

点缺陷对表面生长动力学标度行为的影响

张雷明^{1)†} 夏辉²⁾

1) (中国矿业大学徐海学院, 徐州 221008)

2) (中国矿业大学物理系, 徐州 221008)

(2011年1月26日收到; 2011年12月14日收到修改稿)

基于含噪声 Kuramoto-Sivashinsky 方程, 采用动力学重正化群技术, 研究生长表面存在点缺陷或杂质对表面生长动力学标度行为的影响, 得到了相应的粗糙度指数 α 和动力学标度指数 z . 所得结果表明, 点缺陷的存在使生长表面粗化, 并缩短达到稳定生长的弛豫时间.

关键词: 表面生长, 动力学重正化群方法, 点缺陷

PACS: 68.35.Ct, 64.60.Ht, 05.70.Np

1 引言

自然界和生产过程中存在很多表面和界面粗化生长现象. 对非平衡状态下表面和界面粗化生长现象的研究一直是非平衡统计物理学和凝聚态物理学中一个十分活跃的研究领域^[1,2]. 一方面是因为它与许多重要的实际生长过程(如分子束外延生长^[2,3]、晶体生长、化学气相沉积等)相联系, 有助于了解表面和界面生长的物理机理, 对提高表面和界面的生长品质有着指导作用; 另一方面是由于它涉及到生长规律、标度和普适类等非平衡统计物理学中的许多基本问题, 有助于推动非平衡物理学的发展. 近年来, 人们针对不同的生长过程提出了各种不同的动力学生长模型, 建立了生长动力学方程, 并在方程数理性质的研究、系统的解析解和数值解、实验现象的观测分析以及许多相关领域做了大量富有成效的工作^[3-9].

生长表面一般用生长高度函数 $h(x, t)$, $x \in R^d$ (d 为基底维数) 来描述. 尽管表面生长图样千姿百态, 但大都呈现自仿射的分形结构^[2], 而且生长集团的表面存在一个活跃的生长区, 可用表面的平均宽度 $W(L, t) = \langle [h(x, t) - h(t)]^2 \rangle^{1/2}$ 来描述. 大量

的研究发现, 当达到稳定生长时, 生长表面在时间和空间上满足一定的标度关系^[2,10], 即

$$W(L, t) = L^\alpha f(t/L^z). \quad (1)$$

这里, L 为系统的特征尺度; t 为生长时间; $f(t, L)$ 是一标度函数, 具有渐近行为: $f(u) \xrightarrow{u \rightarrow \infty} \text{const.}$ 和 $f(u) \xrightarrow{u \rightarrow 0} u^\beta$; α 和 z 定义为表面的粗糙度指数和动力学指数, 粗糙度指数 α 表征处于稳定状态表面位形的特性, 而动力学标度指数 z 则表征达到稳定生长的弛豫时间长短. $\beta = \alpha/z$ 为系统的生长指数, 表征表面初始生长阶段的动力学性质. 各种各样的标度生长现象可以根据标度指数 α 和 z 来确定其生长规律和划分普适类.

在表述表面生长的动力学演化规律时, 应用比较广泛且有效的是含噪声的 Kuramoto-Sivashinsky (KS) 方程^[11,12]

$$\begin{aligned} \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & \nu \nabla^2 h(\mathbf{x}, t) - \kappa \nabla^4 h(\mathbf{x}, t) \\ & + \frac{\lambda}{2} |\nabla h|^2 + \eta(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (2)$$

方程(2)右边第一项中的表面张力系数 ν 一般取负值, 表示系统的不稳定性; 第二项表示表面的耗散效应; 第三项为表面生长的非线性效应的最低项, 常数 λ 正比于表面的生长速度; 最后一项是 Gauss

† E-mail: zlm81@126.com

噪声, 其满足

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle = 0, \quad (3)$$

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t)\eta(\mathbf{x}', t') \rangle = 2D\delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t'), \quad (4)$$

式中 D 表示噪声强度.

在提出 KS 方程后, 人们用模耦合方法 [13–16] 对 KS 方程进行了研究分析, 求出了相应的标度指数, 在一维情况下, 所得结果不但与相应生长模型的数值模拟结果符合很好, 而且与文献 [17,18] 中的结果也比较符合. 因此, 人们认为 KS 方程较好地反映了某一生长普适类.

在一般的含噪声 KS 方程中 [12,19], 并没有考虑表面缺陷和杂质的影响. 而实际上, 生长表面是存在缺陷和杂质的, 而且肯定会对生长表面的标度性质产生影响. 本文在一般的含噪声 KS 方程中加入点缺陷引起的非均匀生长率项, 并采用由 Forster, Nelson 和 Stephen^[20] 在处理含有噪声的 Burgers 方程时提出来的动力学重正化群方法, 研究一维情况下点缺陷和杂质的存在对表面生长行为的影响, 得到了相应的粗糙度指数 α 和动力学指数 z . 计算结果表明, 点缺陷和杂质的存在会使生长表面粗化, 并缩短达到稳定生长的弛豫过程.

2 理论模型

在生长表面薄层中, 点缺陷或杂质的存在将形成局部的势垒或势阱, 这种势垒或势阱会对表面生长粒子具有排斥或吸附作用, 这都有可能导致生长表面或界面粗化. 采用 $F\delta(\mathbf{x})$ 表示缺陷或杂质引起的非均匀生长率项, 其中 $\delta(\mathbf{x})$ 为 δ 函数, F 为强度. $F > 0$ 表示排斥作用, $F < 0$ 则表示吸附作用. 考虑非均匀项后, 含噪声 KS 方程可修正为

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h - \kappa \nabla^4 h + \frac{\lambda}{2} |\nabla h|^2 + \eta + F\delta(\mathbf{x}). \quad (5)$$

下面采用文献 [12,18,20] 中所用的方法和步骤对方程 (5) 进行分析.

对方程 (5) 作标度变换 $x \rightarrow bx$, $t \rightarrow b^z t$, $h \rightarrow b^\alpha h$, 并利用 (3) 式, 则有

$$\begin{aligned} b^{\alpha-z} \frac{\partial h}{\partial t} &= \nu b^{\alpha-2} \nabla^2 h - \kappa b^{\alpha-4} \nabla^4 h \\ &+ \frac{\lambda}{2} b^{2\alpha-2} (\nabla h)^2 + b^{-d-\alpha} \eta \\ &+ b^{-d} F\delta(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (6)$$

由此得出各参数的标度变换关系为 $\nu \rightarrow b^{z-2}\nu$, $\kappa \rightarrow b^{z-4}\kappa$, $D \rightarrow b^{z-d-2\alpha}D$, $\lambda \rightarrow b^{\alpha+z-2}\lambda$, $F \rightarrow b^{z-\alpha-d}F$.

对 $h(\mathbf{x}, t)$, $\eta(\mathbf{x}, t)$ 和 $F\delta(\mathbf{x})$ 进行 Fourier 变换, 可将方程 (5) 变换到动量空间中.

$$\begin{aligned} h(\mathbf{k}, \omega) &= G_0(\mathbf{k}, \omega)[F2\pi\delta(\omega) + \eta(\mathbf{k}, \omega)] \\ &- \frac{\lambda}{2} G_0(\mathbf{k}, \omega) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \int_{q < \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \mathbf{q} \\ &\times (\mathbf{k} - \mathbf{q}) h(\mathbf{q}, \Omega) h(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \Omega). \end{aligned} \quad (7)$$

这里,

$$G_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\nu \mathbf{k}^2 + \kappa \mathbf{k}^4 - i\omega}$$

为裸传播子, 噪声 $\eta(\mathbf{k}, \omega)$ 满足

$$\langle \eta(\mathbf{k}, \omega) \rangle = 0, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \langle \eta(\mathbf{k}, \omega)\eta(\mathbf{k}', \omega') \rangle &= 2D\delta^d(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \\ &\times \delta(\omega + \omega'). \end{aligned} \quad (9)$$

由

$$h(\mathbf{k}, \omega) = G(\mathbf{k}, \omega)[2\pi F\delta(\omega) + \eta(\mathbf{k}, \omega)]$$

定义有效传播子 $G(\mathbf{k}, \omega)$, 则 (7) 式可以用图 1 所示的 Feynman 图表示.

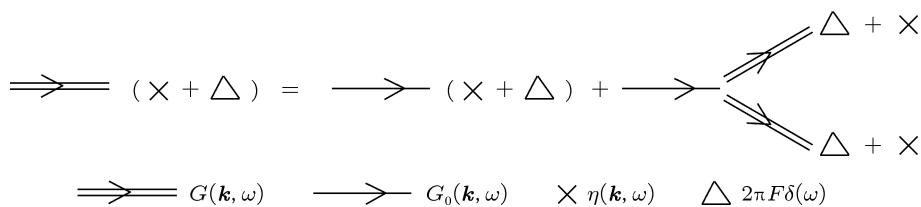


图 1 (7) 式的图形表示

将(7)式进行迭代展开时仅保留对非均匀生长率项的一次响应,把非线性项作为微扰,并考虑对噪声的平均,则(7)式的展开图形可以看成是由图2(a)和(b)组成.

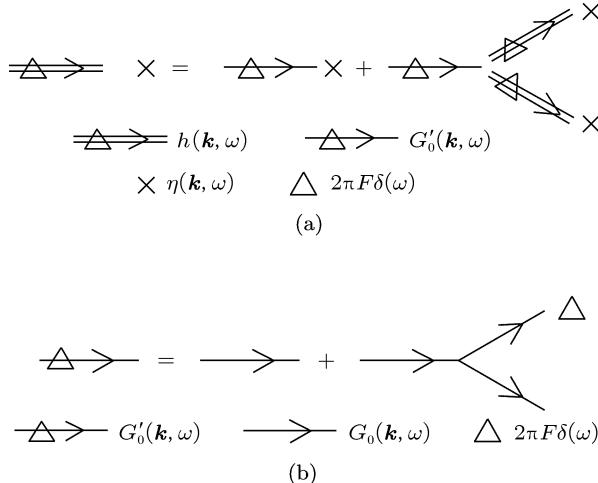


图2 (7)式展开后图形的近似表示 (a) 同时考虑噪声和点缺陷的作用; (b) 只考虑点缺陷的作用

图2(b)中 $G'_0(\mathbf{k}, \omega)$ 表示在考虑了点缺陷引起的非均匀生长率项的一次响应之后对原来裸传播子 $G_0(\mathbf{k}, \omega)$ 的修正,称为有效裸传播子. 定义

$$G'_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\nu' \mathbf{k}^2 + \kappa \mathbf{k}^4 - i\omega},$$

其中 ν' 为有效表面张力系数.

根据图2(b)计算得到 $G'_0(\mathbf{k}, \omega)$,即

$$\begin{aligned} G'_0(\mathbf{k}, \omega) = & G_0(\mathbf{k}, \omega) \\ & + \left(-\frac{1}{2} \right) G_0(\mathbf{k}, \omega) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \\ & \times \int_0^A \left\{ d^d \mathbf{q} \frac{\left(\frac{1}{2}\mathbf{k} + \mathbf{q}\right)\left(\frac{1}{2}\mathbf{k} - \mathbf{q}\right)}{(2\pi)^d} \right. \\ & \times G_0\left(\frac{1}{2}\mathbf{k} + \mathbf{q}, \frac{1}{2}\omega + \Omega\right) \\ & \times G_0\left(\frac{1}{2}\mathbf{k} - \mathbf{q}, \frac{1}{2}\omega - \Omega\right) \\ & \left. \times 2\pi F \delta\left(\frac{1}{2}\omega + \Omega\right) \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

取流体力学极限^[18] $k \rightarrow 0$ 和 $\omega \rightarrow 0$,并在 $G'_0(\mathbf{k}, 0)$ 的积分计算中仅考虑 k 的零次项,则有

$$\frac{1}{\nu'} = \frac{1}{\nu} + \frac{K_d A^{d-2} \lambda F}{2(d-2)\nu^3}. \quad (11)$$

这里 A 为波矢 \mathbf{k} 的截止值;

$$K_d = \frac{S_d}{(2\pi)^d} = \frac{S_{d-1}}{(2\pi)^d} \int_0^\pi d\theta \sin^{d-2} \theta,$$

其中 S_d 为 d 维空间中单位球体的表面积. 从(11)式不难发现: 当非均匀生长率项不存在时, ν' 的值与 ν 的值近似相等; 而当非均匀生长率项存在时, ν' 的值与 ν 的值不同. 若 F 足够大, 则根据(11)式 ν' 可近似表示为

$$\nu' = \frac{2(d-2)\nu^3}{K_d A^{d-2} \lambda F}. \quad (12)$$

本文只对点缺陷起主导作用(即 F 足够大时)的情况进行讨论. 根据以上所述不难看出, 点缺陷的存在导致原来的表面张力系数 ν 改变为有效的表面张力系数 ν' , ν' 和 ν 有不同的标度变换关系. 图2(a)对应的方程为

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu' \nabla^2 h - \kappa \nabla^4 h + \frac{\lambda}{2} |\nabla h|^2 + \eta. \quad (13)$$

方程(13)与原来的含噪声KS方程(2)在形式上是完全一样的, 只是有效表面张力系数 ν' 取代了原来的 ν .

3 动力学重正化群分析

通过变量代换 $u = -\nabla h(\mathbf{x}, t)$ 和 $f = -\nabla \eta(\mathbf{x}, t)$ 得到方程(13)的等效形式为

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & \nu' \nabla^2 u - \kappa \nabla^4 u - \lambda u \nabla u \\ & + f(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (14)$$

为了便于动力学重正化群分析, 将方程(14)和噪声关联式逐项作Fourier变换, 得到在动量空间中的主方程形式为

$$\begin{aligned} & (-i\omega + \nu \mathbf{k}^2 + \kappa \mathbf{k}^4) u(\mathbf{k}, \omega) \\ = & f(\mathbf{k}, \omega) - \frac{i\lambda}{2} \mathbf{k} \int_{q \leqslant \Lambda_0} \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \\ & \times \{ u(\mathbf{q}, \Omega) u(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \Omega) \}. \end{aligned} \quad (15)$$

(15)式中的积分动量有一个上截止 $\Lambda_0 \equiv \pi/\Delta x$, $\Delta x = L/N$ 表示实际空间中的格子间隔, L 和 N 分别表示系统尺寸和格子数, 为了不失一般性, 在计算过程中 Λ_0 可以取为1. 噪声 $f(\mathbf{x}, t)$ 在Fourier空间满足

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{k}, \omega) f(\mathbf{k}', \omega') \rangle = & 2(2\pi)^{d+1} D \mathbf{k}^2 \\ & \times \delta^d(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \delta(\omega + \omega'). \end{aligned} \quad (16)$$

根据重正化群方法的通常处理方法^[18,20], 将 $u(\mathbf{k}, \omega)$ 分成“快模” $u^>(\mathbf{k}, \omega)$ 和“慢模” $u^<(\mathbf{k}, \omega)$ 两个部分, 对应的波数满足 $\Lambda_l \equiv \Lambda_0 e^{-l} \leqslant |\mathbf{k}| \leqslant \Lambda_0$

和 $|\mathbf{k}| \leq \Lambda_l$, 其中 l 为局域系统尺度. 可以先通过积分运算将“快模”部分 $u^>(\mathbf{k}, \omega)$ 消去, 剩下的“慢模” $u^<(\mathbf{k}, \omega)$ 满足

$$\begin{aligned} & [-i\omega + \nu\mathbf{k}^2 + \kappa\mathbf{k}^4 + \Sigma(\mathbf{k}, \omega)]u^<(\mathbf{k}, \omega) \\ &= f^<(\mathbf{k}, \omega) - \frac{i\lambda}{2}\mathbf{k} \int_{q \leq \Lambda_l} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \\ & \quad \times \{u^<(\mathbf{q}, \Omega)u^<(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \Omega)\}, \end{aligned} \quad (17)$$

而 $f^<(\mathbf{k}, \omega)$ 满足

$$\begin{aligned} & \langle f^<(\mathbf{k}, \omega)f^<(\mathbf{k}', \omega') \rangle \\ &= 2(2\pi)^{d+1}[D\mathbf{k}^2 + \Phi(\mathbf{k}, \omega)]\delta^d(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \\ & \quad \times \delta(\omega + \omega'). \end{aligned} \quad (18)$$

等式 (17) 和 (18) 中的 $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ 和 $\Phi(\mathbf{k}, \omega)$ 的单圈近似结果分别为

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) &= \lambda^2 \int_{\Lambda_l}^{\Lambda_0} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \{ \mathbf{k}(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \\ & \quad \times |G_0(\mathbf{q}, \Omega)|^2 G_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \Omega) D\mathbf{q}^2 \\ & \quad + \mathbf{k}\mathbf{q}|G_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \Omega)|^2 \\ & \quad \times G_0(\mathbf{q}, \Omega) D(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2 \} \end{aligned} \quad (19)$$

和

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{k}, \omega) &= \lambda^2 \int_{\Lambda_l}^{\Lambda_0} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \{ \mathbf{k}^2 |G_0(\mathbf{q}, \Omega)|^2 \\ & \quad \times |G_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - \Omega)|^2 \\ & \quad \times D\mathbf{q}^2 D(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2 \}, \end{aligned} \quad (20)$$

式中

$$G_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\nu'\mathbf{k}^2 + \kappa\mathbf{k}^4 - i\omega}.$$

系统在流体力学极限 ($k \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$) 下的标度行为才是有意义的, 因此先将 (19) 和 (20) 式的右边对 Ω 积分, 然后取 $\omega = 0$, 再进行泰勒级数展开并保留到 k^4 项, 最后根据动力学重正化群方法, 通过积分运算消去“快模”部分后使系统恢复原状, 需对变量进行重新标度, $k \rightarrow (1 + \delta l)k$, $\omega \rightarrow (1 + z\delta l)\omega$, $u(\mathbf{k}, \omega) \rightarrow [1 - (\alpha + z)\delta l]u^<(\mathbf{k}, \omega)$. 重新标度后的参数和有效重正化参数的关系为

$$\begin{aligned} \nu' &= [1 + (z - 2)\delta l]\nu'^<, \\ \kappa &= [1 + (z - 4)\delta l]\kappa^<, \\ \lambda &= [1 + (z + \alpha - 2)\delta l]\lambda^<, \end{aligned}$$

$$D = [1 + (z - 2\alpha - d)\delta l]\nu'^<.$$

将计算结果代入并经整理后得到表示含噪声 KS 方程中参数变化的重正化流方程如下:

$$\begin{aligned} \frac{d\nu'}{dl} &= \nu' \left(z - 2 + \frac{\lambda^2 D}{\nu} K_d \right. \\ & \quad \times \left. \frac{\nu(2-d) + \kappa(4-d)}{4d(\nu + \kappa)^3} \right), \\ \frac{d\kappa}{dl} &= \kappa \left(z - 4 + \frac{\lambda^2 D}{\kappa} K_d \right. \\ & \quad \times \left. \frac{a_0\nu^3 + a_1\nu^2\kappa + a_2\nu\kappa^2 + a_3\kappa^3}{16d(d+2)(\nu + \kappa)^5} \right), \\ \frac{d\lambda}{dl} &= \lambda(\alpha + z - 2), \\ \frac{dD}{dl} &= D \left(z - 2\alpha - d + \lambda^2 D K_d \frac{1}{4(\nu + \kappa)^3} \right), \end{aligned} \quad (21)$$

其中

$$\begin{aligned} a_0 &= 3d(d - 2), \\ a_1 &= 11d^2 - 24d - 20, \\ a_2 &= 13d^2 - 40d - 60, \\ a_3 &= 5d^2 - 22d - 16. \end{aligned}$$

为简单起见, 仅讨论 $1 + 1$ 维生长, 根据方程组 (21) 可以解得粗糙度指数 α 和动力学指数 z 分别为 $\alpha = 1.46$, $z = 0.54$. 根据文献 [12,19], 由一般的含噪声 KS 方程得到的结果是 $\alpha = 0.5$, $z = 1.5$. 本文的计算结果表明, 点缺陷的存在使生长表面粗化, 并缩短了达到稳定生长阶段的弛豫过程.

4 结 论

本文基于 KS 方程, 采用动力学重正化群方法分析了点缺陷或杂质的存在对表面生长行为的影响. 分析表明, 点缺陷或杂质的存在对表面生长行为产生的影响可归结为一个有效表面张力系数 ν' . 计算得到了相应的标度指数 $\alpha = 1.46$ 和 $z = 0.54$. 研究表明: 当表面上的点缺陷势较弱时, 对表面的生长行为几乎没有影响; 但当点缺陷引起的非均匀生长率项较大时, 会改变表面生长的标度行为, 使生长表面粗化并缩短达到稳定生长阶段的弛豫过程.

- [1] Family F, Vicsek T 1991 *Dynamics of Fractal Surfaces* (Singapore: World Scientific Press)
- [2] Barabasi A L, Stanley H E 1995 *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [3] Xia H, Tang G, Han K, Hao D P, Chen H, Zhang L M 2006 *Mod. Phys. Lett. B* **20** 30
- [4] Lee C H, Lee S B 2010 *Physica A* **389** 5053
- [5] Ma B K, Chu W D, Tang G 1999 *J. Beijing Normal Univ. (Nat. Sci.)* **35** 336 (in Chinese) [马本堃, 楚卫东, 唐刚 1999 北京师范大学学报(自然科学版) **35** 336]
- [6] Tang G, Ma B K 2001 *Phys. Rev. E* **63** 021106
- [7] Chou Y L, Michel P, Zia R K 2009 *Phys. Rev. E* **80** 061602
- [8] Hu B, Tang G 2002 *Phys. Rev. E* **66** 026105
- [9] Halpin H T, Zhang Y C 1995 *Phys. Rep.* **254** 215
- [10] Family F, Vicsek T 1985 *J. Phys. A* **18** L75
- [11] Cuerno R, Barabasi A L 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4746
- [12] Cuerno R, Lauritsen K B 1995 *Phys. Rev. E* **52** 4853
- [13] Doherty J P, Moore M A, Kim J M, Bray A J 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 2041
- [14] Colaiori F, Moore M A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3946
- [15] Hao D P, Tang G, Xia H, Chen H, Zhang L M, Xun Z P 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2018 (in Chinese) [郝大鹏, 唐刚, 夏辉, 陈华, 张雷明, 寻之朋 2007 物理学报 **56** 2018]
- [16] Grousson M, Krakoviack V, Tarjus G, Viot P 2002 *Phys. Rev. E* **66** 026126
- [17] Medina E, Hwa T, Kardar M, Zhang Y C 1989 *Phys. Rev. A* **39** 3053
- [18] Kardar M, Parisi G, Zhang Y C 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 889
- [19] Ueno K, Sakaguchi H, Okamura M 2005 *Phys. Rev. E* **71** 046138
- [20] Forster D, Nelson D, Stephen M J 1977 *Phys. Rev. A* **16** 732

The effects of point-defects on the dynamic scaling of growing surfaces

Zhang Lei-Ming^{1)†} Xia Hui²⁾

1) (Xuhai College, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221008, China)

2) (Department of Physics, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221008, China)

(Received 26 January 2011; revised manuscript received 14 December 2011)

Abstract

The dynamic scaling properties of growing surfaces with point-defects are studied by applying the dynamic renormalization-group approach to the noisy Kuramoto-Sivashinsky equation with an additional term of point-defects potential. From the roughness and the dynamic exponents α and z obtained here it follows that point-defects tend to roughen the growing surface and shorten its dynamic relaxation process to a steady-growth state.

Keywords: surface growth, dynamic renormalization-group approach, point-defects

PACS: 68.35.Ct, 64.60.Ht, 05.70.Np

† E-mail: zlm81@126.com