

13,19

## Плавление наноразмерных слоистых структур в обобщенной модели Пьетронеро—Тосатти

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
Санкт-Петербург, Россия  
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,  
Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: Sergei\_Davydov@mail.ru

(Поступила в Редакцию 4 февраля 2015 г.)

В рамках модифицированной модели Пьетронеро—Тосатти рассмотрено плавление (возникновение термической неустойчивости) свободных и эпитаксиальных пленок конечной толщины и полубесконечного кристалла. Определены температуры плавления и средние квадратичные смещения отдельных слоев.

### 1. Введение

Расчет температуры плавления является классической задачей физики твердого тела, хотя всеохватывающей и общепринятой теории плавления до сих пор не существует [1–5]. Не новой является и проблема влияния поверхности на температуру плавления [6,7]. Здесь, однако, считается установленным, что поверхность играет важную, если не ведущую роль в процессе плавления [4,5]. Экспериментальные и теоретические исследования тонких пленок и малых частиц показали, что их температура плавления  $T_s$  меньше  $T_b$ , ( $T_b$  — температура плавления массивного образца). Более того, было установлено, что величина  $T_s$  понижается с уменьшением характерного размера малого объекта. При этом понижение  $T_s$  по сравнению с  $T_b$  может достигать сотен градусов.

Среди разнообразных моделей, тем или иным образом учитывающих роль поверхности, простейшей, по-видимому, является модель Пьетронеро—Тосатти (ПТ), предложенная в [8] и нашедшая впоследствии определенное экспериментальное подтверждение [9,10], но встретившая и некоторую критику [11]. В модели ПТ полубесконечный кристалл (ПБК), образованный одинаковыми атомами, рассматривался как набор эквидистантно расположенных плоскостей, испытывающих сдвиговые колебания с атомными смещениями, лежащими в плоскостях. Было показано, что температура  $T_s$ , при которой возникает упругая неустойчивость поверхности (см. далее), меньше температуры  $T_b'$ , при которой имеет место неустойчивость в объеме. С некоторыми оговорками (см., например, [8–11]) эти температуры могут быть сопоставлены соответственно поверхностной  $T_s$  и объемной  $T_b$  температурам плавления.

В настоящей работе представлена обобщенная модель ПТ, в рамках которой рассмотрены свободные и эпитаксиальные тонкие пленки, состоящие всего из нескольких слоев, тем или иным образом отличных друг от друга. Интерес к такого рода задачам усилился благодаря исследованиями графена [12–17] и других двумерных

гексагональных структур (силицена, германена, нитрида бора и т. д., см. работу [18] и ссылки, приведенные в ней).

### 2. Обобщенная модель Пьетронеро—Тосатти

Рассмотрим, как и в [8], поперечную моду в ПБК, которая, как известно, наиболее чувствительна к неустойчивости. Соответствующие сдвиговые колебания с параллельными поверхности смещениями  $u_n$  атомов  $n$ -го слоя, где  $n = 1, 2, 3, \dots$  отсчитывается от поверхности, описываются уравнениями вида

$$M_n \ddot{u}_n + K_{n,n-1}(u_n - u_{n-1}) + K_{n,n+1}(u_n - u_{n+1}) = 0, \quad n \geq 2,$$

$$M_1 \ddot{u}_1 + K_{1,2}(u_1 - u_2) = 0. \quad (1)$$

Здесь  $K_{n,n'}$  — силовые константы взаимодействия ближайших соседей в плоскостях  $n$  и  $n'$ ;  $M_n$  — масса атомов  $n$ -го слоя. Положим  $K_{n,n'}$  равными  $\vartheta_{n,n'} K$ , где  $\vartheta_{n,n'} = \vartheta_{n',n}$  — фактор связи плоскостей  $n$  и  $n'$ . Отличие  $\vartheta_{n,n'}$  от единицы можно приписать вызванной наличием поверхности релаксации слоев внутрь ( $\vartheta_{n,n'} > 1$ ) или наружу ( $\vartheta_{n,n'} < 1$ ). При  $\vartheta_{n,n'} = 1$  приходим к модели ПТ [8].

При отличной от нуля температуре  $T$  в соответствии с самосогласованным квазигармоническим приближением [8,19–21] силовые константы могут быть представлены в виде

$$\tilde{K}_{n,n'} = K_{n,n'} \exp(-\lambda_n \langle u_n^2 \rangle - \lambda_{n'} \langle u_{n'}^2 \rangle), \quad (2)$$

где  $\langle u_n^2 \rangle$  — среднеквадратичное смещение (СКС) атомов в  $n$ -м слое,  $\lambda_n$  — соответствующая константа затухания. Для высоких температур (много выше дебаевской) имеем  $\langle u_n^2 \rangle = k_B T / (\tilde{K}_{n,n-1} + \tilde{K}_{n,n+1})$  для  $n \geq 2$  и  $\langle u_1^2 \rangle = k_B T / \tilde{K}_{1,2}$ , где  $k_B$  — постоянная Больцмана. Тогда

получаем самосогласованную систему уравнений

$$\vartheta_{n,n-1}e^{-Y_{n-1}} + \vartheta_{n,n+1}e^{-Y_{n+1}} = \frac{\tau_n}{Y_n} e^{Y_n}, \quad n \geq 2,$$

$$\vartheta_{1,2}e^{-Y_2} = \frac{\tau_1}{Y_1} e^{Y_1}, \quad (3)$$

где  $Y_n = \lambda_n \langle u_n^2 \rangle$  и  $\tau_n = k_B T \lambda_n / K$  — есть соответственно безразмерные СКС<sup>1</sup> и приведенные температурные параметры слоев. Переписывая (3) в виде, аналогичном приведенному в [8], имеем

$$Y_{n+1} = -\ln((\tau_n / \vartheta_{n,n+1} Y_n) e^{Y_n} - (\vartheta_{n,n-1} / \vartheta_{n,n+1}) e^{-Y_{n-1}}), \quad n \geq 2,$$

$$Y_2 = \ln(\vartheta_{1,2} Y_1 / \tau_1) - Y_1. \quad (4)$$

При  $\lambda_n = \lambda$  в пределе  $n \rightarrow \infty$  получим

$$\tau = 2Y_b \exp(-2Y_b). \quad (5)$$

Максимальное значение  $\tau$  реализуется при  $\bar{Y}_b = 1/2$  и равняется  $\tau_b = e^{-1} = 0.368$ . Это и есть безразмерная температура плавления безграничного твердого тела, состоящего из одинаковых атомных слоев [8].<sup>2</sup> При этом константа  $\bar{K}_b = K/e$ , что соответствует смягчению поперечной оптической моды. В [8] путем численных расчетов была определена поверхностная температура плавления  $\tau_s = 0.270$ , что существенно ниже  $\tau_b$ . Подчеркнем, что этот результат получен без учета релаксации поверхностного слоя. Таким образом, согласно модели ПТ, термическая неустойчивость (как начало процесса плавления) возникает в поверхностном слое и затем с повышением температуры распространяется в глубину кристалла.

Давая общую характеристику модели ПТ, можно отметить, что, с одной стороны, эта модель близка к критерию Линдемманна, связывающему температуру плавления с критической величиной отношения амплитуды тепловых колебаний (или квадратного корня из СКС) к постоянной решетки  $a$ . Действительно, в модели ПТ имеется критическое значение СКС, но параметр  $a$  в явном виде отсутствует. С другой стороны, идеологически существует близость и к критерию Борна, объясняющему плавление обращением в нуль модуля сдвига [4,5].<sup>3</sup> В модели ПТ, однако, модуль сдвига при температуре плавления хотя и ослабляется в  $e$  раз, но в нуль не обращается. Справедливости ради необходимо также указать, что сходный с [8], но более общий подход к проблеме развивался еще до появления модели ПТ в работах Мацубары и др. [22,23] (см. также [24,25] и ссылки, приведенные там).

<sup>1</sup> Отметим, что здесь введены безразмерные смещения  $Y_n = u_n/2$ , где  $u_n$  — смещения, использованные в [8].

<sup>2</sup> Здесь, по-видимому, правильнее говорить о термической неустойчивости, а не собственно о плавлении, так как жидкая фаза вообще не рассматривается. Однако мы в дальнейшем для краткости будем называть  $\tau_s$  температурой плавления.

<sup>3</sup> Сюда же можно отнести термоупругий критерий Херцфельда–Гёпперт-Майер, близкий к критерию Борна [5].

В заключение данного раздела обсудим параметр затухания  $\lambda_n$ , который в модели ПТ [8] принимался одинаковым для всех слоев и равным  $\lambda$ , но никак не конкретизировался. В одномерной модели [22], представляющей собой цепочку одинаковых эквидистантно расположенных атомов, испытывающих продольные колебания, параметр затухания, параметр  $\lambda = \beta^2$ , где  $\beta$  — обратная длина затухания для потенциала Морзе ( $V_M = D[\exp(-2\beta u) - 2\exp(-\beta u)]$  ( $u$  — смещение,  $D$  — энергия связи), описывающего взаимодействие ближайших соседей (в трехмерном случае [23] использовался гауссов потенциал). Обобщая, можно ввести для каждого слоя свои параметры  $\beta_n$  и  $D_n$ , определив тем самым  $\lambda_n$ . Можно также по аналогии с [26] сопоставить  $\lambda_n$  величину  $q_n^2$ , где  $q_n$  — волновой вектор, определяющий Фурье-образ потенциала взаимодействия атомов  $V_{nq} \propto \exp(-q^2 \langle n_n^2 \rangle)$  в  $n$ -м слое. Вообще говоря, экспонента в формуле (2) аналогична фактору Дебая–Уоллера (см. подробнее [19–21]).

### 3. Тонкие пленки

Будем рассматривать свободные пленки как наборы одинаковых эквидистантно расположенных  $N$  слоев ( $N = 1, 2, \dots, n$ ), полагая в системе уравнений (4) все  $\vartheta_{n,n'} = 1$  и  $\tau_n = \tau$ . Из соображений симметрии имеем  $Y_1 = Y_n$ ,  $Y_2 = Y_{n-1}$  и т.д., для нечетных  $N$  отдельно учитывается СКС внутренней центральной плоскости.

Рассмотрим двухслойную пленку, полагая  $Y_1 = Y_2 = Y$ . Тогда последнее из уравнений (4) преобразуется в

$$2Y = \ln(Y/\tau). \quad (6)$$

Отсюда получаем температуру плавления  $\tau_s = 1/2e = 0.184$  и СКС при этой температуре  $Y_1^* = Y_2^* = Y^* = 0.5$ .

Пусть теперь  $N = 3$ . Тогда из (4) с учетом симметрии  $Y_1 = Y_3$  получим

$$Y_1 = -\ln((\tau/Y_2)e^{Y_2} - e^{-Y_1}),$$

$$Y_2 = -\ln(Y_1/\tau) - Y_1, \quad (7)$$

отсюда  $\tau_s = 2/3e = 0.249$ ,  $Y_1^* = Y_3^* = 2/3$ ,  $Y_2^* = 1/3$ .

Для  $N = 4$  имеем

$$Y_2 = -\ln((\tau/Y_2)e^{Y_2} - e^{-Y_1}),$$

$$Y_2 = \ln(Y_1/\tau) - Y_1, \quad (8)$$

что дает  $\tau_s \approx 0.264$ ,  $Y_1^* = Y_4^* \approx 0.87$ ,  $Y_2^* = Y_3^* \approx 0.32$ .

При  $N = 5$  получаем

$$Y_2 = -\ln((\tau/Y_3)e^{Y_3} - e^{-Y_2}),$$

$$Y_3 = -\ln((\tau/Y_2)e^{Y_2} - e^{-Y_1}),$$

$$Y_2 = \ln(Y_1/\tau) - Y_1, \quad (9)$$

Эта система уравнений имеет следующие решения:  $\tau_s \approx 0.27$ ,  $Y_1^* = Y_5^* \approx 0.95$ ,  $Y_2^* = Y_4^* \approx 0.31$ ,  $Y_3^* \approx 0.22$ .

Отношения  $\tau_s/\tau_b$ ,  $Y_b^*/Y_s^*$  и  $Y_c^*/Y_s^*$  для  $N$ -слойных пленок

Параметр	$N = 2$	$N = 3$	$N = 4$	$N = 5$	ПБК [8]
$\tau_s/\tau_b$	0.50	0.67	0.72	0.73	0.74
$Y_b^*/Y_s^*$	1.00	0.75	0.57	0.53	0.63
$Y_c^*/Y_s^*$	—	0.50	0.37	0.23	—

Таким образом, в пятислойной пленке значение  $\tau_s$  практически совпадает с температурой плавления ПБК. При этом СКС центральной плоскости  $Y_3^*$  близко к объемному значению  $Y_b = 0.20$  при  $\tau = \tau_s = 0.270$  в ПБК. СКС поверхностной плоскости ПБК при  $\tau_s = 0.270$  равно 0.8 (см. рис. 2 из [8] и сноску<sup>1</sup> настоящей работы), тогда как в пятислойной пленке оно равно 0.95, что также можно считать достаточно близкими значениями.

Итак, в случае свободной пленки с увеличением числа слоев растут значения как поверхностной температуры плавления, так и поверхностных СКС. Что касается температуры плавления, то, как уже отмечалось во Введении, эффект ее понижения с уменьшением характерного размера системы давно и твердо установлен [4–7,27]. К сожалению, поставить эксперимент с абсолютно свободными пленками практически невозможно, так что приходится прибегать к искусственным приемам (см., например, [28–30]).

Большинство теоретических работ относится к многослойным пленкам толщиной порядка нескольких десятков нанометров. Так, например, в [31,32] было предложено соотношение

$$T_m(H)/T_m(\infty) = \sigma^2(\infty)/\sigma^2(H), \quad (10)$$

где  $T_m(H)$  и  $\sigma^2(H)$  — температура плавления и некоторые эффективные СКС, характерные для пленки толщиной  $H$ ;  $T_m(\infty)$  и  $\sigma^2(\infty)$  — те же величины, но для бесконечного кристалла.<sup>4</sup> В таблице приведены полученные нами значения  $\tau_s/\tau_b$ ,  $Y_b^*/Y_s^*$  и  $Y_c^*/Y_s^*$ , где  $Y_c^*$  — СКС центральной плоскости (при  $\tau = \tau_s$ ),  $Y_b^* = 0.5$  (при  $\tau = \tau_b$ ) для  $N$ -слойных пленок. Из таблицы следует, что в рамках модели ПТ формула (10) неприменима: отношения  $Y_b^*/Y_s^*$  и  $Y_c^*/Y_s^*$  убывают с ростом  $N$ , тогда как  $\tau_s/\tau_b$  растет. Добавим, что значения  $Y_b^*/Y_s^*$ , приведенные в таблице, с качественной точки зрения вполне удовлетворительно согласуются с результатами Мацубары и др. как для одномерного [22], так и для трехмерного [23] ПБК.

#### 4. Эпитаксиальные пленки

Рассмотрим двухслойную систему. Будем считать, что подложка моделируется единственным слоем (плоскость 2) с СКС  $Y_2 = Y_b$ , а моноатомной пленке отвечает СКС  $Y_1$ . Тогда из последнего уравнения системы (4)

<sup>4</sup> Неясно, однако, к какой температуре в этом соотношении относятся СКС  $\sigma^2(H)$  и  $\sigma^2(\infty)$ .

получим

$$Y_b = \ln(\vartheta Y_1/\tau) - Y_1,$$

где  $\vartheta = \vartheta_{1,2}$  и  $\tau = \tau_1$ . Отсюда следует, что  $\tau < \vartheta/e$ . С учетом (5) имеем

$$Y_1 - Y_b = \ln\left(\frac{\vartheta Y_1}{2Y_b}\right), \quad (11)$$

что дает

$$\tau_s = \frac{2}{\vartheta} \exp(-2/\vartheta). \quad (12)$$

Результаты расчета представлены на рис. 1. Из рисунка следует, что с ростом фактора связи  $\vartheta$  температура плавления  $\tau_s$  монотонно возрастает и достигает при  $\vartheta = 2$  максимума, равного объемной температуре плавления  $\tau_b$ . Для подложки значение  $Y_b^*$ , отвечающее температуре  $\tau_s$ , растет с  $\vartheta$  почти линейно вплоть до величины  $Y_b^* = 0.5$ , которая равняется максимальному значению СКС ПБК при объемной температуре плавления  $\tau_b = e^{-1}$ , что имеет место при  $\bar{\vartheta} = 2$ . Для моноатомной пленки зависимость  $Y_1^*(\vartheta)$  при  $\bar{\vartheta} \approx 1.2$  имеет максимум, равный 0.674. Легко показать, что значение  $\bar{\vartheta}$  определяется с помощью уравнения  $[Y_b^{-1}(\bar{\vartheta}) - 1](dY_b/d\vartheta)_{\bar{\vartheta}} = \bar{\vartheta}^{-1}$ .

Таким образом, близкий к линейному рост  $\tau_s$  с  $\vartheta$  в области  $\vartheta < 1$  сопровождается почти линейным возрастанием  $Y_1^*$ . При  $\vartheta > 1$ , когда  $\tau_s$  меняется слабо, СКС плоскости 1 уменьшается и при  $\vartheta = 2$  становится равным СКС плоскости 2, т.е. объемному значению:  $Y_1^* = Y_b(\tau_b)$ . Наличие максимума у функции  $Y_1^*(\vartheta)$  является интересным обстоятельством, аналога которому нам в литературе найти не удалось.

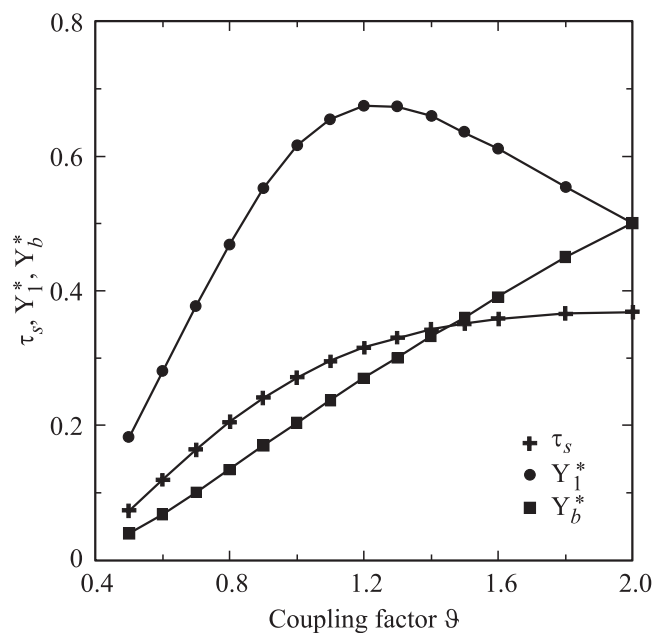


Рис. 1. Двухслойная модель эпитаксиальной пленки: зависимости температуры плавления поверхности  $\tau_s$  и соответствующих этой температуре среднеквадратичных смещений атомов в пленке  $Y_1^*$  и подложке  $Y_b^*$  от фактора связи  $\vartheta$ .

Отметим, что двухслойную модель можно использовать для описания монослоя (плоскость 1), адсорбированного, например, на однолистном графене (плоскость 2) или иной двумерной структуре. Следует, однако, подчеркнуть, что двухслойная система является простейшей моделью для оценки влияния субстрата на плавление поверхностной тонкой пленки.

Перейдем теперь к трехслойной системе, считая, что подложка моделируется третьим слоем, так что  $Y_3 = Y_b$ , а первый и второй слои, содержащие одинаковые атомы, относятся к пленке. Тогда, обозначив  $\tau_1 = \tau_2 = \tau$ ,  $\tau_3 = \alpha\tau$  ( $\alpha = \lambda_b/\lambda$ , где  $\lambda_b$  и  $\lambda$  — константы затухания подложки и пленки соответственно),  $\vartheta_{1,2} = \vartheta_1$ ,  $\vartheta_{2,3} = \vartheta_2$ ,  $\vartheta_{3,4} = 1$ , получим

$$Y_b = -\ln((\alpha\tau/Y_b)e^{Y_b} - \vartheta_2e^{-Y_2}),$$

$$Y_b = -\ln((\tau/\vartheta_2Y_2)e^{Y_2} - (\vartheta_1/\vartheta_2)e^{-Y_1}),$$

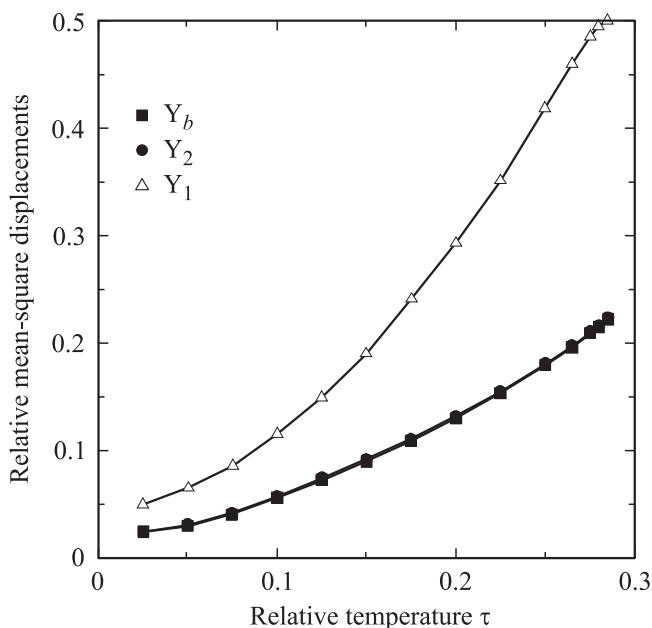
$$Y_2 = \ln(\vartheta_1Y_1/\tau_1) - Y_1, \tag{13}$$

или

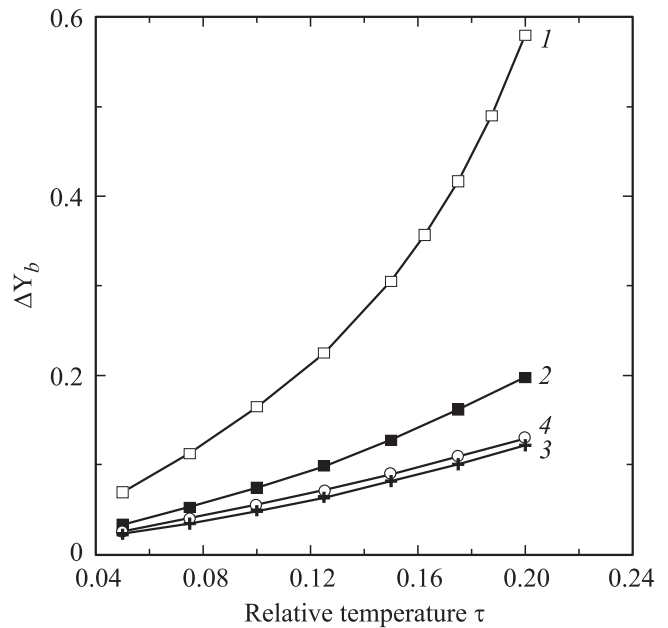
$$Y_2 = -\ln\left[\frac{1}{\vartheta_2}((\alpha\tau/Y_b)e^{Y_b} - e^{-Y_b})\right],$$

$$Y_1 - Y_b = \ln\left[\frac{\vartheta_1}{\vartheta_2}\left(\frac{Y_1 - Y_2}{Y_2}\right)\right]. \tag{14}$$

Уравнения (14) могут служить трехслойной моделью ПБК, состоящего из атомов одного сорта. При этом  $\vartheta_1 = \vartheta_2 = \alpha = 1$ . Результаты расчета представлены на рис. 2. Из рисунка следует, что СКС всех слоев с температурой растут, но  $Y_1$  растет быстрее, причем



**Рис. 2.** Трехслойная модель полубесконечного кристалла: зависимости среднеквадратичных смещений атомов в объемной  $Y_b$ , подповерхностной  $Y_2$  и поверхностной  $Y_1$  плоскостях от приведенной температуры  $\tau$  при  $\vartheta$ .



**Рис. 3.** Упрощенная трехслойная модель полубесконечного кристалла ( $Y_2 = Y_b$ ): зависимости  $\Delta = Y_1 - Y_b$  от приведенной температуры  $\tau$  для значений фактора связи  $\vartheta = 0.4$  (1), 0.8 (2) и 1.2 (3). 4 — зависимость  $Y_b(\tau)$ .

всегда превосходит  $Y_2$  и  $Y_b$  по величине. Далее, расчет показывает, что  $Y_2 > Y_b$ , но различие проявляется лишь в третьем-четвертом знаке, так что графики  $Y_2(\tau)$  и  $Y_b(\tau)$  на рис. 2 практически сливаются. Температура плавления поверхности  $\tau_{s1} = 0.285$ , что весьма близко к значению  $\tau_s = 0.270$  для ПБК. Температура плавления второго слоя  $\tau_{s2} = \tau_b = e^{-1}$ . Полученные зависимости качественно согласуются с результатами работ [22–25].

Теперь введем в трехслойную модель релаксацию, положив  $\vartheta_1 \neq 1$ , но по-прежнему принимая  $\vartheta_2 = \alpha = 1$ . Этот же случай может быть отнесен к двухслойной подложке (плоскости 2 и 3) с инородным слоем на поверхности. Учитывая, что  $Y_2 \approx Y_b$  (рис. 2), перепишем систему уравнений (14) в виде

$$\Delta \approx \ln \vartheta \frac{\Delta}{Y_b}, \tag{15}$$

где  $\Delta = Y_1 - Y_b$ . Решения вида  $\Delta > 0$  существуют при  $\vartheta/Y_b > e$ . Температура  $\tau_s$  определяется из уравнения  $Y_b(\tau_s) = \vartheta e^{-1} = 0.368\vartheta$ . Поскольку слой 3 моделирует глубокую плоскость ПБК (что соответствует переходу к пределу  $n \rightarrow \infty$  в первом из уравнений системы (4)), потребуем, чтобы максимальное значение СКС для объема  $Y_b^{\max}$  было по-прежнему равно 0.5. Отсюда следует, что приближенное уравнение (15) справедливо только для  $\vartheta \leq \vartheta_{\max} = eY_b^{\max} = 1.359$ . Результаты расчетов представлены на рис. 3, где также приведена зависимость  $Y_b(\tau)$ . Результат очевиден: с ростом  $\vartheta$  величина  $\Delta$  уменьшается. Отметим, что уравнение (15) соответствует именно трехслойной модели, хотя и упрощенному ее варианту. Это следует уже из того факта, что уравнения (15) и (11) не совпадают.

Уравнения (14) можно применить и для моделирования системы, представляющей собой квазисвободный двухслойный графен на С-границе карбида кремния. Для полуколичественных оценок можно считать, что  $\alpha \sim 1$  и  $\vartheta_2 \sim \vartheta_1 = \vartheta \ll 1$ , откуда получаем  $\tau_s \sim \vartheta/e \ll 1$ . Тогда, как и в случае модели ПТ [8], имеем  $Y_1 \sim \tau$ ,  $Y_2 \sim Y_b \sim \tau/2$ . Можно представить себе и другую систему, описываемую теми же уравнениями: квазисвободный однолистный графен–углеродный буферный слой–С-грань SiC. Тогда, полагая  $\alpha \sim 1$ ,  $\vartheta_1 = \vartheta \ll 1$ ,  $\vartheta_2 \sim 1$ , вновь получаем  $\tau_s = \vartheta/e \ll 1$ ,  $Y_1 \sim \tau$ ,  $Y_2 \sim Y_b \sim \tau/2$ .

Подчеркнем, что под плавлением графена здесь следует понимать отслоение от системы графенового листа, а не исчезновение его гексагональной двумерной структуры. Действительно, по разным оценкам температура плавления однослойного графена лежит в пределах от 3400 до 4900 К [17]. Здесь нижний температурный предел относится к термической нестабильности краев графеновых листа или наноленты [17] и поэтому является аналогом температуры  $\tau_s$  для ПБК и свободной пленки.<sup>5</sup> Верхний предел практически совпадает с температурой плавления графита [17,33], тогда как, согласно расчетам [34], расщепление графита на графеновые листы (термическая нестабильность графита) начинается при 3000 К. Это последнее значение логично в рамках рассматриваемой здесь проблемы соотносить с температурой  $\tau_s$  для эпитаксиальных графеновых слоев.

В отличие от ПБК и свободных пленок для эпитаксиальных слоев в литературе [17,27] обсуждается вопрос о том, где начинается плавление (термическая неустойчивость): на внешней свободной поверхности пленки или на интерфейсе пленка–подложка. До сих пор мы рассматривали только первый случай. Для того чтобы в рамках трехслойной модели рассмотреть вторую возможность, нужно в системе уравнений (13), (14) положить  $\vartheta_2 \ll \min\{\vartheta_1, 1\}$ . Можно показать, что при этом температура плавления  $\tau_2 \sim (\lambda/\lambda_b)\tau_b/2$ . При этой температуре трехслойная система распадается на двухслойную пленку и „однослойную подложку“.

## 5. Заключение

Итак, в настоящей работе предложено обобщение модели ПТ, позволяющее рассматривать плавление конечных и полубесконечных структур, состоящих из отличных друг от друга атомных слоев. При этом под началом процесса плавления по-прежнему понимается возникновение поверхностной термической неустойчивости, распространяющейся с ростом температуры вглубь. Обобщенная таким образом модель ПТ позволяет достаточно простым образом учитывать влияние на температуру плавления таких факторов, как релаксация слоев в приповерхностных областях ПБК и толстых пленок

<sup>5</sup> Так называемое „краевое плавление“ свойственно и другим двумерным структурам [4].

и наличие интерфейса пленка–подложка в случае эпитаксиальных пленок.

## Список литературы

- [1] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1964). 568 с.
- [2] С.М. Стишов. УФН **114**, 1, 3 (1974).
- [3] K.J. Strandburg. Rev. Mod. Phys. **60**, 1, 161 (1988); Erratum: Rev. Mod. Phys. **61**, 3, 747 (1988).
- [4] J.G. Dash. Rev. Mod. Phys. **71**, 5, 1737 (1999).
- [5] Q.S. Mei, K. Lu. Progr. Mater. Sci. **52**, 8, 1175 (2007).
- [6] P.J. Pawlow. Z. Phys. Chem. **65**, 1, 1 (1909).
- [7] M. Tagaki. J. Phys. Soc. Jpn. **9**, 3, 359 (1954).
- [8] L. Pietronero, E. Tosatti. Solid. State. Commun. **32**, 3, 255 (1979).
- [9] C.S. Jayanthi, E. Tosatti, L. Pietronero. Phys. Rev. B **31**, 6, 3456 (1985).
- [10] J.W.M. Frenken, J.F. van der Veen. Phys. Rev. Lett. **54**, 2, 134 (1985).
- [11] P. Carnevali, F. Ercolessi, E. Tosatti. Phys. Rev. B **36**, 12, 6701 (1987).
- [12] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. Rev. Mod. Phys. **81**, 1, 109 (2009).
- [13] J. Haas, W.A. de Heer, E.H. Conrad. J. Phys.: Cond. Matter **20**, 323 202 (2008).
- [14] Y.H. Wu, T. Yu, Z.X. Shen. J. Appl. Phys. **108**, 071 301 (2010).
- [15] A.B. Елецкий, И.М. Искандарова, А.А. Книжник, Д.Н. Красиков. УФН **181**, 3, 233 (2011).
- [16] M. Batzill. Surf. Sci. Rep. **67**, 83 (2012).
- [17] А.Е. Галашев, О.Р. Рахманова. УФН **184**, 10, 1045 (2014).
- [18] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. ФТТ **57**, 4, 819 (2015).
- [19] А. Марадудин. Дефекты и колебательный спектр кристаллов. Мир, М. (1968). 432 с.
- [20] R.F. Wallis, A.A. Maradudin, L. Dobrzynski. Phys. Rev. B **15**, 12, 5681 (1977).
- [21] Х. Бётгер. Принципы динамической теории решетки. Мир, М. (1986). 392 с.
- [22] T. Matsubara, K. Kamiya. Progr. Theor. Phys. **58**, 3, 767 (1977).
- [23] T. Hama, T. Matsubara. Progr. Theor. Phys. **59**, 5, 1407 (1978).
- [24] T. Ishi, S. Naya, S. Tanaka. Progr. Theor. Phys. **69**, 4, 1074 (1983).
- [25] Y. Aikawa, K. Fujii. Mater. Trans. **50**, 2, 249 (2009).
- [26] T. Matsubara. J. Phys. Soc. Jpn. **40**, 2, 603 (1976).
- [27] D.G. Gromov, S.A. Gavrilov. In: Thermodynamics — physical chemistry of aqueous systems / Ed. J.C.M. Pirajain. InTech (2011). Ch. 7; <http://www.intechopen.com>.
- [28] Y. Peng, Z. Wang, A.M. Alsayed, A.G. Yodh, Y. Han. Phys. Rev. Lett. **104**, 205 703 (2010).
- [29] С.И. Богатыренко, Н.Т. Гладких, А.П. Крышталь. Физ. инженерия поверхности **1**, 1, 82 (2003).
- [30] L. Zhang, L.H. Zhang, M.L. Sui, J. Tan, K. Lu. Acta Mater. **54**, 13, 3553 (2006).
- [31] Q. Jiang, N. Aya, F.G. Shi. Appl. Phys. A **64**, 6, 627 (1997).
- [32] Q. Jiang, H.Y. Tong, D.T. Hsu, K. Okuyama, F.G. Shi. Thin Solid Films **312**, 1–2, 357 (1998).
- [33] A.I. Savvatinskiy. Carbon **43**, 6, 1115 (2005).
- [34] F. Colonna, J.H. Los, A. Fasolino, E.G. Meijer. Phys. Rev. B **80**, 134 105 (2009).