第45卷 第5期 1996年5月
1000-3290/96/45(05)/0826-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 45, No. 5, May, 1996

直接标度分析动力生长*

韩 飞
(北京邮电大学基础部,北京 100088)
马本堃
(北京师范大学物理系,北京 100875)
(1994年12月26日收到)

用直接标度分析方法研究了分子束外延生长和在长程时间、空间关联条件下的动力生长过程.分别得到了在强、弱耦合区的粗糙指数和动力学指数,并对其结果进行了讨论,说明了其弱耦合的结果与动力重整化群的结果一致的原因.

PACC: 6830

1 动力生长现象

表面和界面的动力生长一直是一个对理论和实践都富有挑战性的问题[1—11],许多生长现象都与它密切相关.如分子束外延生长和化学沉积的层状生长,有序相的亚稳分解和扩散控制聚集生长(DLA)等等.这些现象的共同之处是都具有一个活跃的表面和界面.人们通过研究发现,生长表面和界面在时间和空间上满足标度关系,即有

$$w(L,t) = [< h^2(L,t) >]^{\frac{1}{2}} \approx L^{\alpha} f(t/L^{z}),$$

式中 w 是平均界面宽度,h 是界面高度,L 是特征长度,α 是表面粗糙指数,z 是生长动力学指数,f 是标度函数,最早是由 Family 和 Vicsek 引入的[5],具有如下性质:

$$y \ll 1 \text{ 时}, f(y) \approx y^{\frac{\alpha}{z}},$$
$$y \gg 1 \text{ 时}, f(y) \to \text{常数},$$

指数 α, z 和标度函数 f 便描述了界面的特征.对界面动力生长现象的研究大量的是数值模拟工作[8—10,12,13],结果都证实了这种标度关系.近来,在临界现象中获得了很大成功的重整化群方法,被发展运用到了界面生长动力学的研究之中,取得了很大进展[14—18],其中比较成功的是 Kardar, Parisi 和 Zhang(KPZ)提出的扩展的 Burgers 方程,这是一个含时的非线性偏微分方程(简称 KPZ 方程),其形式为[6]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2 + \eta(x,t),$$
$$< \eta(x,t) > = 0,$$

---

* 高等学校博士学科点专项科研基金资助项目.

$$< \eta(x,t)\eta(x',t') > = 2D\delta(x-x')\delta(t-t').$$

KPZ 在提出方程的同时，就首先采用了动力重整化群方法求解了白噪声相关下的 KPZ 方程在一维生长方向下的结果. Medina, Hwa, Kardar 和 Zhang(MHKZ)发展了这一结果，研究了该方程在长程时间、空间关联条件下的结果[18]. Sun, Guo 和 Grant(SGG)分析了在序参量守恒系统中类似的方程[17]，得到了和他们在一维界面守恒系统中固固模型上数值模拟符合得很好的结果. Lam 和 Family[19]进一步发展了 SGG 的工作，研究了在空间相关条件下的守恒系统. 我们则研究了在时间、空间相关条件下的守恒系统，得到了很好的结果[20—22]. Lai 和 Sarma 对分子束外延生长过程进行了研究，用动力重整化群方法得到了和数值模拟结果非常符合的结果[23].

2 直接标度分析

前面已看到 KPZ 方程对描述动力生长现象取得了很大的成功，得到了许多结果. 但是对于这一非线性的偏微分方程，在更多的情况下，其重整化方程不可解或是求解过程非常复杂. 另一方面，直接的数值解法，能够提供直观的、近似的标度指数值，但又不能给出普适的规律和渡越行为，不能给出生长过程的更深入的物理信息，故发展一种能够在不同条件、不同空间维情况下，决定动力生长方程标度指数的方法是十分必要的. 最近 Hentschel 和 Family(HF)提出了一种研究动力耗散系统中动力生长方程标度行为的方法[24]. 该方法在本质上同 Kolmogorov 在分析完全发达的湍流上所用的方法类似. 基于 Langevin 方程与受力的 Navier - Stokes 方程形式相似，该方法可以看作是 Flory 的平衡标度理论的非平衡等价形式. 在他们的文献中，他们使用这种方法处理了几个模型，从 KPZ 的生长方程中得到了 Kim - Kosterlitz 指数，给出了 SGG 方程的标度指数，还研究了自组织临界现象的标度指数、色噪声相关和退火无序条件下 KPZ 方程的标度指数. HF 的直接标度分析可以通过合理的估测，迅速得到较准确的标度指数，提供了一种有效的方法，使人们对动力生长标度指数的研究进了一步[25]，但是针对每一个具体问题，都得出两套标度指数，他们没有能够很好地说明这两套指数的物理原因. 本文通过求解几个实际的动力生长过程来说明我们的物理思想.

我们研究在理想的生长条件下的分子束外延生长过程，即是粒子随机生长，没有任何的体缺陷和表面悬挂，生长满足质量守恒，用以下方程描述：

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nu\nabla^4 h + \frac{\lambda}{2}\nabla^2(\nabla h)^2 + \eta(x,t),$$

相关满足高斯相关形式

$$< \eta(x,t)\eta(x',t') > = 2D\delta(x-x')\delta(t-t').$$

直接标度分析的做法是，考虑在一个长的时间 $t \gg t_l$ 和长度标度 l 上作平均，典型的界面生长高度的幅值涨落可作如下估计：

$$< [h(x+l,t) - h(x,t)]^2 >_l \sim h_l^2,$$

于是，在线度 l 上，除了噪声项，方程中的各项可以作如下估计：

$$< \frac{\partial h}{\partial t} >_l \sim \frac{h_l}{t_l},$$

$$< \nabla^4 h >_l \sim \frac{h_l}{l^4},$$

$$< \nabla^2 (\nabla h)^2 >_l \sim \frac{h_l^2}{l^4}.$$

进一步估计在这个时间和长度标度上噪声的幅度,对于白噪声,我们估计其均方涨落为

$$\eta_l \sim \left[\frac{D}{S_l t_l}\right]^{\frac{1}{2}},$$

式中 S 是在线度 l 上的生长界面的平均表面积,我们估计其在线度上为

$$S_l \sim [h^2 + l^2]^{(d-1)/2}.$$

这样对于光滑表面,有

$$\eta_l \sim \left[\frac{D}{l^{d-1} t_l}\right]^{\frac{1}{2}}.$$

对于粗糙表面,则有

$$\eta_l \sim \left[\frac{D}{h^{d-1} t_l}\right]^{\frac{1}{2}}.$$

为了得到粗糙化和动力学指数,我们研究比值 k

$$k = \frac{< \nabla^2 (\nabla h)^2 >_l}{< \nabla^4 h >_l} \doteq h_l.$$

在作标度研究时,$l \to \infty$,有 $h_l \to \infty$,这里我们考虑在一个充分长的线度上,方程中的非线性项将统治表面扩散,起主要作用.使$\frac{\partial h}{\partial t}$项与非线性项相等,给出典型的涨落持续时间

$$t_l \sim \frac{l^4}{\lambda h_l},$$

其标度行为给出

$$\alpha + z = 4.$$

用光滑噪声估计与惯性项相等,得

$$h_l \sim \left(\frac{D}{\lambda}\right)^{1/3} l^{(5-d)/3},$$

结果给出

$$\alpha = (5 - d)/3.$$

用 t 重新表示 h_l,得

$$h_l \sim D^{4/(7+d)} \lambda^{(1-d)/(7+d)} t^{(5-d)/(7+d)},$$

故

$$\beta = (5 - d)/(7 + d), \beta = \alpha / z.$$

如果用粗糙噪声估计与惯性项相等,得

$$h_l \sim \left(\frac{D}{\lambda}\right)^{1/(d+2)} l^{4/(d+2)},$$

结果得出

$$\alpha = 4/(d+2).$$

同样用 t 再来表示 h_l，可以得

$$h_l \sim D^{1/(d+1)} t^{1/(d+1)},$$

故

$$\beta = 1/(d+1).$$

至此，我们得到了关于分子束外延生长过程的两套标度指数.

接着研究在空间相关条件下的 MHKZ 方程[18]. 在光滑噪声区，我们估计噪声形式为

$$\eta_l \sim \left[\frac{D}{l^{2\rho+d'} t_l}\right]^{\frac{1}{2}},$$

式中 $d' = d - 1$，得

$$\alpha = (2 - d' + 2\rho)/3,$$
$$\beta = (4 + d' - 2\rho)/3.$$

在粗糙噪声区，我们估计噪声形式为

$$\eta_l \sim \left[\frac{D}{h^{-2\rho+d-1} t_l}\right]^{\frac{1}{2}},$$

得

$$\alpha = 2/(2 + d - 2\rho),$$
$$\beta = 1/(1 + d - 2\rho).$$

再进一步研究具有时空相关的 KPZ 方程，用同样的方法，得到在光滑噪声区

$$\eta_l \sim \left[\frac{D}{l^{d-1} t^{-2\theta+1}}\right]^{\frac{1}{2}},$$
$$\alpha = (2 - d + 4\theta)/(3 + 2\theta),$$
$$z = (4 + d)/(3 + 2\theta).$$

这结果与我们用动力重整化群的结果完全一致[20]. 在粗糙噪声区，得

$$\eta_l \sim \left[\frac{D}{h^{d-1} t_l^{-2\theta+1}}\right]^{\frac{1}{2}},$$
$$\alpha = (2 + 4\theta)/(2 + d + 2\theta),$$
$$z = (2d + 2)/(2 + d + 2\theta).$$

这是以前所没有见到的新的结果.

3 结果的物理分析

从以上三个方程的直接标度指数研究结果可以看到，直接标度分析方法的主要工作是估计各有标度贡献项在一定的线度和时间标度上的幅度，其中关键是确定噪声项的估计. 我们在实际计算中发现，其依据是在动力生长中，最终对标度指数有贡献的项，应具有相同的幅度，这便是建立惯性项与非线性项及噪声项相等的基础. 从这些等式关系，我们得到了标度指数.

直接标度指数分析得到两套标度指数是对噪声项作两种分析的结果. 噪声项反映生长点之间的相互关联,我们将其估计为

$$\eta_l \sim \left[\frac{D}{S_l t_l}\right]^{\frac{1}{2}},$$

式中

$$S_l \sim [h^2 + l^2]^{(d-1)/2}.$$

我们对于光滑表面和粗糙表面不同形式的噪声估计出于对微粒间不同相互作用情况的考虑. 考虑粒子之间是弱耦合的,则相关主要来自于长度 l 内的随机的位置取舍. 若考虑粒子是强耦合的,其间相互制约,相互影响,则粒子间的作用成为相关的主要部分. 我们前面的两种估计正反映了这两个方面的极限.

具体分析其标度指数值,我们发现,其光滑区的结果正是以往动力重整化群的结果,这是因为我们以往的动力重整化群的结果正是处理的这些耦合较弱,非线性作用因子

$$g = \frac{\lambda^{d-1} D}{\nu^d} \ll 1$$

的情况.

[1] D. Jasnow, Phase Transitions and Critical Phenomena (Academic, London, 1986), Vol. 10.
[2] D. Gunton, M. San Miguel and P. S. Sahni, Phase Transitions and Critical Phenomena (Academic, London, 1983), Vol. 8.
[3] P. Pelcé, Dynamics of Curved Fronts (Academic, Boston, 1988).
[4] H. E. Stanley and N. Ostrowsky, on Growth and Form (Martinus Nijhoff, Dordrecht, 1985); F. Family and D. P. Landau, Kinetics of Aggregation and Gelation (North-Holland, Amsterdam, 1984).
[5] F. Family and T. Vicsek, Dynamics of Fractal Surfaces (World Scientific, Singapore, 1991).
[6] M. Kardar, G. Parisi and Y. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 889.
[7] J. M. Kim and J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 2289.
[8] F. Family and T. Vicsek, *J. Phys. A*, **18**(1985), L75; P. Meakin and R. Jullien, *J. Phys. (Paris)*, **48**(1987), 1651; D. Liu and M. Plischke, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 4781.
[9] M. Plischke and Z. Racz, *Phys. Rev.*, **A32**(1985), 3825.
[10] P. Meakin, P. Ramanlal, L. M. Sander and R. C. Ball, *Phys. Rev.*, **A34**(1986), 5091; M. Plischke, Z. Racz and D. Liu, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 3485.
[11] M. Kardar and Y. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 2087; D. E. Wolf and J. Kertesz, *J. Phys. A*, **20**(1987), L257.
[12] R. Jullien and R. Botet, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 2055; *J. Phys. A*, **18**(1985), 2279.
[13] J. G. Zabolitzky and D. Stauffer, *Phys. Rev.*, **A34**(1986), 1523; *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 1809.
[14] S. K. Ma, Modern Theory of Critical Phenomena (Benjamin, Reading, 1976).
[15] P. C. Hohenberg and B. L. Halperin, *Rev. Mod. Phys.*, **49**(1977), 435 and reference therein.
[16] D. Forster, D. R. Nelson and M. J. Stephen, *Phys. Rev.*, **A16**(1977), 732.
[17] T. Sun, H. Guo and M. Grant, *Phys. Rev.*, **A40**(1989), 6763.
[18] E. Medina, T. Hwa, M. Kardar and Y. C. Zhang, *Phys. Rev.*, **A39**(1989), 3053.
[19] P. M. Lam and F. Family, *Phys. Rev.*, **A44**(1991), 7939.
[20] Han Fei and Ma Benkun, *Phys. Rev.*, **E47**(1993), 4572.
[21] 韩飞、马本堃,物理学报,**42**(1993), 1806.
[22] 韩飞、马本堃,物理学报,**42**(1993), 1812.
[23] Z. W. Lai and S. D. Sarma, *Phys. Rev. Lett.*, **66**(1991), 2384.
[24] H. G. E. Hentschel and F. Family, *Phys. Rev. Lett.*, **66**(1991), 1982.
[25] Han Fei and Ma Benkun, *Phys. Rev.*, **E47**(1993), 3738.

SCALING ANALYSIS OF DYNAMIC GROWTH

HAN FEI
(*Basic Science, Beijing Posts and Telecommunications University, Beijing* 100088)
MA BEN-KUN
(*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing* 100875)
(Received 26 December 1994)

ABSTRACT

Molecular-beam epitaxy and dynamic growth with long-range space and temporal correlations are analysed using scaling analysis approach. Rough and dynamic exponents are gained in strong-coupling and weak-coupling region respectively. Discussions are given and the reason why the weak-coupling region results are agree with that of dynamical renormalization group is also explained.

PACC: 6830