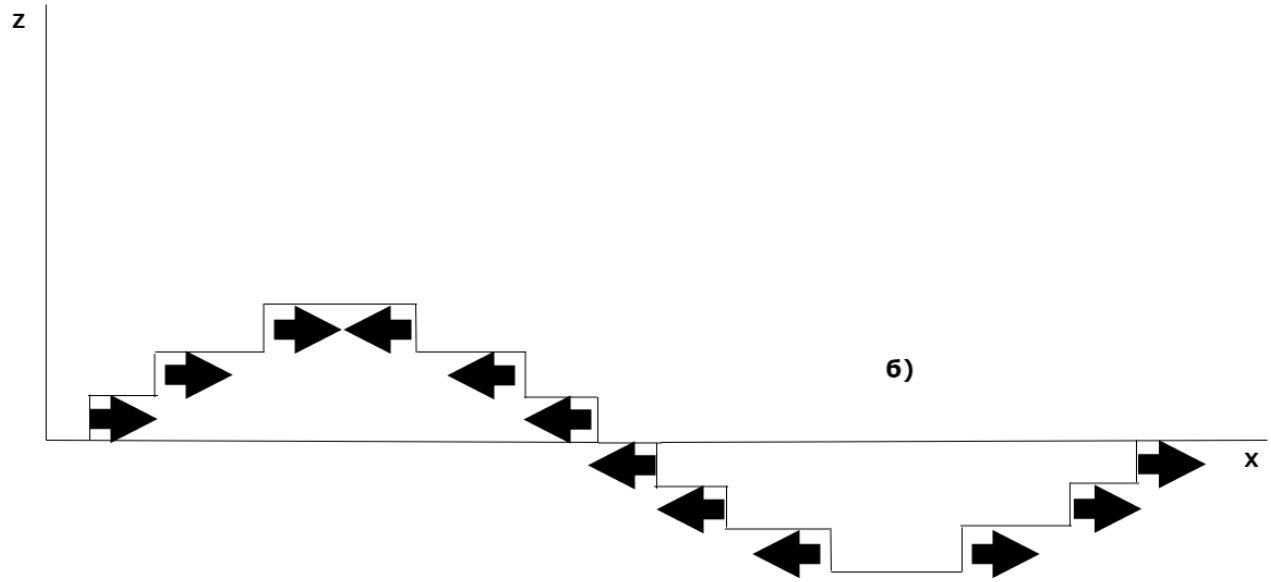


Рис. 3.10 Схематичне зображення розподілу елементарних сходинок на макроскопічно викривленій поверхні:

а) середня площина відхилена від щільно упакованої на кут θ_0;

б) середня площина z=0 є щільно упакованою (стрілки вказують напрямок руху сходинок у випадку випаровування)

Замість просторової змінної Y введемо в $\xi'(\tau, Y)$ нову просторову змінну $\zeta = qY - q'u_0\tau \equiv qY - \omega\tau$, де $\omega = q'u_0$, яка відповідає переходу в систему координат, що рухається з постійною швидкістю $u_0 > 0$ в напрямку зростання координати Y. Швидкість u_0 є середньою швидкістю відокремлених сходинок.

При такому перетворенні просторових змінних рівняння (3.14) перетворюється в рівняння Кортевега - де Фріза - Бюргерса [31] з конвективною складовою, що описує повільний рух викривленої поверхні кристалу зі швидкістю $u_0' = q\sigma$:

$$\frac{\partial \xi'}{\partial \tau} + u_0' \frac{\partial \xi'}{\partial Y} + \alpha \xi' \frac{\partial \xi'}{\partial \zeta} + \beta \frac{\partial^3 \xi'}{\partial \zeta^3} + \mu \frac{\partial^2 \xi'}{\partial \zeta^2} = 0, \quad (3.15)$$

де $\sigma_{\text{п}} = \frac{\rho_{st} - \rho_0}{\rho_0}$ - пересичення, яке визначається як відносне перевищення рівноважної концентрації сходинок поверхні кристала, $\alpha = \frac{2q}{\rho_0 \lambda_s}, \mu = q^2 \rho_0 \lambda_s \frac{\sigma V_a a}{kT\lambda_s^2}, \beta = q^3 \frac{\sigma V_a a}{kT\lambda_s^2}$.

Якщо в (3.15) перейти в нову систему координат τ і $\zeta' = \zeta - u_0' \tau$, а потім змінити знаки τ і ζ, а значить і ζ', на протилежні, то рівняння (3.15) набуде вигляду, який був досліджений в [31]:

$$\frac{\partial \xi'}{\partial \tau} + \alpha \xi' \frac{\partial \xi'}{\partial \zeta'} + \beta \frac{\partial^3 \xi'}{\partial \zeta'^3} - \mu \frac{\partial^2 \xi'}{\partial \zeta'^2} = 0. \quad (3.16)$$

Це рівняння має аналітичне рішення в вигляді простих хвиль [31]:

$$\xi'(\zeta') = U(\zeta) = A\left[2\left(1 + th(\zeta)\right) + 1 - th^2(\zeta)\right], \quad (3.17)$$

де $A = u_0/2\alpha > 0$, $\zeta' = -\zeta$, $u_0 = 0.24\mu^2/\beta > 0$, $q = 0.1\mu/\beta > 0$, q - хвильове число.

Слід зазначити, що згідно зі зробленим раніше припущенням, амплітуда A повинна бути мала, тобто $u_0/2\alpha << \xi_0$.

В роботі [31] досліджено рівняння виду (3.16). Групова швидкість ударної хвилі, яка визначається як $\mathrm{v}_g = d\omega/dq$, дорівнює u_0, і спрямована вздовж осі Y. У розглянутому нами випадку групова швидкість дорівнює $-u_0$, а аналітичне рішення (3.17) описує монотонну ударну хвилю без осциляцій, що рухається з постійною швидкістю u_0 в напрямку зменшення координати Y.

На Рис. 3.11 показана в відносних одиницях структура ударної хвилі (3.17) в залежності від просторової змінної x. Ударна хвиля поширюється справа наліво, зберігаючи свою форму. Таким чином, початкове нульове значення збуреної концентрації $\xi'(\zeta')$ при $\zeta' \to -\infty$ прагне до значення $\xi'(\zeta' \to \infty) = 4A$ при $\zeta' \to +\infty$.

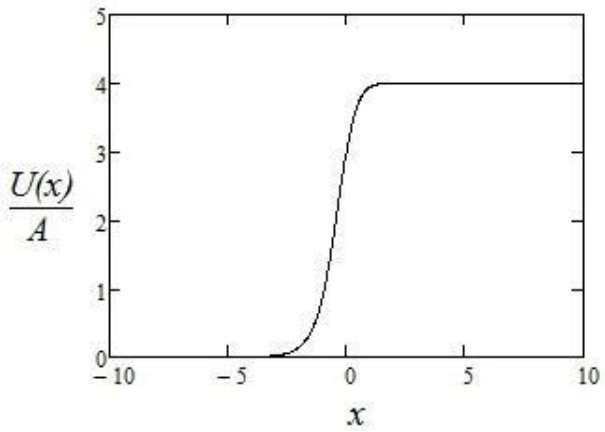


Рис. 3.11. Графік функції $U(x)/A$ *. Структура ударної хвилі в залежності від просторової змінної x*

Вид рішення може бути визначений, наприклад, за величиною амплітуди ударної хвилі $A = A_0$. З (3.17) визначаються значення хвильового числа $q_0 = 0.505407239\left(A_0 kT\lambda_s^2/\sigma V_a a\right)^{\frac{1}{6}}$ і швидкості ударної хвилі $u_0 = 4A_0 q_0/\rho_0\lambda_s$.

3.3 Інтерпретація аналітичного розв'язку рівняння для кінематичної хвилі елементарних сходинок на віциналі (100) NaCl

Для порівняння результатів теоретичних розрахунків з експериментом було проведено аналіз морфології віцинальних поверхонь росту, що формуються в процесі релаксації форми неізометричних пор в монокристалах NaCl [32]. Вибір лужно-галоїдного кристалу як об'єкту дослідження обумовлений такими міркуваннями.

По-перше, для цих кристалів розвинена методика отримання даних про константи, що визначають швидкість зміщення елементарних сходинок на віцинальних поверхнях з орієнтацією поблизу (100) при заданих зовнішніх умовах [33]. Такими константами є $D_s = D_a\xi_0$ - коефіцієнт поверхневої самодифузії, що характеризує кінетику масоперенесення, де ξ_0 - рівноважна

концентрація адмолекул, $\beta_s = \beta_a \xi_0$, β_a - кінетичний коефіцієнт сходинки, що характеризує швидкість обміну адмолекул між сходинкою і терасою при одиничному перепаді концентрацій поблизу сходинки, і λ_s - середня довжина дифузійного шляху адмолекул за час їхнього життя на поверхні. В широкому інтервалі температур визначені значення зазначених констант і показано, зокрема, що параметр, що характеризує режим руху моноатомних ($a = 2{,}81\,\text{Å}$) сходинок, $Q = D_s / \beta_s \lambda_s \ll 1$. Це означає, що моноатомні сходинки рухаються практично в дифузійному режимі, коли лімітує швидкість дифузійного підведення адмолекул до сходинки, а не кінетика їх вбудовування в сходинку. Цей факт врахований при виводі рівняння (3.10).

По-друге, були визначені лінійні натяги сходинок моноатомної (α_1) і подвійної (α_2) висоти на поверхнях (100) NaCl і показано, що $2\alpha_1 < \alpha_2$ [34]. Це означає, що віцинальні поверхні (поблизу (100)) NaCl є термодинамічно стабільними. Підтвердженням цього факту служать і оцінки відношення ефективного поверхневого натягу елементарних сходинок до поверхневого натягу кристалу, виконані в [32] за величиною залишкової неізометричності пор.

І, нарешті, по-третє, завдяки оптичній прозорості монокристалів NaCl, в них зручно вивчати рух і перетворення форми пор за допомогою оптичної мікроскопії, а морфологію поверхонь зростання, випаровування після розтину пор в вакуумі - за допомогою електронно-мікроскопічної техніки вакуумного декорування. Як показано нижче, саме в порах стає можливим створення унікальних умов для формування поблизу сингулярної поверхні (100) макроскопічної викривленої віцинальної поверхні кристала, представленої макроскопічно протяжними в напрямку $\langle 10 \rangle$ елементарними сходинками. При цьому, в силу макроскопічної кривизни профілю віцинальної поверхні

зростання, внеском Ван-дер-Ваальсівського відштовхування в поверхневий натяг, як і при аналізі дифузійної взаємодії елементарних сходинок, можна знехтувати [35]. Крім того, аналіз численних робіт, присвячених елементарним процесам випаровування - зростання з парової фази монокристалів NaCl, а також, результати досліджень не дають підстав припускати наявність ефекту Швебеля на віцинальних поверхнях цих кристалів. Таким чином, на обраному для аналізу об'єкті, диффузійна взаємодія між рухомими елементарними сходинками повинна призводити до виникнення кінематичних хвиль щільності сходинок в їх класичному розумінні (коли потік сходинок залежить тільки від їх локальної щільності).

Методика експерименту полягала в наступному. Зразок монокристалла NaCl з порами піддавався відпалу в установці, що дозволяє створювати різні температурні градієнти ∇T. Напрямок температурного градієнта збігався з кристалічною віссю типу $\langle 100 \rangle$. У процесі руху пори чітко огранювалися площинами типу $\{100\}$ і витягувалися в напрямку, перпендикулярному градієнту. Такий характер поведінки пор спостерігався раніше в [36]. Було показано зокрема, що огранення пор при русі обумовлено лімітуючою роллю процесів на поверхнях, які випаровуються. Після досягнення досить високого ступеня неізометричності пор відпал продовжували в ізотермічних умовах. У процесі ізотермічного відпалу форма пор релаксувала [32].

Процеси руху пор в полі температурного градієнта і релаксації їх форми в ізотермічних умовах вивчали в монокристалах NaCl із середньою щільністю дислокацій $10^{10} - 10^{11}$ м$^{-2}$. Досліди проводили в інтервалі температур $T = 950 - 1040$ К і значень $\nabla T = (6 - 10) \cdot 10^3$ К / м.

Перетворення форми пор протікало в міру різниці хімічних потенціалів молекул $\Delta\mu = \sigma V_a \Delta K$, обумовленої відмінністю локальних кривизн поверхні ΔK. Якщо вважати, що $\Delta K \simeq K$, для пор досліджуваного діапазону розмірів (1 -

100 мкм) величина $\Delta\mu$ виявляється дуже малою. Тому досліди по релаксації форми пор є зручним способом вивчення процесів випаровування і кристалізації при дуже низьких недо- і пересиченнях ($\Delta\mu / kT$). Так, при $\sigma \simeq 0,3$ Дж / м^2, $V_a = 4,4 \cdot 10^{-29}$ м^3 значення $\Delta\mu / kT$ лежать в інтервалі $10^{-5} - 10^{-3}$. Реалізація таких малих значень пересичень в звичайних ростових експериментах пов'язана зі значними труднощами.

Процеси зростання - випаровування в лужногалоїдних кристалах відбуваються пошарово і для релаксації форми пор необхідні джерела шарів. При зазначених значеннях недосичень єдино можливими ефективними джерелами шарів на поверхнях пор, які випаровуються, можуть бути тільки гвинтові дислокації. При цьому, як показали результати електронно-мікроскопічних досліджень [32], поверхні випаровування пор ((100) NaCl) є гладкими в атомному масштабі. Що стосується поверхонь зростання, то такими джерелами є двогранні кути пор. Зростання граней пор здійснюється в результаті схлопування сходинок, що зароджуються на двогранних кутах пор (або попередньо сформованих макросходинках). У процесі руху пор грані, паралельні температурному градієнту, були поверхнями випаровування. А в процесі подальшої релаксації неізометричної форми пор, ці ж грані ставали поверхнями зростання. Таким чином, створювалися унікальні умови для формування та подальшої еволюції при низьких пересиченнях макроскопічно-викривленої віцінальної поверхні. В результаті дифузійної взаємодії рухомих сходинок морфологія зростаючої поверхні набувала вигляду, який представлений на рис.3.12. Про те, що сходинки є моноатомними, можна судити на основі аналізу взаємодії сходинок, які формують поверхню зростання, зі смугами ковзання. Обрана для аналізу ділянка поверхні зростання обмежена приблизно шістдесятьма сходинками, оскільки при подальшому наближенні до двогранного кута (в правій частині рис. 3.12),

техніка декорування вже не дозволяє чітко розрізняти окремі сходинки і однозначно визначати їх висоту.

Основним результатом нелінійних ефектів дифузійної взаємодії рухомих елементарних сходинок є виникнення ударних хвиль щільності сходинок, що призводить до розривів щільності. Для зіставлення результатів теоретичних розрахунків з експериментальними даними фрагмент поверхні, представлений на рис. 3.12, був оцифрований в програмі Get Data Graph Digitizer і отриманий масив даних про одновимірний розподіл ширини терас між елементарними сходинками оброблявся в пакеті Origin Pro.

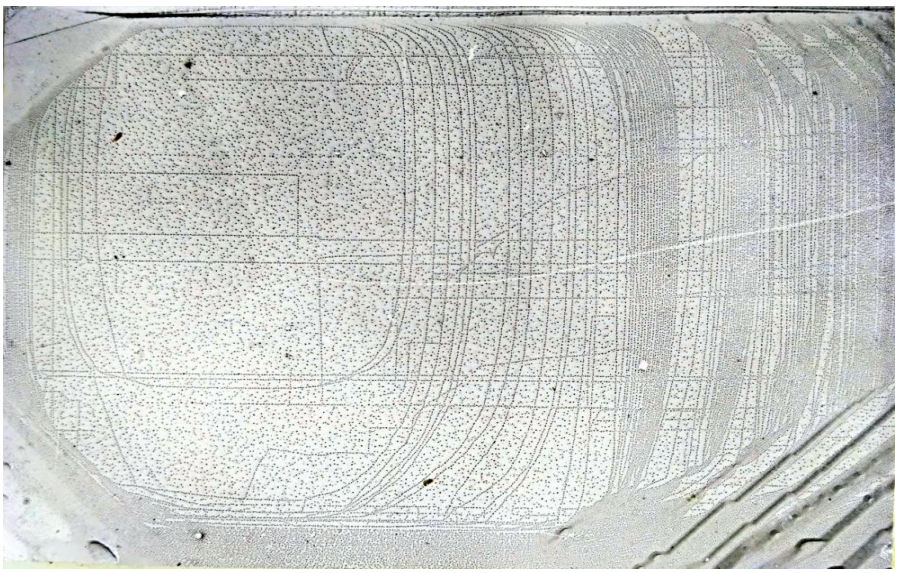


Рис. 3.12. Електронно-мікроскопічне зображення продекорірованної частинками золота ділянки віцинальної поверхні зростання поблизу (100) NaCl, що сформувалася в процесі релаксації форми неізометрічной пори в ізотермічних умовах:

Результати зіставлення теорії з експериментом представлені на рис. 3.13. Перш за все, звертають на себе увагу стрибкоподібні зміни щільності моноатомних сходинок, положення яких зображені на рис. 3.13 квадратиками. Це є прямим доказом того, що групування (ешелонування) моноатомних сходинок на рис. 5 являє собою кінематичні ударні хвилі.

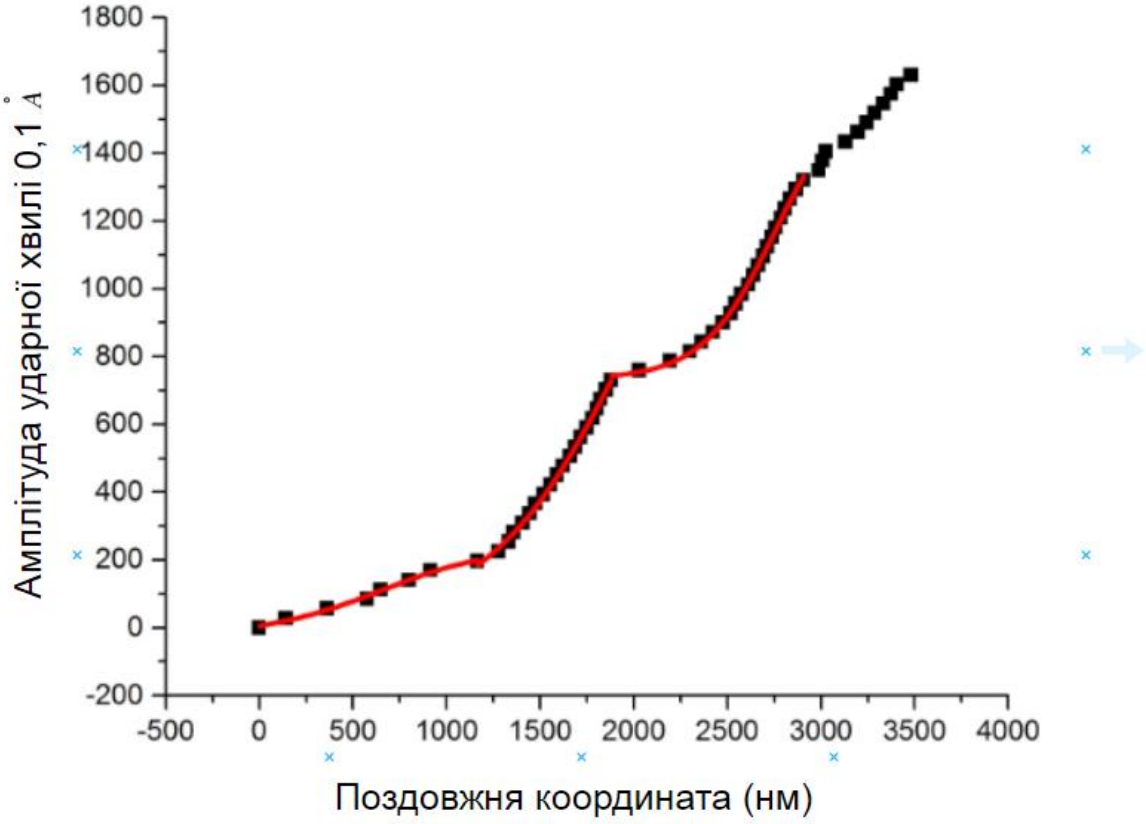


Рис. 3.13. Структура ударних хвиль, представлених на рис. 3.15 : ■ *- положення моноатомних сходинок з рис. 3.12 (нульовій координаті відповідає положення другої сходинки в лівій частині рис. 3.12); суцільні лінії - результат розрахунків на підставі рівняння (3.17)*

В результаті обробки експериментальних даних з рис. 3.12 на підставі рівняння (3.17) отримані параметри трьох монотонних ударних хвиль без осциляцій (1-3 на рис. 3.13), які представлені, відповідно, в таблицях 3.1-3.3. Тут U_0 - п'єдестал ударної хвилі, A - її амплітуда, X_0 - положення точки в хвилі, відповідне початку координат на рис. 4, С - нормувальний коефіцієнт при координаті. У 3-6 - х стовпцях таблиць наведені дані, що характеризують точність обробки експериментальних результатів. Негативне значення U_0 для першої хвилі обумовлено тим, що оцифровування здійснювалося з другої сходинки в лівій частині рис. 3.12.

Таблиця 3.1. Параметри монотонної ударної хвилі без осциляцій № 1 на рис. 3.13

Хвиля 1	Значення	Стандартна помилка	t- значення	Prob>|t|	Залежність
U_0, 0,1 Å	-29,2835	31,6695	-0,92466	0,40748	0,99262
A, 0,1 Å	63,73184	14,49255	4,39756	0,01171	0,99299
X_0, нм	907,25331	107,72418	8,422	0,00109	0,9773
C, нм	707,89267	234,50715	3,01864	0,03922	0,98344

Таблиця 3.2. Параметри монотонної ударної хвилі без осциляцій № 2 на рис. 3.13

Хвиля 2	Значення	Стандартна помилка	t- значення	Prob>|t|	Залежність
U_0, 0,1 Å	17,08377	54,98662	0,31069	0,76005	0,99931
A, 0,1 Å	345,26521	106,91216	3,22943	0,00524	0,9999
X_0, нм	2195,76656	218,97799	10,02734	2,64443E-8	0,99994
C, нм	762,71083	155,40153	4,908	1,57624E-4	0,99977

Таблиця 3.3. Параметри монотонної ударної хвилі без осциляцій № 3 на рис. 3.13

Хвиля 3	Значення	Стандартна помилка	t- значення	Prob>|t|	Залежність
U_0, 0,1 Å	732,22675	5,3662	136,45155	0	0,94707
A, 0,1 Å	192,73526	8,13469	23,69299	5,10703E-15	0,99274

X_0, нм	2887,23305	19,3683	149,07	0	0,99466
C, нм	406,14538	16,05539	25,29652	1,55431E-15	0,97575

Відповідно до теоретичних розрахунків, за величиною учетверенного значення амплітуди ударної хвилі ($4A$) визначали кількість моноатомних ($a = 2{,}81\,\text{Å}$) сходинок, що беруть участь у формуванні відповідної хвилі. Потім за даними рис. 3.15, 3.16 і значенням $\lambda_s = 28{,}6$ нм, отриманого для температури експерименту на підставі емпіричної залежності [33]:

$$\lambda_s = 1{,}25 \cdot 10^{-9} \exp[(0{,}27 \pm 0{,}02)/kT] \text{ , м}$$

знаходили середню безрозмірну щільність сходинок $\rho_0\lambda_s$ для кожної хвилі. За отриманими значеннями $\rho_0\lambda_s$ і даними про амплітуди хвиль з таблиць 1-3 на підставі виразів для коефіцієнтів c, d, e в рівняннях (3.15), (3.16) і співвідношень між ними визначали значення безрозмірних амплітуд A_0. За відомими значеннями A_0 обчислювали значення хвильового числа q_0 і швидкості ударної хвилі u_0. Значення перелічених величин для всіх трьох ударних хвиль представлені в таблиці 3.4.

Таблиця 3.4. Значення безрозмірних характеристик ударних хвиль: середньої щільності сходинок $\rho_0\lambda_s$, амплітуди A_0, хвильового числа q_0, швидкості ударної хвилі u_0, а також, коефіцієнтів c, d, e, в нелінійних рівняннях (3.15, 3.16)

Хвиля	$\rho_0\lambda_s$	$A_0 \cdot 10^8$	c	$d \cdot 10^6$	$e \cdot 10^6$	q_0	$u_0 \cdot 10^6$
1	0,150	6,7088	1,633	0,7457	0,609	0,1225	0,219
2	0,404	131,080	0,995	5,408	2,690	0,2010	2,609
3	0,567	362,352	0,8399	10,649	4,472	0,2381	6,090

Результати, представлені в таблиці 3.4, свідчать про те, що, щонайменше, три (наскільки дозволяє розрізнити електронно-мікроскопічна техніка вакуумного декорування) ударні хвилі виділилися з масиву рухомих сходинок, згенерованого на віцинальній поверхні зростання монокристала NaCl в процесі релаксації форми неізометрічной пори. На жаль, методика проаналізованого експерименту не дозволяє досліджувати дифузійну взаємодію моноатомних сходинок подібно до того, як це здійснюється в разі напівпровідникових кристалів [37, 38]. Але з іншого боку в даному випадку ми позбавлені ряду факторів кінетичного походження, супроводжуючих техніку експериментів з напівпровідниками і їх сполуками (ефект Швебеля, ефект електроміграції, пружні взаємодії при гетероепітаксії і ін.) І факторів, які призводять до морфологічних нестійкостей (звивистості ступенів і їх групування) , які суттєво ускладнюють розгляд процесів еволюції віцинальних поверхонь [11]. Наскільки нам відомо, до теперішнього часу через різноманіття і складність супроводжуючих чинників морфологічні нестійкості на поверхнях напівпровідників не знаходять повного опису і продовжують бути предметом дискусій, не дивлячись на різноманіття підходів до побудови і знаходження рішень нелінійних еволюційних рівнянь.

У випадку монокристалів NaCl (в більшій мірі - модельних об'єктів) ми маємо справу з групуванням елементарних сходинок на віцинальних поверхнях, що є предметом кінематичної хвильової теорії. Підтвердженням цьому служить узгодження теоретичних результатів з експериментом. В рамках проведеного розгляду ми спостерігаємо деякі особливості виявлених кінематичних хвиль. Перш за все, вони є монотонними ударними хвилями без осциляцій. У міру віддалення від джерела сходинок (у вигляді двогранного кута) відбувається спадання значень безрозмірних характеристик ударних хвиль, таких як середня щільність сходинок $\rho_0\lambda_s$, амплітуда A_0, хвильове число q_0 і швидкість u_0. Це цілком зрозуміло в рамках представленої

феноменології. Зменшення амплітуди, хвильового числа і швидкості ударних хвиль відбувається, по-перше, тому що в міру зменшення середньої щільності елементарних сходинок знижується інтенсивність їх дифузійного взаємодії і, по-друге, зменшується ступінь неоднорідності, обумовлена середньою локальною макроскопічною кривизною поверхні.

Висновок

Віцинальні поверхні кристалів служать підкладками для виробництва наноструктурованих матеріалів для потреб мікро- та наноелектроніки. Дальній порядок при формуванні нанорозмірних структур в умовах гетероепітаксії, як правило, забезпечується періодичними полями пружних напружень. Альтернативний спосіб базується на явищі самоупорядкованого росту нанокристалів на макросходинках, що можуть формуватися на віцинальних поверхнях в нерівноважних умовах. Але в цьому випадку проблема забезпечення дальнього порядку не вирішена. Макросходинки, що з'являються на термодинамічно стабільних віцинальних поверхнях при рості з парової фази і обумовлені виключно кінетичною (дифузійною) взаємодією елементарних сходинок в процесі їх руху, в теорії нерівноважної поверхневої динаміки розглядаються як кінематичні хвилі густини сходинок.

Основним результатом дифузійної взаємодії елементарних сходинок є поява ударних хвиль густини сходинок. Ударна хвиля проявляє себе як злам, на якому нахил віцинальної поверхні (тобто густина сходинок) різко змінюється. Формування і еволюція ударних хвиль вивчались на основі результатів загального аналізу кінематичних хвиль. Мікроскопічний підхід оснований на розв'язанні рівнянь Бартона-Кабрери-Франка для одновимірного руху дифузійно зв'язаної системи елементарних сходинок.

Для дослідження динаміки профілю макроскопічно вигнутої віцинальної поверхні був використаний метод усереднення по великим інтервалам просторової координати, які тим не менш залишалися нескінченно малими. З рівняння неперервності для середніх значень концентрації адатомів і швидкості елементарних сходинок з урахуванням кривизни границі було отримано нелінійне рівняння Кортевега де Фріза – Бюргерса. Розв'язання рівняння КдФ-Бюргерса здійснено числовим методом Ейлера у

демонстраційній версії пакету прикладних програм для числового аналізу MATLAB.

Аналіз еволюції графічних розв’язків рівняння з періодичними початковими умовами у дво- та тривимірному зображенні показав, що нелінійні ефекти в умовах конкуренції дисперсійних і дисипативних процесів можуть призводити до виникнення ударних хвиль.

На основі відомого аналітичного розв’язку рівняння КдФ-Бюргерса описана кінематична хвиля на термодинамічно стабільній віцинальній поверхні NaCl(100) утвореній елементарними сходинками орієнтації [01]. Показано, що амплітуда експериментально виявленої кінематичної хвилі приблизно складається з амплітуд трьох ударних хвиль, що описуються аналітичним розв’язком. Ударні хвилі не є ні увігнутими, ні опуклими, як очікувалось від кінематичної теорії нелінійних хвиль. Вочевидь це пов’язано саме з тим фактом, що вони є результатом рівнянням КдФ-Бюргерса, а не рівняння Бюргерса, коли вирішальну роль відіграє конкуренція нелінійних ефектів з дисипативними ефектами. Показано, що виявлені хвилі є монотонними ударними хвилями без осциляцій. Із збільшенням відстані від джерела сходинок (двогранного кута пори) відбувається зменшення значень безрозмірних характеристик ударних хвиль. В рамках представленої феноменології такий характер процесів є цілком зрозумілим: зменшення амплітуди, хвильового числа і швидкості ударних хвиль відбувається тому, що при зменшенні середньої густини елементарних сходинок зменшується ступінь неоднорідності, пов'язаний з середньою локальною макроскопічною кривизною поверхні і послаблення дифузійної взаємодії сходинок.

Отримані результати є корисними для подальших досліджень умов формування макросходинок на віцинальних поверхнях досліджуваних

кристалів з метою отримання квазіперіодичного рельєфу поверхні і забезпечення дальнього порядку в організації наноточок.

Список використаної літератури

1. Наночастицы, наносистемы и их применение. Ч.1. Коллоидные квантовые точки / под ред. В. А. Мошникова, О. А. Александровой, 2015, 236с
2. Review of quantum wires and dots in nanotechnology. Alexander Coronado, 2605672 EEE-5425 Introduction to Nanotechnology Spring, 2013
3. Crossveinless d is a vitellogenin-like lipoprotein that binds BMPs and HSPGs, and is required for normal BMP signaling in the Drosophila wing. Chen et al., 2012, Development 139(12): 2170--2176
4. Reed M. A. et al. Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure // Physical Review Letters. – 1988. – Т. 60. – №. 6. – С. 535.
5. Quantum Wells, Quantum Wires, Quantum Dots, Quantum Limit of Conductance, Quantum Capacitance & Quantum HALL Effect R. John Bosco Balaguru Professor School of Electrical & Electronics Engineering SASTRA University B. G. Jeyaprakash Assistant Professor School of Electrical & Electronics Engineering SASTRA University
6. TwoBand Lasing in Epitaxially Stacked TunnelJunction Semiconductor Lasers D. A. Vinokurov, 2010
7. GaAs/AlGaAs core multishell nanowire-based light-emitting diodes on Si. Tomioka K, 2010,
8. C. Jung, R. Jäger, M. Grabherr, P. Schnitzer, R. Michalzik, B. Weigl, S. Muller, K. J. Ebeling: “4.8 mW single-mode oxide confined top-surface emitting vertical-cavity laser diodes”, Electron. Lett. 33, 1790–1791 (1997)

9. J. Faist,F. Capasso,D. L.Sivco,C. Sirtori,A. L. Hutchinson, andA. Y. Cho,Science 264, 553 (1994)
10. Circular function-based gas-kinetic scheme for simulation ofinviscid compressible flowsL.M. Yang a, C.Shub, J.Wua, N.Zhaoa, Z.L.L, 2013
11. Lopes J, et al. (2011) G-quadruplex-induced instability during leading-strand replication. EMBO J 30(19):4033-46
12. Шик А.Я., Бакуева Л.Г., Мусихин С.Ф., Рыков С. А. Физика низкоразмерных систем.- СПб.: Наука, 2001
13. Step-mediated size selection and ordering of heteroepitaxial nanocrystals, I Goldfarb, 2007
14. Sgarlata, A., Szkutnik, PD , Balzarotti, A., Motta, N., & Rosei, F. (2003). Self-ordering of Ge islands on step-bunched Si (111) surfaces. Applied Physics Letters, 83 (19), 4002-4004.
15. Уизем Дж. Линейные и нелинейные волны Пер. с англ. В.В. Жаринова. Под ред. А.Б. Шабата. — М.: Мир, 1977. — 624 с.: ил.
16. Кудряшов , Нелинейные волны и солитоны, 1997
17. Филиппов А.Т. Многоликий солитон. М.: Наука, 1986. (Б-чка “Квант”; Вып. 48).
18. Чернов, А. А. Слоисто-спиральный рост кристаллов / А. А. Чернов // Успехи физ. наук. — 1961. — Т. 73. — No 2. — С. 277—331. 57.
19. Самарский А.А., Мажукин В.И., Матус П.П., Михайлик И.А. Z/2-консервативные схемы для уравнения Кортевега-де Фриса.// ДАН, 1997, т.357, е4, с.458-461
20. Шабат А.Б. Об уравнении Кортевега-де Фриза // ДАН СССР, 1973, т.211, еб, с.1310-1313
21. Березин Ю.А. Моделирование нелинейных волновых процес-сов. Новосибирск: Наука. 1982.

22. Zabusky N.J., Kruskal M.D. Interactions of "solitons"in a collisionless plasma and the reccurence of initial states // Phys.Rev.Lett. 1965. V.15. еб. P.240-243
23. Березин Ю.А., О численных решениях уравнения Кортевега-де Вриза.// Численные методы механики сплошной среды. Новоси-бирск, 1973, т.4, е2, с.20-31
24. Самарский А.А., Николаев Методы решения сеточных уравнений. М: Наука, 1978.
25. Шабат А.Б. Об уравнении Кортевега-де Фриза // ДАН СССР, 1973, т.211, еб, с.1310-1313
26. Бартон В., Кабрера Н., Франк Ф. Элементарные процессы роста кристаллов. М.: Наука, 1959, С. 299-358
27. Барьяхтар В. Г., Боровик А. Е., Кагановский Ю. С. О формировании макроступеней на вицинальных поверхностях в процессе роста кристаллов. Письма в ЖЭТФ, 1988, Т. 47, Вып. 8, С. 396-399.
28. Найфэ А. Х. Методы возмущений. - М.: Мир, 1976. - 456 с.
29. Misbah C., Pierre-Louis O., Saito Y. Crystal surfaces in and out of equilibrium: A modern view. Reviews of Modern Physics, 2010, V. 82, № 1, P. 981–1040.
30. Кукушкин С. А., Осипов А. В. Микроскопическая теория эпитаксиального роста. II. Нелинейные волны и образование структур. ФТТ, 1993, Т. 35, № 7, С. 1909 - 1915.
31. Луговцов А. А. Распространение нелинейных волн в газожидкостной среде. Точные и приближенные аналитические решения волновых уравнений. Прикладная механика и техническая физика, 2010, Т. 51, № 1, С. 54 - 61.

32. Кагановский Ю. С., Кружанов В. С., Кулик А. П. Релаксация формы неизометричных пор в монокристаллах NaCl. Кристаллография, 1989, Т. 34, Вып. 6, С. 1541 – 1547
33. Кагановский Ю. С., Кулик А.П. Кинетические характеристики массопереноса на вицинальных поверхностях NaCl. Поверхность. Физика, химия, механика, 1991, № 9, С. 16 –
34. Kaganovskii Yu. S., Kulyk O. P. Linear tension of mono- and double atomic height steps on (100) NaCl surface, VIIth European Conference on Surface Crystallography and Dynamics (ECSCD-7), Book of Abstracts, 2001, Abstract No P. 20, 51 (Leiden, The Netherland, 26-29 August 2001).
35. Чернов А. А. Структура поверхности и рост кристаллов. В кн.: Физико-химические проблемы кристаллизации. – Алма-Ата: Изд. КГУ, 1969, С. 8-40.
36. Гегузин Я. Е., Кружанов В. С. Движение и деформация полостей в монокристаллах NaCl в поле температурного градиента. ФТТ, 1973, Т. 15, Вып. 1, С. 165 – 171.
37. Латышев А. В., Асеев А. Л. Моноатомные ступени на поверхности кремния. УФН, 1998, Т. 168, № 10, С. 1117–1127.
38. Ranguelov B., Müller P., Metois J.-J., Stoyanov S. Step density waves on growing vicinal crystal surfaces – Theory and experiment. Journal of Crystal Growth, 2017, V. 457, P. 184–187.

Додаток

```
clear, clc
% константи:
a; b; c; d; e;

% кроки по вимірах:
dt =....;
dx = pi/48;

% сітка значень:
t = 0:dt:0.01;
x =-pi/2:dx:pi/2;

% заготовка з нулів:
U = zeros(length(t),length(x));

U(1,:) = sin(2*(x)); % початкові умови
xo = [0,1,0]; % граничні умови для u, du/dx, d2u/dx2

for i = 1:length(t)-1
   dudx = zeros(3,length(x));
   dudx(:,1) = xo;
   for j = 1:length(x)-1
      % dudx(1,i) -> u
      % dudx(2,i) -> du/dx
      % dudx(3,i) -> d2u/dx2
      d3udx3 = (b*dudx(2,j)-c*dudx(1,j)*dudx(2,j)+d*dudx(3,j))/e;
```

```
        dudx(3,j+1) = dudx(3,j) + d3udx3*dx;
        dudx(2,j+1) = dudx(2,j) + dudx(3,j)*dx;
        dudx(1,j+1) = dudx(1,j) + dudx(2,j)*dx;
    end
    dudt = dudx(1,:);
    U(i+1,:) = U(i,:) + dt*dudt;
end

surf(t,x,U')
figure
plot(x,U');grid on;
title('U(x,t)');
ylabel('U(x,t');
xlabel('Distance x');
ylabel('Distance x');
xlabel('Time t');
```