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
за освітньо-професійним рівнем «магістр»

«ДОСЛІДЖЕННЯ КІНЕМАТИЧНИХ ХВИЛЬ ПРИ РОСТІ КРИСТАЛІВ»

Виконав: ст. 2 курсу, групи НФ-61
Собченко А.В.
Спеціальність
105 Прикладна фізика та наноматеріали
Освітня програма:
Прикладна фізика нетрадиційної енергетики
Керівник: Кулик О.П.
Рецензент:

Харків – 2020

Перелік скорочень та абревіатур

КХ – кінематичні хвилі.

Лат. – латинська мова.

УХ – ударні хвилі.

КдФ – рівняння Кортевега – де Фріза.

ЛМ – алгоритм Левенберга — Марквардта.

ОР – алгоритм ортогональної регресії.

РРБ – розв’язок рівняння Бюргерса.

КХР – кінематичний хвильовий рух.

Реферат

Собченко Антоніна Володимирівна «Дослідження кінематичних хвиль при рості кристалів» (випускна робота магістра). – Харків: ХНУ імені В.Н. Каразіна, 2020. – 41 с.

Робота складається з вступу, трьох розділів, висновків; містить 20 рисунків, 4 таблиці, 2 додатки, список використаних джерел з 32 найменувань.

Проведений комп'ютерний аналіз розв'язку одновимірного рівняння Бюргерса, використовуючи пакети прикладних програм, для хвиль елементарних сходинок, що спостерігаються на поверхні кристалу кам'яної солі, близькій до (100).

Показано, що кінематичний хвильовий рух є характерним для густини елементарних сходинок на поверхні досліджуваного кристалу при рості з пари.

Ключові слова: кінематичний рух, хвилі сходинок, поверхня кристалу, кристал кам'яної солі.

Abstract

Sobchenko Antonina Volodymyrivna “Investigation of kinematic waves during crystal growth” (master's thesis) – Karazin Kharkiv National University 2020 – 41 p.

The work consists of an introduction, three chapters, and conclusions; contains 20 drawings, 4 tables , 2 appendices, list of sources with 32 items.

A computer analysis of the solution of the one-dimensional Burgers equation has been carried out using application packages, for the waves of elementary steps observed on the surface of a rock salt crystal close to (100).

It has been shown that the kinematic wave motion is a characteristic of the density of elementary steps on the surface of the investigated crystal during growth from steam.

Keywords: kinematic motion, step waves, crystal surface, rock salt crystal.

ЗМІСТ

Перелік скорочень та абревіатур 4
ВСТУП 8
РОЗДІЛ 1 КІНЕМАТИЧНИЙ ХВИЛЬОВИЙ РУХ 9
1.1 Два основні класи хвильових рухів. 9
1.2 Ударні хвилі. 13
1.3 Рівняння Бюргерса. 15
1.4 Ударні хвилі в природі і техніці. 16
РОЗДІЛ 2 КІНЕМАТИЧНІ ХВИЛІ ГУСТИНИ СХОДИНОК НА КРИСТАЛІЧНИХ ПОВЕРХНЯХ 20
2.1 Кінематичні хвилі і макросходинки. 20
2.2 Ударні хвилі і морфологічні нестійкості. 23
2.3 Самоупорядкований ріст нанокристалів на макросходинках. 26
РОЗДІЛ 3 КІНЕМАТИЧНІ ХВИЛІ НА ВІЦИНАЛЬНИХ ПОВЕРХНЯХ ЛУЖНО-ГАЛОЇДНИХ КРИСТАЛІВ 28
3.1 Методика експерименту 28
3.2 Аналіз розв’язку рівняння Бюргерса. 34
ВИСНОВКИ 38
Список використаних джерел 39

ВСТУП

Кінематичні хвилі є важливим математичним інструментом для розуміння хвильових явищ, пов'язаних з ними. Вони можуть мати місце як у явищах, звично «хвильових» у розумінні людей – океанських хвилях, селевих, грязьових потоках, повенях, паводках – так і у зовсім інших галузях – хімії (хроматографії), потоках транспорту [1], столярстві (при фрезеруванні на невисоких швидкостях [2]), при сейсмологічній розвідці [3, 4], та інше.

Зокрема, стосовно теми даної роботи, за допомогою моделі КХ може бути описаний процес росту поверхонь кристалів. Кристалічна поверхня, зрізана під дуже малим кутом, представляє собою сходинки висотою, порівняною з параметрами решітки, і називається віцинальною поверхнею (від лат. vicinalis, vicinus — «сусідній, близький, подібний», що відображає малий кут зрізу і близькість сходинок одна до одної у макромасштабі). Через КХ досліджується щільність цих сходинок, і її зміна з часом в залежності від початкових умов і умов середовища. Вперше подібні дослідження проводилися Франком [5], а також Кабрерою і Вермілі [6] у 50-ті роки XX сторіччя.

Віцинальні поверхні мають незвичайні властивості, особливо при низьких температурах, коли змінюється характер їх руху. Виявлення закономірностей виникнення, розмноження і зникнення сходинок, їх взаємодії одина з одною, домішками і дислокаціями, дозволяє вивчати ці механізми.

Вищеназвані поверхні використовуються для вирощування на них 1D і 2D квантових структур з властивостями які, в свою чергу, кардинально відрізняються від 3D структур тих самих матеріалів. Наприклад, поверхня, покрита нанодротами металу, має анізотропну електропровідність.

В даній роботі розглядається математичний опис кінематичного хвильового руху (Розділ 1), зокрема на кристалічних поверхнях (Розділ 2). І проводиться аналіз ударних хвиль на кристалі NaCl з використанням різних програмних продуктів (Origin 2019b, OriginLab, і Matlab R2016a, MathWorks).

РОЗДІЛ 1
КІНЕМАТИЧНИЙ ХВИЛЬОВИЙ РУХ

1.1 Два основні класи хвильових рухів.

В рамках даної роботи будемо уявляти хвилю як будь-який помітний сигнал, що рухається від однієї частини середовища до іншої з деякою швидкістю. Такий сигнал може бути збуренням будь-якого вигляду, наприклад максимумом величини або її різкою зміною за умови що збурення чітко виділене і у будь-який момент часу можна визначити його місцезнаходження. Цей сигнал може спотворюватися, змінювати величину і швидкість, але при цьому повинен залишатися помітним.

Можна визначити два основних класи хвиль. Перший описується математично (гіперболічними рівняннями в частинних похідних) – такі хвилі будуть називатися гіперболічними. Другий клас не характеризується так однозначно але, оскільки його найпростіші представники – диспергуючі хвилі в лінійних задачах, у роботі Уізема [1] усі хвилі такого класу називаються диспергуючими.

Даний поділ на класи не є вичерпним. У випадках деяких хвильових рухів проявляються обидва типи поведінки і класи перетинаються, також існують виключення, що не відповідають жодному з них.

При розгляді гіперболічних хвиль за основу може братися хвильове рівняння:

$$\varphi_{tt} = c_0^2 \nabla^2 \varphi \qquad (1.1).$$

Простішим є рівняння:

$$\varphi_t + \mathrm{c}_0 \varphi_x = 0 \qquad (1.2).$$

Поняття диспергуючих хвиль пов’язане скоріше з певним виглядом розв’язків, ніж з типом рівняння. Лінійна диспергуюча система – це будь-яка система, що має розв’язок вигляду

$$\varphi = a \cos(\varkappa x - \omega t) \qquad (1.3),$$

де частота ω – це відома функція хвильового числа, що визначається вибором системи. Фазова швидкість в даному випадку дорівнює $\omega(\varkappa)/\varkappa$, і хвилі звичайно називають диспергуючими, якщо ця фазова швидкість не стала, а залежить від $\varkappa$. Такий термін вказує на те, що більш загальний розв'язок є сумою мод вигляду (1.3) з різними значеннями $\varkappa$ (в найзагальнішому випадку ця сума переходить у інтеграл Фур'є). Якщо фазова швидкість $\omega/\varkappa$ залежить від $\varkappa$, тобто якщо $\omega \neq c_0\varkappa$, де c_0 - деяка стала, то моди з різними $\varkappa$ будуть поширюватися з різними швидкостями і хвиля буде диспергувати (розповзатися). Зручно дещо змінити це визначення і називати хвилю вигляду (1.3) диспергуючою, якщо $\omega'(\varkappa)$ не стала, тобто $\omega''(\varkappa) \neq 0$.

Слід зазначити, що функція (1.3) є також рішенням гіперболічного рівняння (1.2) з $\omega = c_0\varkappa$ або рівняння (1.1) з $\omega = \pm c_0\varkappa$, але ці випадки виключаються з диспергуючого класу умовою $\omega'' \neq 0$. Однак можна привести приклади дійсного перетину класів, коли рівняння виявляються гіперболічними, і в той же час мають рішення вигляду (1.3) з нетривіальними дисперсійними відношеннями $\omega = \omega(\varkappa)$. Один з таких прикладів - рівняння Клейна – Гордона:

$$\varphi_{tt} - \varphi_{xx} + \varphi = 0 \qquad (1.4),$$

яке є гіперболічним і має рішення (1.3) з $\omega^2 = \varkappa^2 + 1$. Така двояка поведінка зустрічається досить рідко.

Хвилі океані є диспергуючими і описуються рівнянням Лапласа з незвичайними граничними умовами на вільній поверхні.

Хвильове рівняння (1.1) зустрічається в акустиці, теорії пружності і електромагнетизмі, і його основні властивості і рішення вперше були вивчені у цих областях класичної фізики. Однак в усіх цих випадках воно не дає повного опису процесу.

В акустиці виходять з рівнянь для стисливої рідини. Навіть не враховуючи в'язкість і теплопровідність це система нелінійних рівнянь відносно вектора швидкості u, щільності ρ, і тиску p. Акустика описується

наближеною лінійною теорією з малими збуреннями рівноважного стану, у якому $u = 0$, $\rho = \rho_0$, $p = p_0$. Рівняння лінеаризуються за рахунок збереження тільки членів першого порядку по малим величинам u, $\rho - \rho_0$, $p - p_0$, тобто за рахунок відкидання всіх членів зі степенями малих величин вище першої і з їх добутків. У цьому випадку і кожна компонента вектора u, і збурення $\rho - \rho_0$, $p - p_0$, задовольняють хвильовому рівнянню (1.1).

Найбільш цікавим явищем, яке описується лише лінійною теорією, виявляються ударні хвилі, що представлять собою різкі скачки тиску, густини і швидкості, наприклад ударні хвилі при сильному вибуху і звукові удари літаків. Для їх передбачення потрібно було розвинути весь складний апарат теорії нелінійних гіперболічних рівнянь, а для повного розуміння знадобилися аналіз ефектів в'язкості і деякі аспекти кінетичної теорії газів.

Таким чином, коло основних ідей стає ясним вже в газовій динаміці, проте вивчення більш складних випадків вимагає розвитку кінетичної теорії. Основна математична теорія, розвинена в газовій динаміці, підходить для будь-яких систем, що описуються нелінійними гіперболічними рівняннями. Вона використовувалася і уточнювалася в багатьох інших областях.

В теорії пружності класична хвильова теорія також виникає після лінеаризації. Однак навіть в лінійному випадку ситуація виявляється більш складною, оскільки вихідна система рівнянь по суті приводить до двох хвильових рівнянь вигляду (1.1) для двох функцій φ_1, φ_2, і двох швидкостей c_1, c_2, що відповідають руху поздовжньої і поперечної хвиль (хвилі стиску і хвилі зсуву). Функції φ_1 і φ_2 пов'язані належними граничними умовами, тому в загальному випадку задача набагато важче, ніж просто розв’язання рівняння (1.1). На вільній поверхні пружного тіла виникає нове ускладнення, оскільки можлива поява поверхневих хвиль - так званих хвиль Релея, що наближаються до диспергуючих хвиль і поширюються зі швидкістю проміж c_1і c_2. В силу цих додаткових ускладнень нелінійна теорія не була розвинена у теорії пружності в такій мірі, як у газовій динаміці.

У електромагнетизмі також є ускладнення, пов'язане з тим, що різні компоненти електричного і магнітного полів, що задовольняють рівнянням (1.1), пов’язані додатковими рівняннями і граничними умовами.

Найпростішим розв’язком рівняння (1.1) є одновимірне рівняння для плоских хвиль:

$$\varphi_{tt} - c_0^2 \varphi_{xx} = 0 \qquad (1.5).$$

Ввівши нові змінні

$$\alpha = x - c_0 t, \beta = x + c_0 t \qquad (1.6),$$

(1.5) можна переписати так:

$$\varphi_{\alpha\beta} = 0 \qquad (1.7).$$

Останнє рівняння інтегрується і має загальний розв’язок:

$$\varphi = f(\alpha) + g(\beta) = f(x - c_0 t) + g(x + c_0 t) \qquad (1.8),$$

де f і g – довільні функції.

Цей розв'язок є комбінацією двох хвиль: одна з формою, що описується функцією f і рухається вправо зі швидкістю c_0, а інша з формою, що описується функцією g і рухається вліво з тією самою швидкістю. Ще простіше було б у випадку лише однієї хвилі. Потрібне для цього рівняння може бути отримане факторизацією рівняння (1.5):

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - c_0 \frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial}{\partial t} + c_0 \frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi = 0 \qquad (1.9)$$

і залишенням тільки одного з множників. Лишивши

$$\varphi_t + c_0 \varphi_x = 0 \qquad (1.10),$$

отримаємо загальний розв’язок:

$$\varphi = f(x - c_0 t) \qquad (1.11).$$

Це найпростіша задача гіперболічних хвиль. Хоча класичні задачі приводять до рівняння (1.5), для багатьох хвильових рухів в дійсності виходить рівняння (1.10). Як приклади можна вказати паводкові хвилі, хвилі в льодовиках і в потоках транспорту, а також деякі хвильові явища в хімічних

реакціях. Так само як в класичних задачах, вихідні формулювання призводять до нелінійних рівнянь, найпростіше з яких має вигляд

$$\varphi_t + c(\varphi)\varphi_x = 0 \qquad (1.12),$$

де швидкість поширення $c(\varphi)$ є функцією локального збурення φ.

Основний наслідок нелінійності полягає в «перекиданні» хвиль і виникненні ударних хвиль.

Рівняння першого порядку (1.12) називається квазілінійним, так як воно нелінійне по φ, але лінійне по похідним φ_t і φ_x. У загальному нелінійному рівнянні першого порядку для функції $\varphi(x, t)$ допускається довільний функціональний зв'язок між φ, φ_t і φ_x.

В рамках рівняння (1.12) ударні хвилі з'являються як розриви функції φ. Однак при виводі рівняння (1.12) зазвичай використовують наближення, не справедливі в умовах виникнення ударних хвиль. У газовій динаміці відповідне наближення полягає в нехтуванні в'язкістю і теплопровідністю. Ті ж математичні ефекти можна продемонструвати на прикладах більш простих, ніж газова динаміка, в якій вони вперше були розвинені. Найпростішим є рівняння

$$\varphi_t + \varphi\varphi_x = \nu\varphi_{xx} \qquad (1.13),$$

яке називають рівнянням Бюргерса. На цьому типовому прикладі можна досить детально досліджувати різні питання, а потім з достатньою достовірністю використовувати результати в інших випадках, коли повне рішення отримати неможливо і доводиться обмежуватись наближеними методами [1].

1.2 Ударні хвилі.

Якщо знехтувати в'язкістю і теплопровідністю, у рівнянь газової динаміки з’являються розв’язки, що «перекидаються» [1], с. 30. Тоді перед початком «перекидання» в’язкістю і теплопровідністю вже не можна знехтувати. Параметри «течії» в області УХ різко змінюються. У розширеній

теорії без в'язкості ця область ідеалізовано представляється поверхнею розриву, з умовами, що пов'язують стрибки значень параметрів «течії».

У багатьох задачах на розповсюдження хвиль розглядається неперервний розподіл певної речовини або деякий стан середовища. І можна визначити, в одномірному випадку, щільність *ρ(x, t)* на одиницю довжини і витрату *q(x, t)* в одиницю часу. Далі можна визначити швидкість течії *v(x, t)*:

$$v = q/\rho \qquad (1.14),$$

Припускаючи, що досліджувана речовина (або стан середовища) зберігається, можна вважати, що швидкість зміни його повної кількості в будь-якому інтервалі $x_1 > x > x_2$ має компенсуватися сумарним потоком через перетини x_1 і x_2, тобто

$$\frac{d}{dt}\int_{x_2}^{x_1} \rho(x,t)dx + q(x_1,t) - q(x_2,t) = 0 \qquad (1.15).$$

Якщо *ρ(x, t)* має неперервні похідні, можна перейти до границі $x_1 \to x_2$ і отримати закон збереження

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \qquad (1.16).$$

Найпростіша задача про розповсюдження хвиль виходить у випадку, якщо виходячи з теоретичних і емпіричних міркувань можна встановити деякий зв'язок між q і ρ. Якщо такий зв'язок записати у вигляді

$$q = Q(\rho) \qquad (1.17),$$

то рівняння (1.16) і (1.17) утворюють повну систему.

Задачі, які розглядаються, виходячи з рівняння стану (1.16), згідно з теорією Лайтхіла і Уізема [7], відносяться до кінематичних хвиль – на відміну від звичайних звукових і пружних хвиль, що суттєво залежать від того, яким чином із законів динаміки визначається прискорення.

Коли настає «перекидання», припущення (1.17) може не бути справедливим. Але все ще виконується закон збереження (1.16).

Неперервна хвиля перекидається і приводить до розриву, якщо швидкість розповсюдження *c* зменшується зі збільшенням *x*. УХ, що описується таким чином, викликає збільшення швидкості с, що є надзвуковою для спостерігача, що знаходиться за хвилею.

Для УХ у газовій динаміці це означає, що при переході газу через УХ збільшується його ентропія. Тобто перехідний процес в УХ незворотній, хоча в деяких задачах не існує очевидного аналога ентропії.

1.3 Рівняння Бюргерса.

Рівняння (1.13) (або (1.18)), введене вперше Г. Бейтменом [8], було визначене Бюргерсом, як найпростіше рівняння, відображаюче як ефекти ненінійного розповсюдження, так і ефекти дифузії:

$$c_t + cc_x = \nu c_{xx} \qquad (1.18),$$

У [1] (с. 100-104) показано, що з (1.18) можна повністю виключити нелінійний член нелінійною заміною Коула-Хопфа [9, 10]:

$$c = -2\nu\frac{\varphi_x}{\varphi} \qquad (1.19).$$

Після чого отримується:

$$\varphi_t = \nu\varphi_{xx} \qquad (1.20),$$

що є рівнянням теплопровідності. І його розв'язок, з розривними ударними хвилями, що відповідають умові

$$U = \frac{1}{2}(\varphi_1 + \varphi_2), \qquad \varphi_2 > U > \varphi_1 \qquad (1.21),$$

є розв'язком (1.18).

Якщо взяти сукупність джерел хвилі, розміщених на відстані λ один від одного, можна отримати рівняння періодичної хвилі, розписане у [1] (с. 111-113):

$$\varphi \sim \frac{8\pi\nu}{\lambda}\exp\left(-\frac{4\pi^2\nu t}{\lambda^2}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) \qquad (1.22).$$

що є розв'язком (1.20).

1.4 Ударні хвилі в природі і техніці.

У роботі Дж. Бернала [11] і у наступній за нею статті В. Грінфа [12] розглядаються ударні хвилі, що утворюються після вибуху фугасної бомби. Вони порівнюються зі звичайними звуковими хвилями, які являють собою послідовність періодично повторюваних ущільнень і розріджень середовища, що поширюються зі швидкістю звуку с (≈ 330 м/с в повітрі, ≈ 1400 м/с у воді, ≈ 5000 м/с у сталі).

Графік зміни тиску з часом в певній точці звукової хвилі нагадує синусоїду (Рис. 1.1). Різниця тиску при наявності звуку і його відсутності звичайно не досягає десятої долі атмосфери.

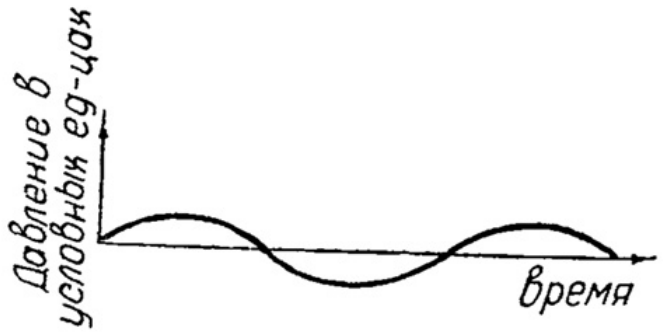


Рис. 1

Рисунок 1.1 – Зміна тиску звукової хвилі [12]

На відміну від звичайної звукової, ударна хвиля має надзвичайно різкий і крутий передній фронт (Рис. 1.2). Для спостерігача, на якого набігає ударна хвиля, надлишковий тиск, що дорівнює нулю до приходу фронту, потім раптово досягає максимального значення. Далі, як видно на Рис. 1.2, тиск падає і інтенсивність хвилі швидко зменшується. Це пояснюється збільшенням площі фронту хвилі при віддаленні від джерела, а також поглинанням енергії хвилі, пов'язаним з сильним нагріванням газу в області за хвильовим фронтом. Температура безпосередньо за фронтом може досягати багатьох сотень градусів. Тому газ після проходження хвилі світиться.

Якщо ударна хвиля поширюється у вибуховій суміші, то, за певних умов, вона вже не згасає, так як її енергія відновлюється за рахунок теплоти, що виділяється при згорянні суміші. У цьому випадку говорять про «детонаційну», або «вибухову хвилю».

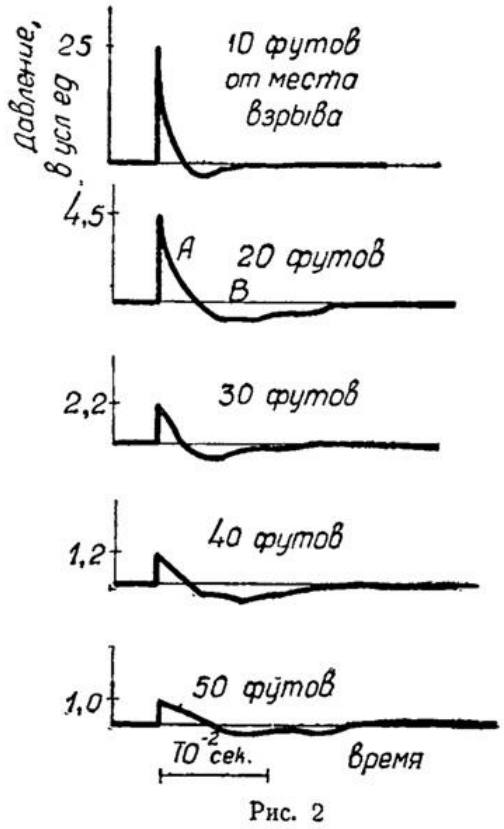


Рис. 2

Рисунок 1.2 – Зміна тиску після вибуху фугасної бомби [11]

Багато ефектів вибуху, які іноді здаються дуже дивними, пояснюються умовами поширення ударних хвиль уздовж вулиці. Подібно до інших хвиль, ударні відбиваються від перешкод і, зокрема, від стін будівель. Тому в результаті багаторазового відбиття уздовж вулиці біжить хвиля з відомою періодичністю. Вдалині від місця вибуху, де інтенсивність хвилі недостатня для видавлювання стекол, в силу цієї періодичності окремі скла все ж розлітаються. А саме ті, власна частота коливань яких близька до частоти хвилі.

За фронтом ударної хвилі повітря не нерухоме, але має деяку швидкість. Пов'язаний з цим рухом газу вітер може збивати людей з ніг, скидати легкі предмети і т. ін.

Третій вторинний ефект, пов'язаний з поширенням ударних хвиль, спостерігається у вузьких вулицях. Хвиля стиснення, поширюючись уздовж вулиці, виганяє з неї повітря. Утворене таким чином розрідження повітря на вулиці викликає виривання вікон і дверей назовні, причому ця дія хвилі може бути більш руйнівним, ніж первинний удар хвильового фронту.

Цікава поведінка ударної хвилі при обгинанні різних предметів. Звичайні звукові хвилі мають часто довжину хвилі, що дорівнює кільком метрам або навіть десяткам метрів. Такі довгі хвилі здатні огинати перешкоди, і тому може бути чутний звук позаду невеликих стін і будинків. Звукові хвилі загинаються навколо країв перешкод і таким чином не дають різкої звукової «тіні». Короткі, а в ще більшій мірі так звані ультразвукові хвилі, навпаки, дають «тінь» від предметів звичайних розмірів, так само як і світло. Ударна хвиля не має будь-якої певної довжини. Однак можна довести строго математично, що частина А (горб, див. вище Рис. 1.2) ударної хвилі, в якій має місце ущільнення повітря, може бути представлена як результат накладення досить коротких хвиль (ширина області стиснення, а отже і довжина утворюють цю область хвиль - близько метра і менше). Частина В хвилі, в якій має місце розрідження, характеризується значно більшими довжинами хвиль. Зі сказаного вище випливає, що вже за порівняно невеликі перешкоди проникає лише частина В хвилі. Дія цієї розрідженої частині значно менше ефектів від частини А. Тому практично вже невеликі стінки, ями і т. ін. оберігають від дії ударних хвиль. Відповідно до цього в Англії перед дверима притулків іноді зводиться додаткова стінка [12].

Вище розглядалися ударні хвилі, що поширюються в повітрі. Хвилі в деякому сенсі східного типу поширюються також в землі і інших твердих тілах. Їх дія подібна дії землетрусів.

В книзі Джеймса Трефіла [13] розглядаються ударні хвилі, породжені надзвуковим літаком. Рух літака на дозвукових швидкостях створює акустичні хвилі, що поширюються як звичайні кола по воді, і ми чуємо гул літака. Якщо ж літак летить на надзвуковій швидкості, джерело кожної наступної хвилі виявляється віддаленим по траєкторії руху літака на відстань, що перевищує ту, яку до цього моменту встиг покрити фронт попередньої акустичної хвилі. Таким чином, хвилі вже не розходяться концентричними колами, їх фронти перетинаються і взаємно посилюються в результаті резонансу, що має місце на лінії, спрямованій під гострим кутом назад по відношенню до траєкторії руху (Рис. 1.3). І так відбувається безперервно в процесі всього польоту, в результаті чого літак залишає за собою шлейф резонансних хвиль уздовж конічної поверхні, в вершині якої знаходиться. Сила звуку в цьому конічному фронті значно перевищує звичайний шум літака в повітрі, а сам цей фронт називається ударною хвилею.

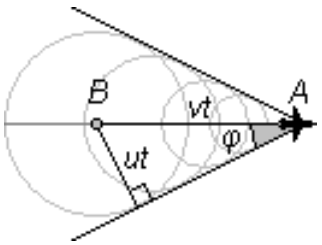


Рисунок 1.3 – «Конус Маха» надзвукового літака [13]

Конус фронта хвилі літака називається конусом Маха. Кут φ між утворюючими конуса і його віссю визначається формулою:

$$\sin\varphi = u/v \qquad (1.23),$$

де u – швидкість звуку в середовищі, v – швидкість літака. Відношення швидкості рухомого об'єкту до швидкості звуку в середовищі називається числом Маха: $M = v / u$. (Відповідно, $\sin\varphi = 1 / M$.) У літака, що летить зі швидкістю звуку, $M = 1$, а при надзвукового – більше 1.

РОЗДІЛ 2
КІНЕМАТИЧНІ ХВИЛІ ГУСТИНИ СХОДИНОК НА КРИСТАЛІЧНИХ ПОВЕРХНЯХ

2.1 Кінематичні хвилі і макросходинки.

Як було згадано у п. 1.1, кінематичний хвильовий рух виникає у випадку, коли має місце функціональне співвідношення, що пов'язує щільність і потік деякої фізичної величини, кількість якої зберігається [1, 7, 14].

У випадку кристалічної поверхні кінематична хвиля – це згущення і розрідження елементарних сходинок. Сходинки рухаються вздовж поверхні кристалу зі швидкістю, що залежить від їх локальної щільності. Ділянки з високою густиною елементарних сходинок називають макросходинками. Кінематичні хвилі щільності сходинок і макросходинки досліджувалися, наприклад, на кристалах паратолуідіна [15]. При цьому реєструвалася інтенсивність монохроматичного світла, що проходить через кристал, а потім через вузьку щілину, розташовану паралельно торцям сходинок у поляризаційному мікроскопі. Фотоелектронний підсилювач фіксував зміну інтенсивності сигналу при проходженні сходинки в області видимості щілини. Так могли бути зафіксовані сходинки висотою ~ 20 – 30 А.

На Рис.2.1 джерело росту оточене хвилями, що утворилися на схилах віцинального пагорбу.

Щоб зрозуміти механізм утворення кінематичних ударних хвиль, розглянемо профіль зростаючої пошарово поверхні, на якій в початковий момент часу утворилося згущення сходинок AB (Рис. 2.2, а). Наприклад, через тимчасовий зріст пересичення в точці утворення згущення. Швидкість сходинок залежить від відстані між ними. Ділянка з найбільшою щільністю сходинок має рухатися з найменшою швидкістю. На Рис. 2.2, б, сходинки, розташовані зліва від A, дожинають згущення і утворюють ребро C, приєднуючись до нього.

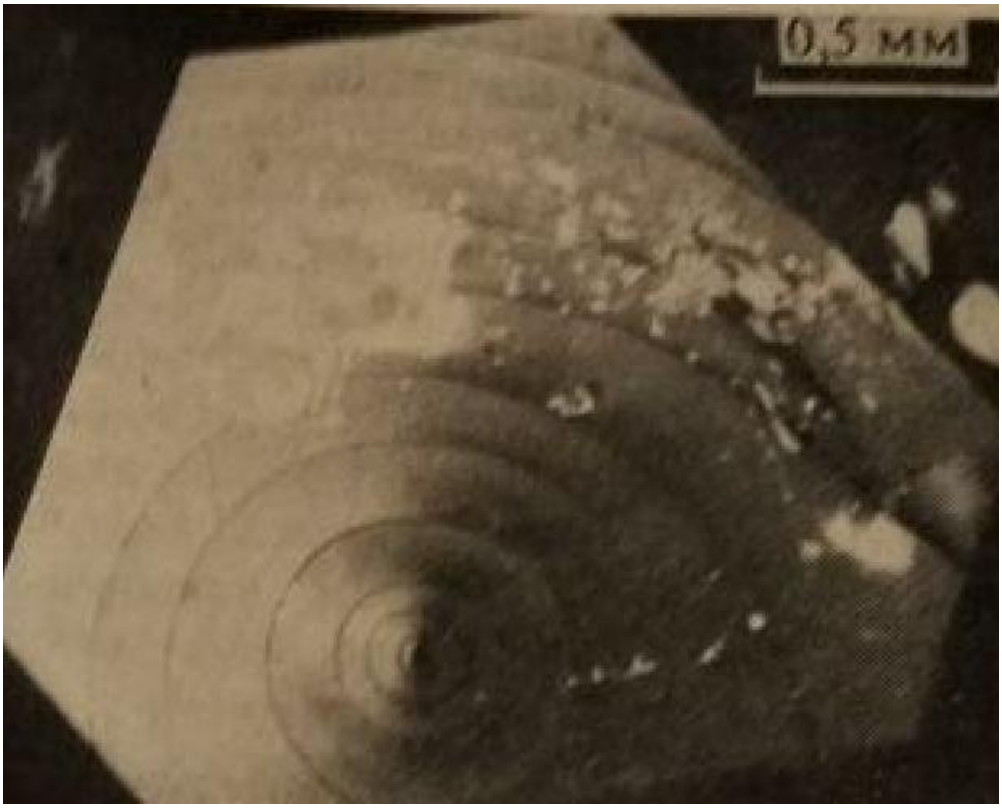


Рисунок 2.1 – Концентричні кола на кристалі $NaBrO_3$ [16]

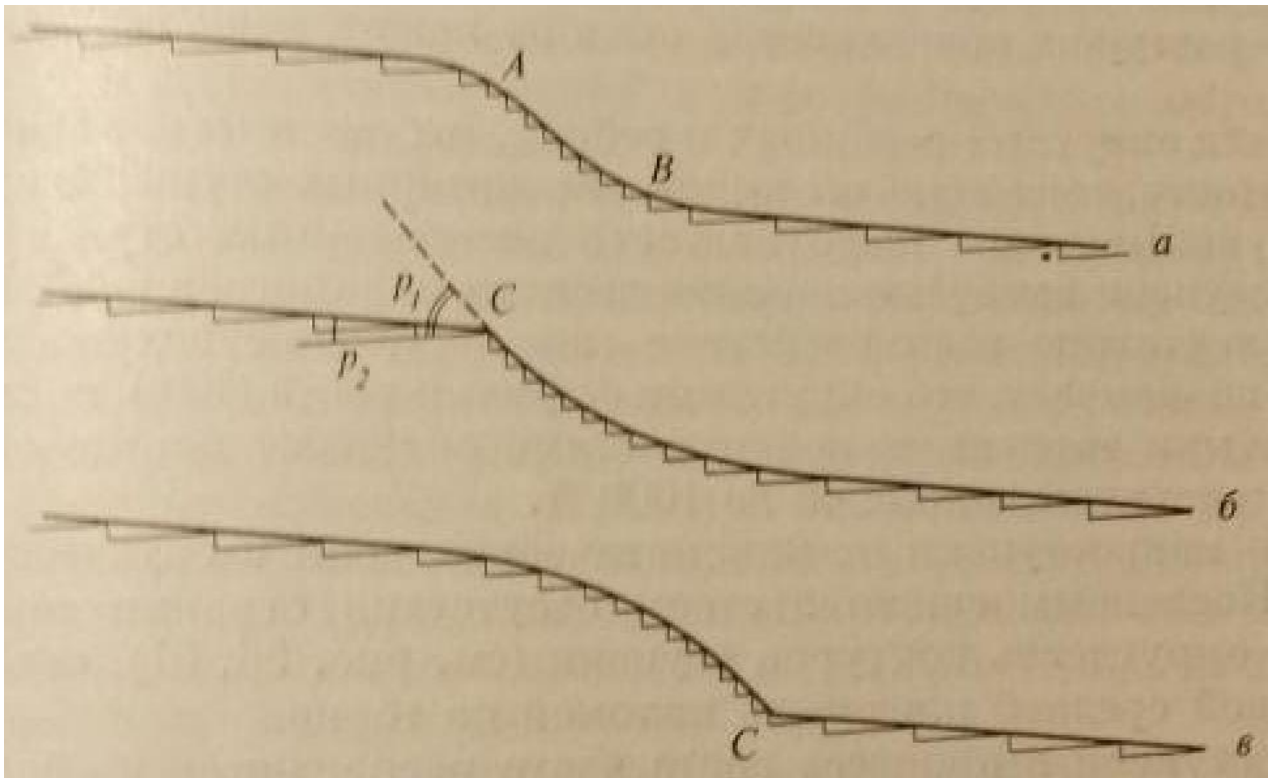


Рисунок 2.2 – Утворення хвиль щільності сходинок [16]

На ребрі схил поверхні, тобто щільність сходинок, змінюється стрибком – це і називають ударною хвилею на віцинальній поверхні. Кінематична хвиля розповсюджується по поверхні зі швидкістю $(R_1 – R_2) / (p_1 – p_2)$, де p_1 і p_2 – тангенси кутів нахилу поверхні θ_1 і θ_2 по обидві сторони ребра С ($p_{1,2} \approx \theta_{1,2}$, бо кути малі), а R_1 і R_2 – відповідні швидкості [16]. З часом швидкість хвилі і величина стрибка $p_1 – p_2$ зменшуються, і зрештою хвиля має зникнути, якщо не стабілізується домішками або іншими факторами. Звичайно хвилі на сусідніх пагорбах не встигають затухати до анігіляції зі сходинками протилежного знаку на сусідніх пагорбах росту. На усіх пагорбах росту однієї грані звичайно зберігається одна і та сама послідовність великих і малих кінематичних хвиль і відстаней між ними. Це означає, що вони визиваються флуктуаціями температури і концентрації в об’ємі середовища через конвекцію, погане термостатування і т. ін., що виникають одночасно над різними ділянками однієї грані або навіть над усіма гранями кристалу. Іноді утворюються кінематичні хвилі, у яких ребро знаходиться попереду хвилі (див. вище Рис. 2.2, в). Така конфігурація відповідає взаємному прискоренню сходинок.

Окрім макросходинок, отриманих кінематичними хвилями, розрізняють «істинні» макросходинки – ті, які утворюються гранями з простими кристалографічними індексами [17]. Такі макросходинки, в свою чергу, теж ростуть пошарово.

Найбільш загальною причиною утворення істинних макросходинок є анізотропія поверхневої енергії. Якщо рівноважна форма містить макроскопічно гострі ребра і вершини, то при рості таких кристалів на сингулярних гранях повинні утворюватися макросходинки. Напроти, якщо кристал рівноважної форми в даних умовах (при даному складі середовища, температурі, тиску) має макроскопічно гострі ребра і вершини, то на його поверхнях не може бути істинних макросходинок.

Для елементарних сходинок має місце «шорсткість», утворювана флуктуаціями атомів при температурі більше абсолютного нуля [18]. Такі флуктуації мають розмивати сходини висотами порядку десятка параметрів ґратки і менше, коли колективна взаємодія ще не дуже суттєва. Але округлі форми росту і, відповідно, шорсткі торцеві поверхні іноді мають сходини і кристали товщиною до 1000 А [16].

В оптичному мікроскопі важко відрізнити істинні макросходинки від кінематичних хвиль. Опосередкованим свідоцтвом кінематичної хвилі є округлість контурів сходинки, що свідчить про велику щільність сходин.

Макросходинки у процесі росту часто розпадаються на більш тонкі сходинки. І навпаки, маленькі сходинки, маючи більшу швидкість росту, дожинають великі і зливаються з ними. Таким чином на поверхні росту існує широкий спектр висот сходинок, і їх середня висота залежить від пересичення, наявності домішок і інших умов росту.

2.2 Ударні хвилі і морфологічні нестійкості.

Коли поверхня неврівноважена, утворюються два типи нестійкостей – викривлення (Рис. 2.3) і групування сходинок. А також комбінування цих двох типів. Групування може викликати викривлення (навіть якщо відстань між сходинками стала, і сходинка стабільна) [19]. Викривлення також може породжувати групування.

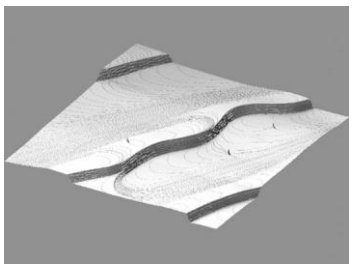


Рисунок 2.3 – Викривлення елементарних сходинок [19]

Групування може бути викликане нестабільністю, або бути результатом кінематичної хвилі [5]. Існує чітке розмежування між морфологічною нестабільністю і кінематичною хвилею.

Так як в кінематичній хвильовій теорії потік сходинок (Q) залежить тільки від їх локальної щільності (ρ), похідну потоку від щільності (Q` = dQ / dρ) ми можемо розглядати як локальну швидкість хвиль. Так як Q це потік, він може бути записаний у загальній формі Q = Vρ, зі швидкістю переміщення сходинок V, яка звичайно залежить від ρ. Спочатку припустимо, що V стала, $\partial_t \rho = -V_z \rho$. Це рівняння має загальний розв'язок ρ = f (z – Vt), тобто якщо ми почнемо з початкової форми хвильового пакету, він рухатиметься, зберігаючи форму. Ситуація зовсім інша, якщо V не є сталою або Q є нелінійною функцією ρ. У цих випадках локальні швидкості відрізняються при різній щільності, і хвильовий пакет буде знищений з часом, як показано на Рис. 2.4.

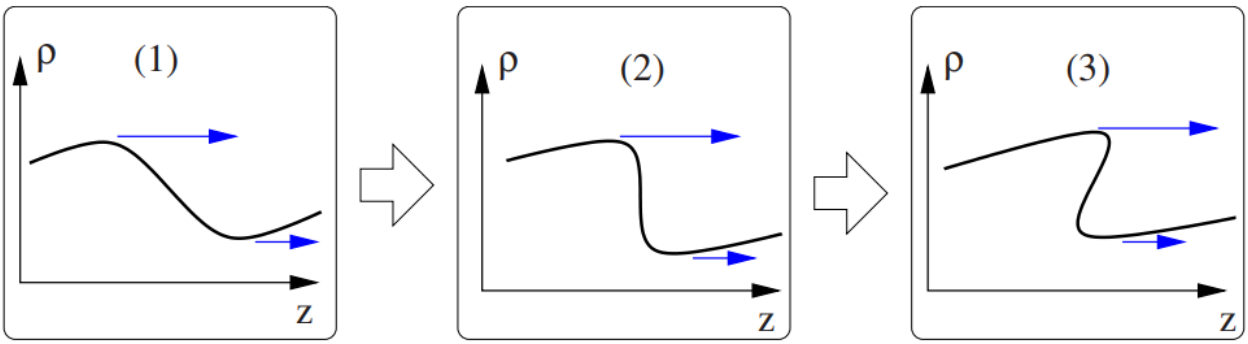


Рисунок 2.4 – Утворення УХ при збільшенні швидкості сходинок із збільшенням щільності [19]

Ударні фронти або ударні хвилі виникатимуть способом, подібним до того, як розбиваються хвилі на березі моря. У роботі Уізема [1] розглядаються багато процесів, які можна описувати ударними хвилями - рух транспорту, повені, льодовики, процеси хімічного обміну та осаду в ріках.

У випадку віцинальних поверхонь ці хвилі призводять до швидкої зміни щільності кроків. Якщо Q`` > 0, групи сходинок "опуклі", якщо Q`` < 0 - "ввігнуті" (Рис. 2.5). На рисунку видно що, оскільки УХ відповідає різкій зміні

щільності (наприклад, зміні високої щільності на низьку на дуже малому відрізку довжини) –УХ це не самі групи, а їх межі.

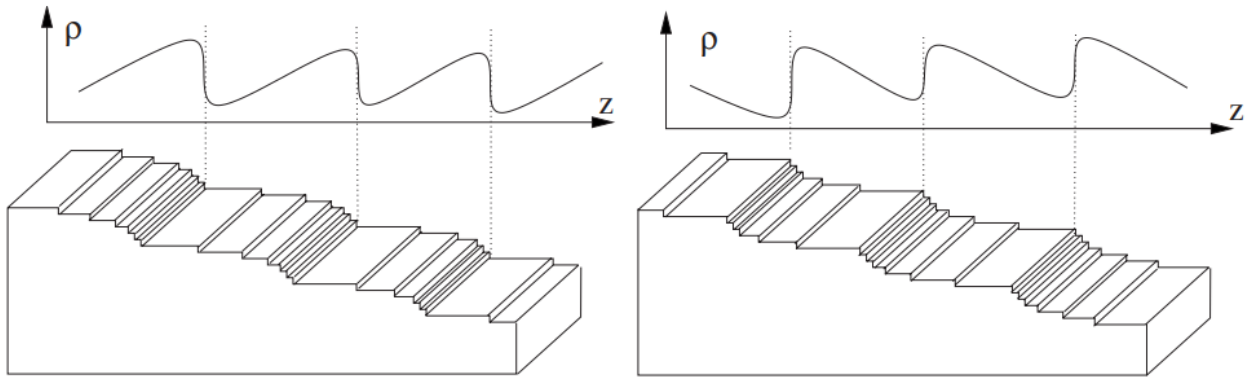


Рисунок 2.5 – Викривлення елементарних сходинок [19]

Зберігаючи кількість сходинок, що проходять через УХ, швидкість УХ:

$$V_{\text{УХ}} = (Q_+ - Q_-)/(\rho_+ - \rho_-) \qquad (2.1),$$

де індекси ± стосуються величин безпосередньо зліва чи справа від УХ.

У простій моделі, у якій швидкість сходинок лінійно залежить від щільності кроку, $V_{УХ} = V_0(1 + k_0\rho)$, потік сходинок - $Q = V_{УХ}$ і $Q`` = 2k_0V_0$. З рівняння (2.1):

$$V_{\text{УХ}} = V_0[1 + k_0(\rho_+ + \rho_-)] \qquad (2.2),$$

Тому під час росту, сублімації чи травлення ми очікуємо утворення УХ, які рухаються швидше середнього руху сходинок $\sim V_0[1 + k_0(\rho_+ + \rho_-) / 2]$, якщо $k_0 > 0$, та повільніше, якщо $k_0 < 0$.

Для того, щоб проаналізувати профіль щільності на відрізку з УХ, ми включаємо вклади потоку через просторову зміну щільності. Таким чином, ми перестаємо вважати, що Q залежить лише від ρ. У випадку довгих хвиль перший очікуваний додатковий член - $\partial_z\rho$. Отримується $-Q = -Q0 + \delta\rho Q1 + \delta\rho 2Q2 / 2 + D\partial z\delta\rho$, де $\delta\rho = \rho - \rho_0$ і Q_i – константи. Звідси випливає рівняння Бюргерса:

$$\partial_t\delta\rho = D\partial_{zz}\delta\rho + Q_2\delta\rho\partial_z\delta\rho \qquad (2.3),$$

де D представляє аналог в’язкості, і має бути позитивним. Рівняння Бюргерса призводить до УХ, які зливаються внаслідок того, що хвилі різного розміру рухаються з різною швидкістю. Середня кількість УХ на одиницю довжини зменшується з часом [1], відповідно $t^{-2/3}$. Також, профіль щільності стає з часом плавніше, як $\langle \delta\rho^2 \rangle^{1/2} \sim t^{-1/3}$. Віцинальні поверхні повинні асимптотично відновлювати плавність відповідно до кінематичної теорії хвиль. Якщо зробити підстановку $\partial z\zeta = \delta\rho$, отримаємо з рівняння Бюргерса рівняння Кортевега – де Фріза для ζ.

Рівняння КдФ використовується, зокрема, при дослідженні гравітаційних хвиль на мілководді. Рівняння допускає стаціонарне рішення у вигляді солітона [20], який стабільно рухається, зберігаючи форму. Точніше, існує рішення рівняння КдФ у вигляді δρ(z, t) = U(z – ct), де c – швидкість солітона, а U дано у [1]:

$$U = -3c\ sech^2[\sqrt{c}(z - ct)/2] \qquad (2.3).$$

Це сімейство рішень, параметризованих швидкістю солітона c. Це означає, що це рішення існує з довільною швидкістю. Максимальна амплітуда становить -3c, отже, чим глибше русло потоку, тим швидше і пряміше рухається солітон. Рівняння КдФ з’являється під час вивчення групування сходинок.

2.3 Самоупорядкований ріст нанокристалів на макросходинках.

У статті [21] розглядається створення впорядкованих низькорозмірних структур на поверхнях кремнію Si (557) і Si (556) – атомно-чистих, і декорованих атомами металів.

Поверхня Si швидко нагрівається, наприклад, пропусканням через неї електричного струму, до 1200 – 1300°C, для очистки від поверхневих забруднень і оксидної плівки [22]. Далі поверхня поступово охолоджується до температур нижче 870°C. Пропускання струму призводить до ефектів електроміграції: в залежності від режимів термообробки може змінюватись

структура поверхні, групуватися сходинки, розширюватися тераси. Залежність міграції атомів кремнію від температури досі не вивчена до кінця, як і поведінка віцинальної поверхні з великими кутами нахилу.

Поверхні кремнію з регулярними системами терас і сходинок є перспективною підкладкою для 1D і 2D структур з унікальними фізичними властивостями. Рельєф таких поверхонь може бути використаний для створення атомних ланцюгів, масивів металічних нанодротів з характерним періодом у нанометровому діапазоні, або анізотропних островків нанометрового розміру.

У роботах [23, 24, 25] була продемонстрована можливість створення 1D атомних ланцюгів золота, срібла та свинця на на поверхні кремнію Si(557). Використання поверхні з великим відхиленням від площини (111) дозволило уникнути утворення багатодоменних структур і створити ланцюги атомів металів з переважним упорядкуванням вздовж напрямку сходинок. Транспортні вимірювання, виконані на таких ланцюгових структурах [23], показали анізотропію провідності вздовж і перпендикулярно сходинок, а також неметалічний характер провідності в атомних ланцюжках.

На опорних поверхнях асиметрія між потоками адатомів, які прикріплюються до сходів зверху і знизу, призводить до нестійкості поверхні. Якщо кількість частинок, які приєднуються до сходинки з нижньої тераси, перевищує потік частинок зверху, з'являються «викривлені» сходинки (Рис. 2.3). В іншому випадку, коли потік, що надходить зверху, вище, відбувається групування сходинок [26]. Асиметрія потоку на сходинках може бути викликана різними динамічними механізмами. У цьому контексті найчастіше обговорюється зміщення адатомів через електроміграцію [27] або через наявність бар'єру Ерліха-Швобеля [28]. У роботі [29] за допомогою моделі кліткового автомата показано, що ці два види зміщення цілковито по-різному еволюціонують з часом.

РОЗДІЛ 3
КІНЕМАТИЧНІ ХВИЛІ НА ВІЦИНАЛЬНИХ ПОВЕРХНЯХ ЛУЖНО-ГАЛОЇДНИХ КРИСТАЛІВ

3.1 Методика експерименту

На Рис. 3.1 – частина поверхні кристалу NaCl з індексами Міллера майже (100) [17] (поверхня практично паралельна кристалічній решітці). Фото зроблене у [30] за допомогою трансмісійного (просвічуючого) електронного мікроскопа [31].

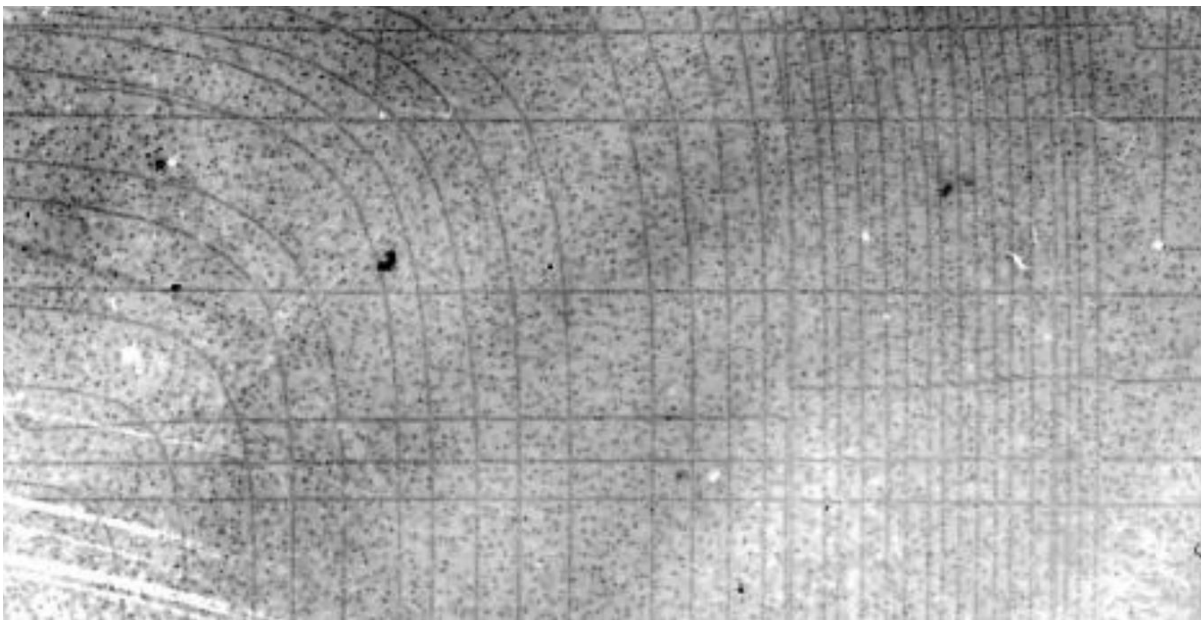


Рисунок 3.1 – 7.45 μм віцинальної поверхні кристалу солі (NaCl) у масштабі приблизно 23221/1

Вертикальні лінії на Рис. 3.1, що загинаються, показують елементарні сходинки. Як було розглянуто у підрозділі 1.2, елементарні сходинки, що рухаються у процесі росту кристалу, утворюють «ударні хвилі» щільності. На Рис. 3.1 можна побачити, як групи елементарних сходинок утворюють такі хвилі. Для їх кількісного аналізу та інтерпретації у [30] був отриманий аналітичний розв’язок одновимірного рівняння Бюргерса:

$$u(t,x) = 2\mu\lambda_n \frac{\sin(\lambda_n x) C_R e^{\mu\lambda_n^2 t}}{(\cos(\lambda_n x)+C_R e^{\mu\lambda_n^2 t})^2+(\sin(\lambda_n x))^2} \qquad (3.1),$$

де u – щільність сходинок віцинальної поверхні,

t – час,

x – координата (відповідає уявній горизонтальній лінії на нижній границі Рис. 3.1),

$\lambda_n = 2\pi n$,

μ, C, n – деякі коефіцієнти.

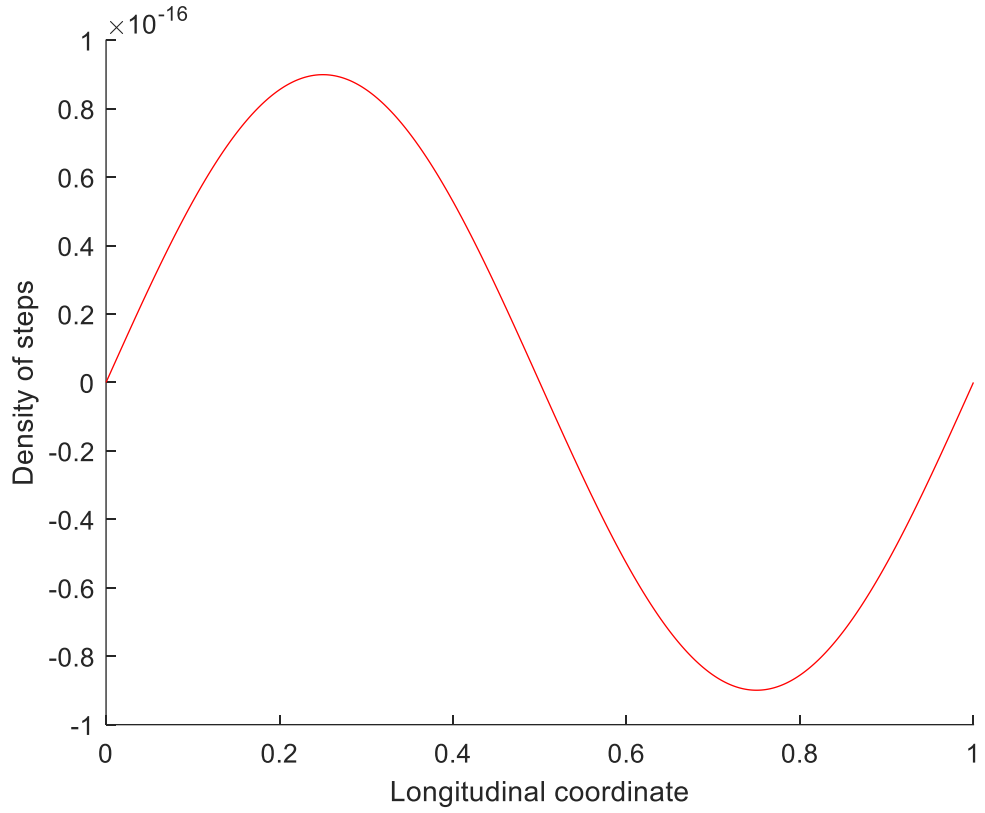


Рисунок 3.2 – Графік розв'язку рівняння Бюргерса

На Рис. 3.2 зображений графік рівняння (3.1) з усіма коефіцієнтами рівними 1. Видно, що рівняння описує хвилю, у нашому випадку – щільності віцинальних сходинок – у безрозмірних величинах.

Аналіз розв’язку (3.1) був проведений варіюванням значень коефіцієнтів μ, C і n за допомогою програмного продуктів Origin 2019bi і Matlab R2016a.

Щоб проаналізувати поверхню на Рис. 3.1, на основі відомої довжини дифузійного шляху адатомів, у [30] були пораховані концентрації сходинок вздовж напрямку [10] (Табл. 3.1). У таблиці 3.2 наведені відповідні координати. Ці дані є вхідними для експерименту.

Таблиця 3.1

Значення концентрацій сходинок розглядуваної пори для хвиль 1 і 2

1	-0,0456	-0,0258	-0,0129	0,0166	0,0143	0,0078	0,0426	0,0402	0,0322	0,0076
2	-0,1363	-0,0509	-0,0145	0,0417	0,04	0,0799	0,1573	0,1555	0,1460	

Згідно з даними Таблиць 3.1 і 3.2 були проведені оптимізації кривої за формулою (3.1) до експериментальних точок. Значення усіх параметрів розглядаються у безрозмірних величинах.

Таблиця 3.2

Значення координат сходинок розглядуваної пори

1	15,607	27,532	37,859	45,775	53,839	62,351	68,918	75,591	82,638	91,16
2	104,822	117,425	127,681	135,642	143,658	150,567	158,744	164,223	178,284	

Оптимізація проводилася інструментом Curve Fitting програмного пакета Origin. По-перше, рівняння (3.1) було додане до списку рівнянь.

На Рис. 3.3. виведене вікно змінних і параметрів доданого рівняння. Оптимізація проводилася на фіксованих значеннях *x*. Ця змінна не потребувала підбору, через те була введена у поле незалежної змінної (Independent). Dependent variables – це змінна, що містить значення функції. Parameters – параметри, значення яких інструмент буде варіювати, щоб наблизити Dependent variables до заданих точок.

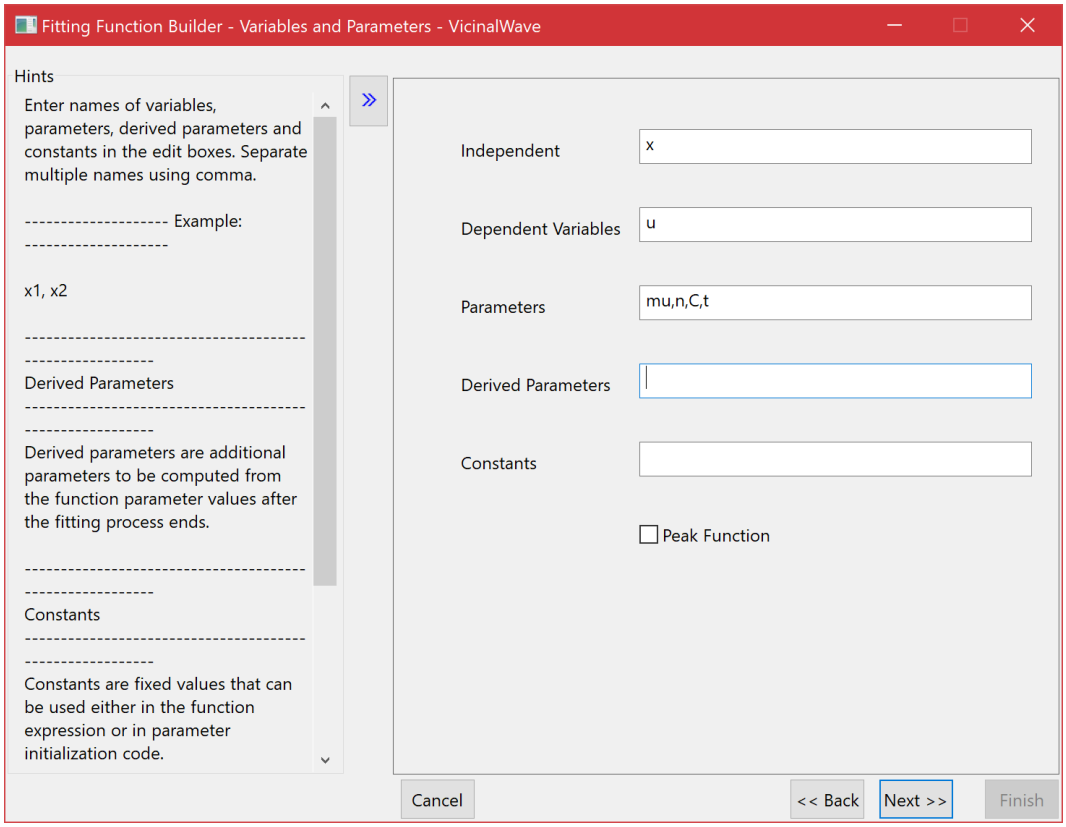


Рисунок 3.3 – Вікно введення змінних нової функції для Origin

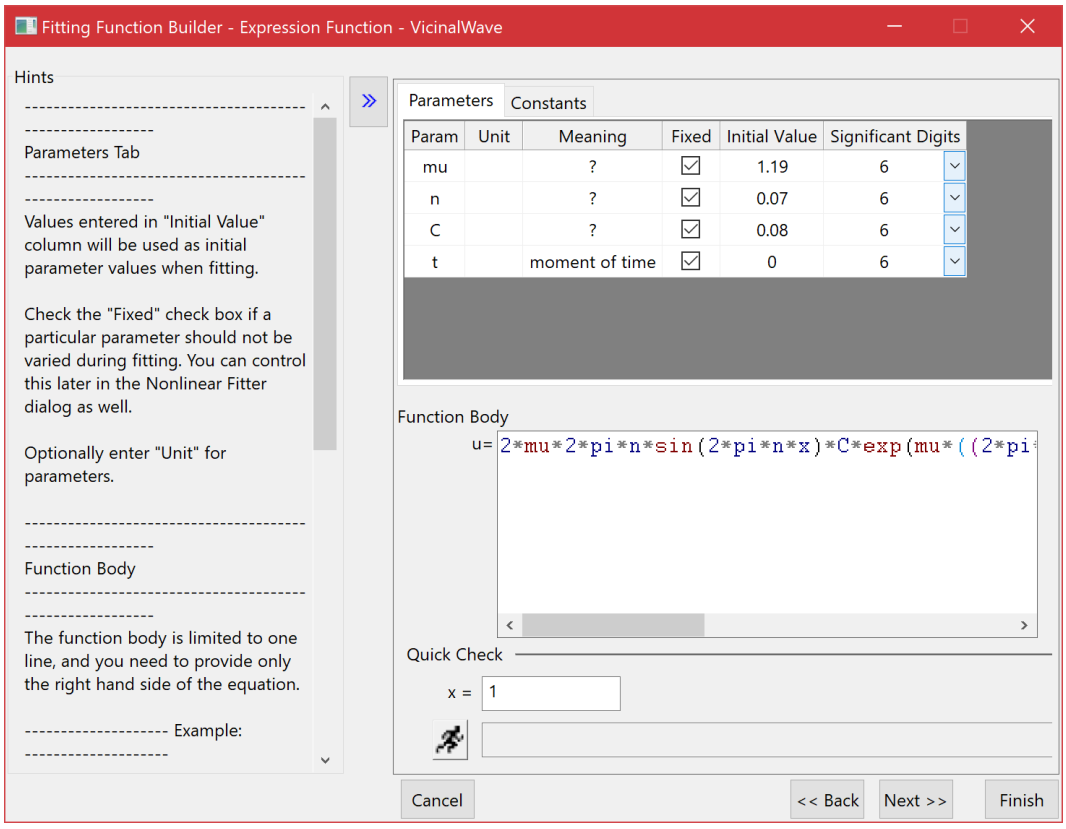


Рисунок 3.4 – Вікно введення виразу нової функції для Origin

На Рис. 3.4 – вікно вводу доданого рівняння. У ньому можна для кожного з Parameters додати опис, одиниці виміру. Визначити, чи повинен Curve Fitting варіювати параметр у ході даної оптимізації. Задати стартові значення, і кількість відображуваних знаків після коми.Скріншот на Рис. 3.4 взятий з одного з завершальних оптимізацій, виконаних для аналізу розв'язку (3.1), тому стартові значення параметрів, крім часу, досить близькі до кінцевих (табл. 3.4).

У вікні на Рис. 3.5 можуть бути визначені границі, у яких Origin може змінювати параметри.

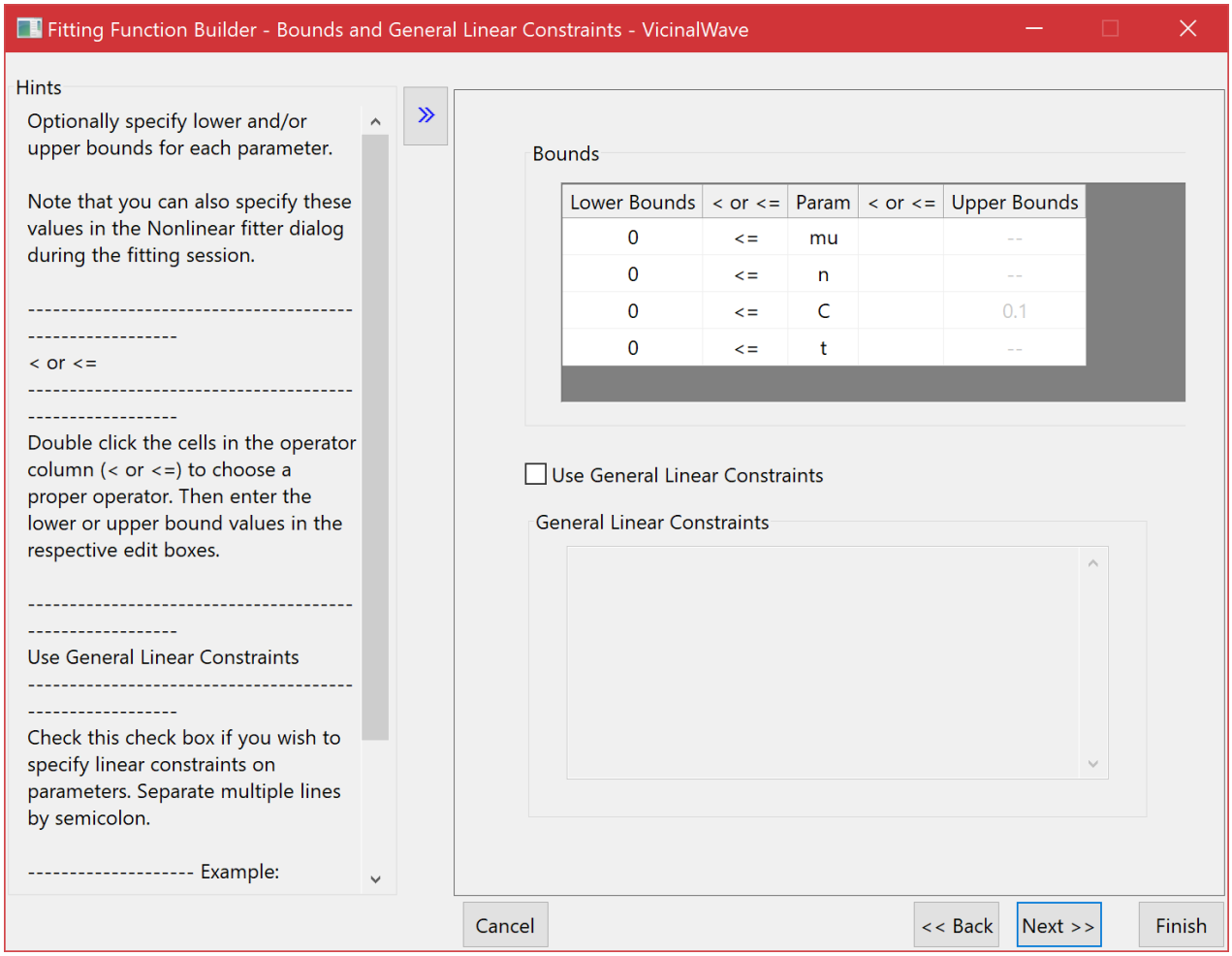


Рисунок 3.5 – Вікно введення виразу нової функції для Origin

На Рис. 3.6 – вікно інструмента Curve Fitting. У випадаючих списках обирається функція для оптимізації (одна з багатьох стандартних або створена користувачем).

У списку Iteration Algorithm обирається алгоритм оптимізації, за замовчуванням це алгоритм Левенберга — Марквардта. У Origin Pro доступний також алгоритм ортогональної регрессії.

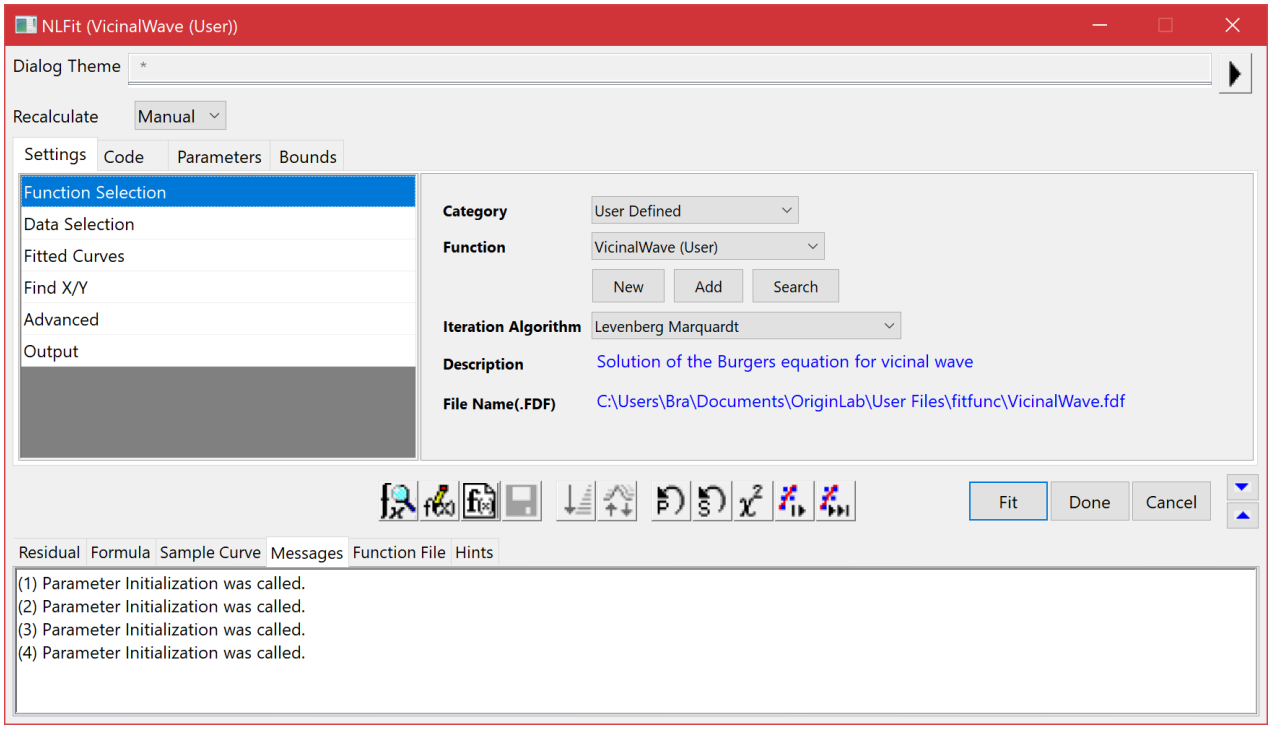


Рисунок 3.6 – Вікно інструмента Curve Fitting

Обидва методи розв’язують задачу найменших квадратів відстаней кривої, що оптимізується, до експериментальних точок. Основна різниця методів в тому, що OP розраховує відстані, враховуючи одночасно значення по осі абсцис, і по осі ординат (Рис. 3.7), коли ЛМ враховує тільки вісь ординат.

Панель кнопок знизу на Рис. 3.6 дозволяє редагувати функцію, здійснювати оптимізацію по ітераціям, і т. ін.

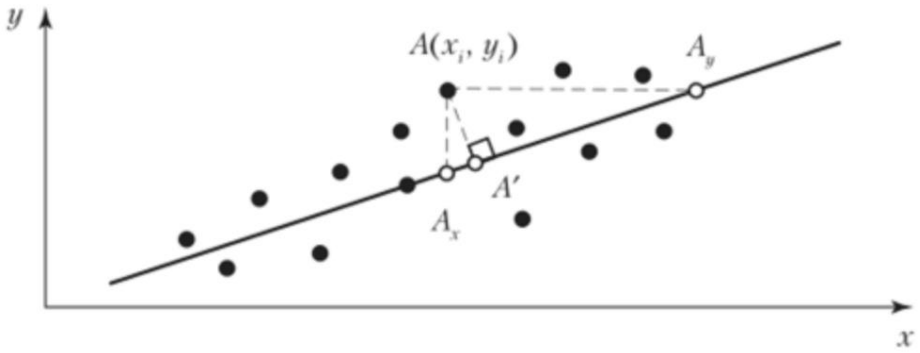


Рисунок 3.7 – Метод ортогональної регресії [32]

3.2 Аналіз розв'язку рівняння Бюргерса.

Рис. 3.8 показує один з варіантів оптимізації РРБ для густини сходинок першої хвилі з поверхні кристалу, що аналізується. На Рис. 3.1 можна побачити широку терасу, що відокремлює першу хвилю.

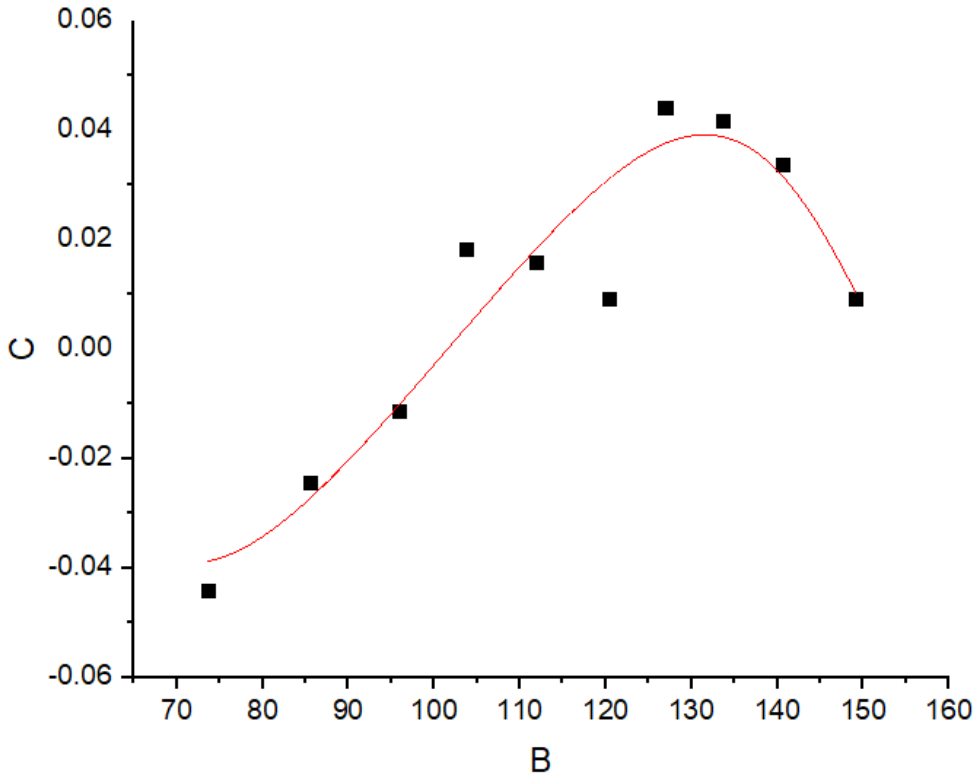


Рисунок 3.8 – Оптимізація першої хвилі

В таблиці 3.3 наведені коефіцієнти, отримані у даній оптимізації.

Таблиця 3.3

Значення коефіцієнтів для першої хвилі

№ хвилі	μ	t	n	C_R
1	2.1699	0.002	0.0098	0.1429

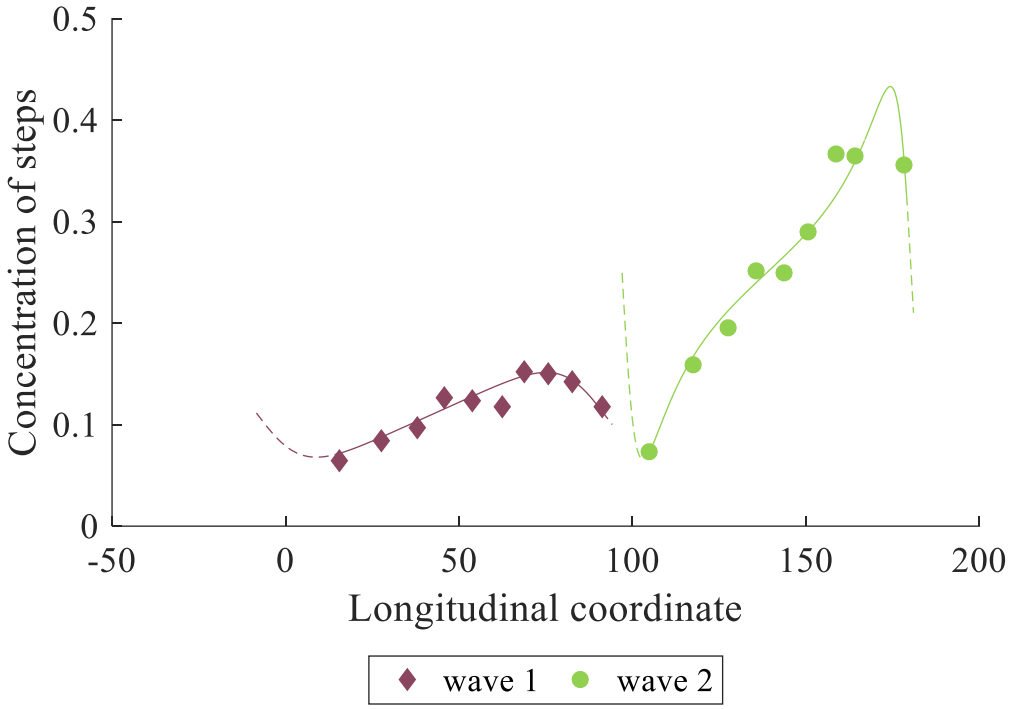


Рисунок 3.9 – Хвилі сходинок 1 – 2 для μ = 1.19

Таблиця 3.4

Параметри хвиль 1 – 2, μ = 1.19

№ хвилі	t	n	C_R	Зсув по x	Амплітуда
1	312.35	0.01	0.06	+58	0.0417
2	270.7	0.012	0.1	+28	0.184

Кінцевий варіант кривих, отриманий в даній роботі, на Рис. 3.9. Код Matlab для їх зображення наведений у Додатку А. Таблиця 3.4 містить відповідні значення параметрів.

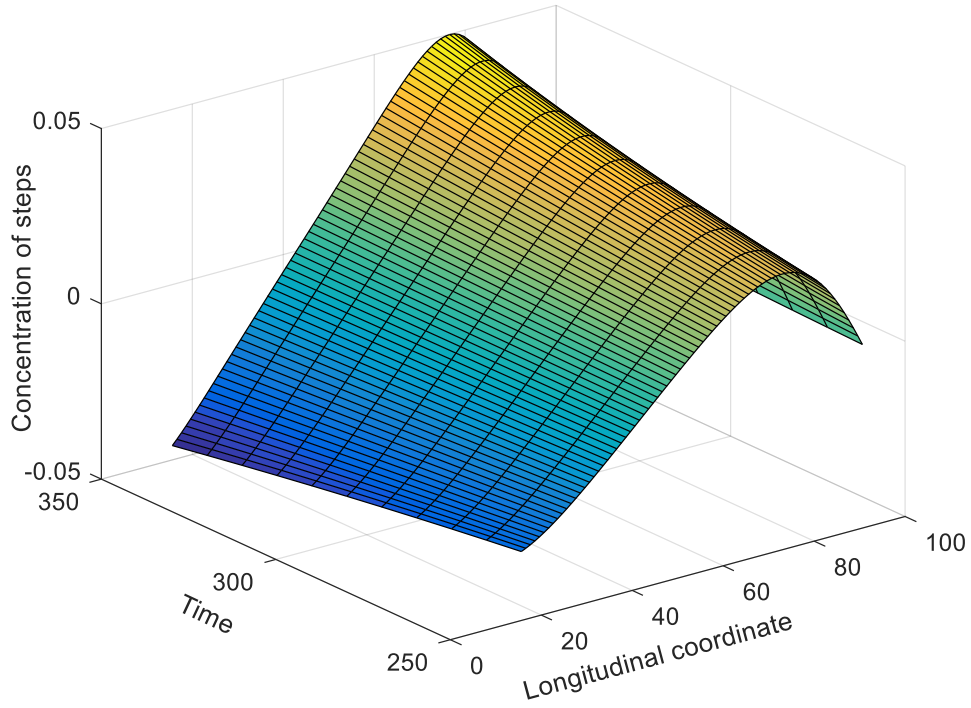


Рисунок 3.10 – Зростання амплітуди з часом для 1-ї хвилі

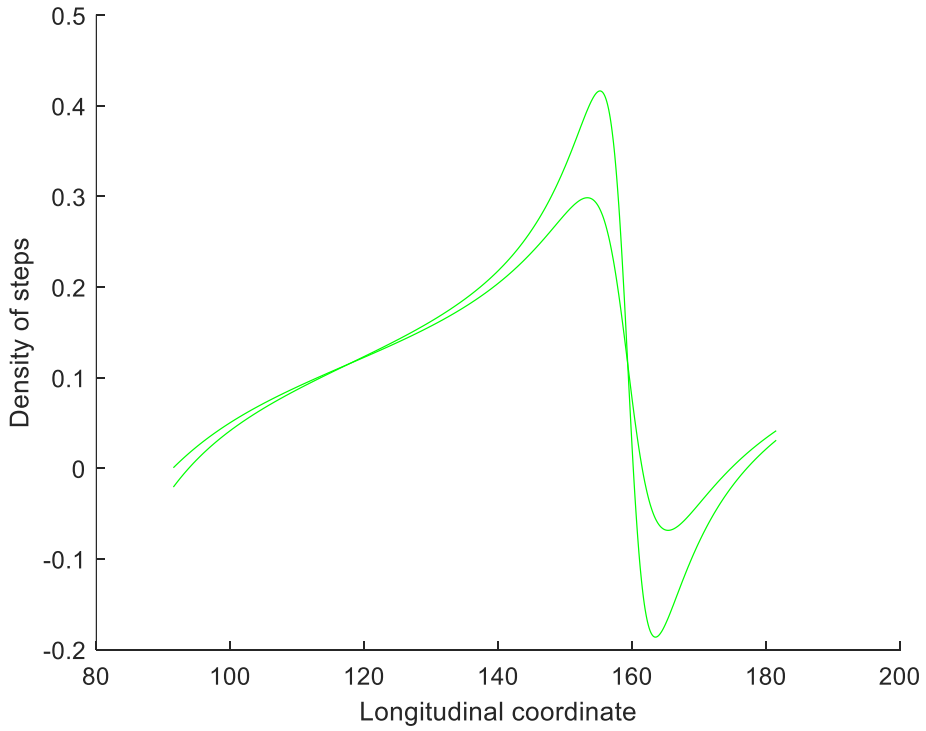


Рисунок 3.11 – Оптимізація другої хвилі; μ = 1.29 (більша амплітуда) і μ = 1.19 (менша амплітуда)

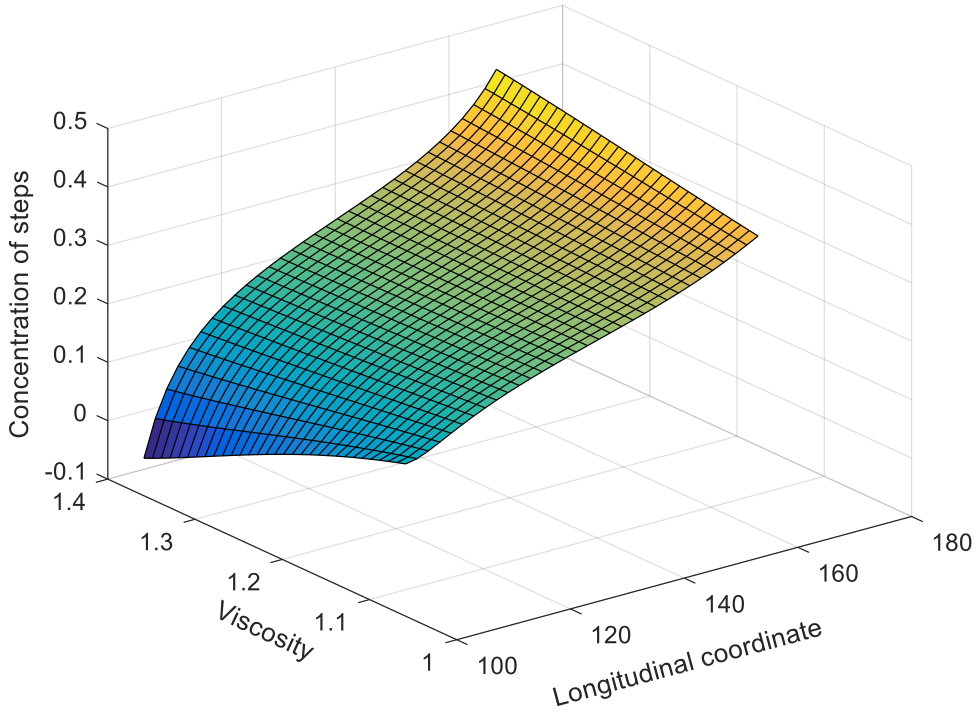


Рисунок 3.12 – Зміна μ для другої хвилі, [1.09, 1.39]

У ході аналізу кривих, отриманих у Origin, за допомогою Matlab, були відзначені деякі закономірності їх поведінки.

Так, з часом зростає амплітуда, як показано на Рис. 3.10 для першої хвилі.

При збільшенні μ (що є характеристикою в’язкості зовнішнього середовища кристалу), посилюється «перегин» кривої. Це краще демонструється на прикладі другої хвилі, що сама має більш різкий перегин, ніж перша (Рис. 3.11). Інші параметри для даних кривих сталі і подані у табл. 3.4. На Рис. 3.12 – тривимірне зображення, на якому μ змінюється від 1.09 до 1.39. Посилення перегину зі збільшенням μ може вказувати на прискорення утворення УХ. Додаток Б містить код виводу зображення.

ВИСНОВКИ

У даній роботі розглянутий математичний опис кінематичного хвильового руху і ударних хвиль, зокрема на віцинальних поверхнях.

Проведений комп'ютерний аналіз розв'язку одновимірного рівняння Бюргерса для 2-х хвиль елементарних сходинок на віцинальній поверхні кристалу кам'яної солі.

На основі проведеного аналізу КХР в різних середовищах продемонстровано, що прикладні задачі, пов'язані з формуванням ударних хвиль є актуальними для вирішення широкого кола науково-технічних задач.

Показано, що кінематичний хвильовий рух є характерним для густини елементарних сходинок на поверхні росту кристалу кам'яної солі, що близька до (100) за росту з парової фази.

На основі аналізу аналітичного розв'язку рівняння Бюргерса показано, що результатом нелінійних і дисипативних ефектів є формування ударних хвиль.

Добре узгодження розрахунків на основі аналітичного розв'язку з експериментальними даними розподілення безрозмірної густини моноатомних сходинок на віцинальній поверхні росту дозволяє отримати значення характерних параметрів «мілких» кінематичних хвиль, встановлення фізичного змісту яких потребує подальших досліджень.

Список використаних джерел

1. Уизем Дж. Линейные и нелинейные волны / Дж. Уизем. – М.: Мир, 1977. – 638 с.

2. Кинематические волны. Причины появления и способы устранения. [Электронный ресурс] / Ю. Примаченко // YouTube. – 14.02.2018. – Режим доступа: https://www.youtube.com/watch?v=0DNzrkfSt7Y. – Дата обращения: 23.11.20.

3. Казанин А. Г. Динамические и кинематические характеристики отраженных волн в сейсмогеологических условиях шельфа арктических морей / диссертация к.т.н. ВАК РФ. – 2001.

4. Крылатков С.М., Крылаткова Н.А., Крылевская А.Н., Гуськова В.Д. Сейсмические изображения геологической среды в методе преломленных волн // Фундаментальные исследования. – 2015. – № 2-24. – С. 5409-5415.

5. Frank F. C. Growth and Perfection of Crystals / N. Y. – 1958. – p. 411.

6. Cabrera N., Vermi1yea D. A. Growth and Perfection of Crystals / N. Y. – 1958. – p. 393.

7. Lighthill M. J., Whitham G. B. On kinematic waves: I. Flood movement in long rivers / Proc. Roy. Soc. – A. 229. – 1955. – p. 281-345.

8. Bateman H. Some recent researches on the motion of fluids / Monthly Weather Review. – № 43. – 1915. – p. 163-170.

9. Cole J. D. On a quasilinear parabolic equation occurring in aerodynamics / Q. Appl. Math. – № 9. – 1951. – p. 225-236.

10. Hopf E. The partial differential equation $u_t + uu_x = \mu u_{xx}$ / Comm. Pure Appl. Math. – № 3. – 1950. – p. 201-230.

11. Бернал. Дж. Д. Физика воздушных налетов: материалы лекции 03.12.1940 / Пер. А. А. Ильина. – 1941.

12. Ударная волна [Электронный ресурс]: (архив журнала «Наука и жизнь») / В. Гинф // Портал журнала «Наука и жизнь». – 1942. – № 1. – Режим

доступа: https://www.nkj.ru/archive/articles/31608/. – Дата обращения: 15.11.20. – Название с экрана.

13. J. Trefil. Cassel's Laws of Nature: An A–Z of Laws and Principles Governing the Workings of Our Universe // Cassel Reference Ltd. – 2003.

14. Лейбович С., Сибасс А. (ред) Нелинейные волны / М.: Мир. – 1977.

15. Леммлейн Г. Г., Дукова Е. Д. Наблюдения спирального роста кристаллов паратолуидина / Доклады АН СССР. – 1955. – Т. 102. – № 1.

16. Багдасаров Х. С., Гиваргизов Е. И., Демьянец Л. Н., Кузнецов В. А., Лабочев А. Н., Чернов А. А. Современная кристаллография. Том 3. Образование кристаллов / Москва: Наука. – 1980. – 401 с.

17. Индексы Миллера [Электронный ресурс]: (Словарь нано терминов) / А. В. Зотов, А. А. Саранин // АО РОСНАНО – 2009-2020. – Режим доступа: https://thesaurus.rusnano.com/wiki/article14161. – Дата обращения: 13.11.20. – Название с экрана.

18. Чернов А. А. Слоисто-спиральный рост кристаллов / Успехи физических наук. – Февраль 1961. – Т. LXXIII, вып. 2.

19. 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. – 60 p.

20. Кудряшов Н.А. Нелинейные волны и солитоны / М: Знание. – 1997. – Журнал Физика. – Вып. 13.

21. Божко С. И., Ионов А. М., Чайка А. Н. Поверхности Si(hhm): полигон для создания наноструктур / Физика и техника полупроводников. – 2015. – Том 49. – Вып. 6.

22. Takayanagi K., Tanishiro Y., Takahashi S. Structural analysis of Si(111)-7×7 by UHV-transmission electron diffraction and microscopy / Journal of Vacuum Science & Technology. – 1985. – A 3, 1502.

23. Chaika A. N., Bozhko S. I., Ionov A. M., Myagkov A. N., Abrosimov N. V. STM and LEED studies of atomically ordered terraced Si(557) surfaces: / The

8th International Workshop on Beam Injection Assessment of Microstructures in Semiconductors. – 2006.

24. Krawiec M., Kwapiński T., Jałochowski M. Double nonequivalent chain structure on a vicinal Si(557)-Au surface / Phys. Rev. B. – 2006.

25. Tegenkamp C., Ohta T., McChesney J. L., Dil H., Rotenberg E., Pfnür H., Horn K. Coupled Pb Chains on Si(557): Origin of One-Dimensional Conductance / Phys. Rev. Lett. 100. – 2008.

26. Krug J., Tonchev V., Stoyanov S., Pimpinelli A. Scaling properties of step bunches induced by sublimation and related mechanisms / Physical Review B – Condensed Matter and Materials Physics. – (2005). – № 71.

27. Usov V., Coileain C.O., Shvets I.V. Experimental quantitative study into the effects of electromigration field moderation on step bunching instability development on Si(111) / Physical Review B – Condensed Matter and Materials Physics. – 2011. – № 83.

28. Барьер Эрлиха-Швобеля [Электронный ресурс]: (Словарь нано терминов) / А. А. Саранин // АО РОСНАНО – 2009-2020. – Режим доступа: https://thesaurus.rusnano.com/wiki/article555 . – Дата обращения: 22.11.20. – Название с экрана.

29. Krzyżewskia F., Załuska-Koturab M., Krastevac A., Popovad H., Tonchev V. Step bunching and macrostep formation in 1D atomistic scale model of unstable vicinal crystal growth / Journal of Crystal Growth. – 15.09.2017. – Vol. 447.

30. O. Kulyk, I. Hariachevska, O. Lisina, V. Tkachenko, O. Andrieieva, O. Podshyvalova, V. Gnatyuk, T. Aoki, Formation of a quasiperiodic relief on vicinal surfaces / 2020.

31. Электронная микроскопия [Электронный ресурс]: // ООО Микросистемы – 2020. – Режим доступа: https://www.microsystemy.ru/info/articles/elektronnaya-mikroskopiya/. Дата обращения: 13.11.20

32. Тимофеев В.С. Эконометрика: учебник для академического бакалавриата / 2017. – с.69.

КОД MATLAB ДЛЯ ЗОБРАЖЕННЯ ГРАФІКІВ ХВИЛЬ ВІЦИНАЛЬНИХ СХОДИНОК

```
clear
clc
hold on
set(gca, 'FontName', 'Times New Roman', 'FontSize', 14)

mu1 = 1.19;
n1 = 0.01;
C1 = 0.06;
t1 = 312.35;
x1bias = 0;
y1bias = 0;
y1pedestal = 0.109696780467373;
x1FormulaBias = 58;
x10 = 15.60662499 + x1bias - 24 : 0.0001 : 15.60662499 +
x1bias;
x1 = 15.60662499+x1bias : 1 : 91.16037825 + x1bias;
x11 = 91.16037825 + x1bias : 0.001 : 91.16037825 +
x1bias + 3;
u10 = 2 .* mu1 .* 2 .* pi .* n1 .* sin(2 .* pi .*  n1 .*
(x10 + x1FormulaBias)) .* C1 .* exp(mu1 .* (2 .* pi .*
n1) .^ 2 .* t1) ./ ((cos(2 .* pi .* n1 .* (x10 +
x1FormulaBias)) + C1 .* exp(mu1 .* (2 .* pi .* n1) .^ 2
.* t1)) .^ 2 + (sin(2 .* pi .* n1 .* (x10 +
x1FormulaBias))) .^ 2) - y1bias + y1pedestal;
u1 = 2 .* mu1 .* 2 .* pi .* n1 .* sin(2 .* pi .* n1 .*
(x1 + x1FormulaBias)) .* C1 .* exp(mu1 .* (2 .* pi .*
n1) .^ 2 .* t1) ./ ((cos(2 .* pi .* n1 .* (x1 +
x1FormulaBias)) + C1 .* exp(mu1 .* (2 .* pi .* n1) .^ 2
.* t1)) .^ 2 + (sin(2 .* pi .* n1 .* (x1 +
x1FormulaBias))) .^ 2) - y1bias + y1pedestal;
u11 = 2 .* mu1 .* 2 .* pi .* n1 .* sin(2 .* pi .* n1 .*
(x11 + x1FormulaBias)) .* C1 .* exp(mu1 .* (2 .* pi .*
n1) .^ 2 .* t1) ./ ((cos(2 .* pi .* n1 .* (x11 +
x1FormulaBias)) + C1 .* exp(mu1 .* (2 .* pi .* n1) .^ 2
.* t1)) .^ 2 + (sin(2 .* pi .* n1 .* (x11 +
x1FormulaBias))) .^ 2) - y1bias + y1pedestal;
x01 = [15.60662499 + x1bias, 27.53225532 + x1bias,
37.8591809 + x1bias, 45.77481071 + x1bias, 53.83903458 +
x1bias, 62.3507493 + x1bias, 68.91771076 + x1bias,
75.59092054 + x1bias, 82.63771931 + x1bias, 91.16037825
+ x1bias];
```

```
y01 = [-0.04562142782 + y1pedestal, -0.0258437704 +
y1pedestal, -0.01286253947 + y1pedestal, 0.0166355549 +
y1pedestal, 0.01430771339 + y1pedestal, 0.007788360146 +
y1pedestal, 0.04258064739 + y1pedestal, 0.04015614381 +
y1pedestal, 0.03221162815 + y1pedestal, 0.007637493682 +
y1pedestal];
color1 = [0.545 0.270588 0.3686];
p10 = plot(x10, u10, '--', 'Color', color1);
p1 = plot(x1, u1, 'Color', color1);
p11 = plot(x11, u11, '--', 'Color', color1);
p01 = plot(x01, y01, 'd', 'MarkerEdgeColor', color1,
'MarkerFaceColor', color1);

mu2 = 1.19;
n2 = 0.012;
C2 = 0.1;
t2 = 270.7;
x2bias = 0;
y2bias = -0.04;
y2pedestal = 0.209556085365699;
x2FormulaBias = 28;
x20 = 97 : 0.1 : 104.8218991 + x2bias;
x2 = 104.8218991 + x2bias : 0.1 : 167 + x2bias;
x21 = 167 + x2bias : 0.1 : 178 + x2bias;
x22 = 178 + x2bias : 0.1 : 179 + x2bias;
x23 = 179 + x2bias : 0.1 : 181;
u20 = 2 .* mu2 .* 2 .* pi .* n2 .* sin(2 .* pi .* n2 .*
(x20 + x2FormulaBias)) .* C2 .* exp(mu2 .* (2 .* pi .*
n2) .^ 2 .* t2) ./ ((cos(2 .* pi .* n2 .* (x20 +
x2FormulaBias)) + C2 .* exp(mu2 .* (2 .* pi .* n2) .^ 2
.* t2)) .^ 2 + (sin(2 .* pi .* n2 .* (x20 +
x2FormulaBias))) .^ 2) - y2bias + y2pedestal;
u2 = 2 .* mu2 .* 2 .* pi .* n2 .* sin(2 .* pi .* n2 .*
(x2 + x2FormulaBias)) .* C2 .* exp(mu2 .* (2 .* pi .*
n2) .^ 2 .* t2) ./ ((cos(2 .* pi .* n2 .* (x2 +
x2FormulaBias)) + C2 .* exp(mu2 .* (2 .* pi .* n2) .^ 2
.* t2)) .^ 2 + (sin(2 .* pi .* n2 .* (x2 +
x2FormulaBias))) .^ 2) - y2bias + y2pedestal;
u21 = 2 .* mu2 .* 2 .* pi .* n2 .* sin(2 .* pi .* n2 .*
(x21 + x2FormulaBias)) .* C2 .* exp(mu2 .* (2 .* pi .*
n2) .^ 2 .* t2) ./ ((cos(2 .* pi .* n2 .* (x21 +
x2FormulaBias)) + C2 .* exp(mu2 .* (2 .* pi .* n2) .^ 2
.* t2)) .^ 2 + (sin(2 .* pi .* n2 .* (x21 +
x2FormulaBias))) .^ 2) - y2bias + y2pedestal;
```

```
u22 = 2 .* mu2 .* 2 .* pi .* n2 .* sin(2 .* pi .* n2 .*
(x22 + x2FormulaBias)) .* C2 .* exp(mu2 .* (2 .* pi .*
n2) .^ 2 .* t2) ./ ((cos(2 .* pi .* n2 .* (x22 +
x2FormulaBias)) + C2 .* exp(mu2 .* (2 .* pi .* n2) .^ 2
.* t2)) .^ 2 + (sin(2 .* pi .* n2 .* (x22 +
x2FormulaBias))) .^ 2) - y2bias + y2pedestal;
u23 = 2 .* mu2 .* 2 .* pi .* n2 .* sin(2 .* pi .* n2 .*
(x23 + x2FormulaBias)) .* C2 .* exp(mu2 .* (2 .* pi .*
n2) .^ 2 .* t2) ./ ((cos(2 .* pi .* n2 .* (x23 +
x2FormulaBias)) + C2 .* exp(mu2 .* (2 .* pi .* n2) .^ 2
.* t2)) .^ 2 + (sin(2 .* pi .* n2 .* (x23 +
x2FormulaBias))) .^ 2) - y2bias + y2pedestal;
x02 = [104.8218991 + x2bias, 117.4253561 + x2bias,
127.6808457 + x2bias, 135.6423442 + x2bias, 143.657819 +
x2bias, 150.5667804 + x2bias, 158.744184 + x2bias,
164.2227745 + x2bias, 178.2835905 + x2bias];
y02 = [-0.1363281684 + y2pedestal, -0.05086946437 +
y2pedestal, -0.01453858009 + y2pedestal, 0.04165290449 +
y2pedestal, 0.03996126146 + y2pedestal, 0.07992302404 +
y2pedestal, 0.1573085285 + y2pedestal, 0.1555013137 +
y2pedestal, 0.1460420529 + y2pedestal];
color2 = [0.57255 0.815686 0.3137];
p20 = plot(x20, u20, '--', 'Color', color2);
p2 = plot(x2, u2, 'Color', color2);
p21 = plot(x21, u21, 'Color', color2);
p22 = plot(x22, u22, 'Color', color2);
p23 = plot(x23, u23, '--', 'Color', color2);
p02 = plot(x02, y02, 'o' ,'MarkerEdgeColor', color2,
'MarkerFaceColor', color2);

xPos = xlabel('Longitudinal coordinate');
yPos = ylabel('Concentration of steps');
legend([p01, p02], {'wave 1', 'wave 2'}, 'Location',
'southoutside', 'Orientation', 'horizontal');
```

КОД MATLAB ДЛЯ ЗОБРАЖЕННЯ ТРИВИМІРНОГО ГРАФІКУ ЗМІНИ ХВИЛІ 2-Ї СХОДИНКИ ЗІ ЗМІНОЮ ПАРАМЕТРУ μ

```
clear
clc
mu2 = 1.09 : 0.01 : 1.39;
n2 = 0.012;
C2 = 0.1;
t2 = 270.7;
x2bias = 0;
y2bias = -0.04;
y2pedestal = 0.209556085365699;
x2FormulaBias = 28;
x2 = 104.8218991 + x2bias : 2 : 167 + x2bias;
x2forSurf = meshgrid(x2, mu2);
mu2forSurf = meshgrid(mu2, x2).';
u2forSurf = 2 .* mu2forSurf .* 2 .* pi .* n2 .* sin(2 .*
pi .* n2 .* (x2forSurf + x2FormulaBias)) .* C2 .*
exp(mu2forSurf .* (2 .* pi .* n2) .^ 2 .* t2) ./ ((cos(2
.* pi .* n2 .* (x2forSurf + x2FormulaBias)) + C2 .*
exp(mu2forSurf .* (2 .* pi .* n2) .^ 2 .* t2)) .^ 2 +
(sin(2 .* pi .* n2 .* (x2forSurf + x2FormulaBias))) .^
2) - y2bias + y2pedestal;
surf(x2forSurf, mu2forSurf, u2forSurf)

xPos = xlabel('Longitudinal coordinate', 'rotation',
15);
yPos = ylabel('Viscosity', 'rotation', -25);
zPos = zlabel('Concentration of steps');
xPos.Position(1) = xPos.Position(1) + 5;
yPos.Position(1) = yPos.Position(1) + 5;
```