

ОРИГИНАЛЬНЫЕ  
СТАТЬИ

УДК 519.642

О ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТАЦИОНАРНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЯХ  
ПЛОТНОСТИ  
В МОНОСЛОЙНОЙ АДсорБИРОВАННОЙ ПЛЕНКЕ \*

© 1996г. В.Г. Дубровский<sup>а</sup>, В.В. Козачек<sup>б</sup>

<sup>а</sup> *Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург*

<sup>б</sup> *Институт межфазных взаимодействий при СПбГТУ, Санкт-Петербург*

Поступила в редакцию 25.04.96

Проведено исследование кинетической решеточной модели монослойного адсорбата в приближении среднего поля для латеральных взаимодействий. Получено нелинейное уравнение второго порядка типа "диффузия + реакции" для плотности адсорбата, описывающее фазовый переход на поверхности. Доказано существование периодических стационарных распределений плотности. Для квазиодномерного случая получен явный вид периодических стационарных решений.

**Введение**

В работах [1-3] было показано, что рассмотрение кинетики адсорбционного роста в рамках модели решеточного газа позволяет в приближении среднего поля для активационных барьеров адсорбции и миграции получить замкнутое нелинейное уравнение для плотности адсорбата. Такое же уравнение можно получить и из эвристических соображений [4]. Самосогласованная кинетическая решеточная модель адсорбции существенно обобщает существующие феноменологические подходы (модель двумерной конденсации Зельдовича-Френкеля [5], коалесценция Лившица-Слезова [6], геометрико-вероятностная модель двумерной кристаллизации Колмогорова [7,8], макроскопические модели [9]) и служит связующим звеном между ними и строгими микроскопическими подходами [1,3,10]. В отличие от модели Кардара-Паризи-Занга [11], где доминирующим релаксационным процессом является десорбция, или диффузионных моделей с билапласианом [12,13], предлагаемая модель учитывает и десорбцию, и диффузию. При этом диффузионная неустойчивость появля-

ется в уравнении второго порядка, что достигается путем учета латеральных взаимодействий между адатомами в самосогласованной форме. Настоящая работа посвящена исследованию самосогласованной решеточной модели монослойной адсорбции в случае, когда константа связи активационных барьеров адсорбции и миграции не равны друг другу. Особое внимание уделяется стационарным решениям нелинейного кинетического уравнения. Исследованы ситуации, в которых существуют периодические стационарные распределения плотности адсорбированной фазы, наблюдаемые в экспериментах [12,14,15]. Для случая одномерной диффузии доказан ляпуновский характер стационарной системы и получены явные выражения для периодических решений.

**1. Феноменологический вывод кинетического уравнения монослойной адсорбции**

Рассмотрим поверхность кристаллического твердого тела, термостатированную при температуре  $T$  и соприкасающуюся с газовой фазой, при плотности потока частиц на поверхность  $J = const$ . Если газовая фаза

\* Данная работа была частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований в рамках грантов №95-02-05084-а и №95-01-00491.

представляет собой равновесный идеальный газ при температуре  $T_g = T$  и давлении  $P$ , то

$$J = \alpha P / (2\pi m k_B T)^{1/2}, \quad (1)$$

где  $\alpha$  есть коэффициент адсорбции и  $m$  – масса частицы. В случае молекулярной эпитаксии  $J$  есть плотность потока напыляемого вещества, при этом обычно  $T_g > T$ . Образующаяся на межфазовой границе раздела кристалл – газ адсорбционная пленка, или адсорбированная фаза, в данной работе будет рассматриваться в рамках модели двумерного решеточного газа. Такая модель соответствует случаю монослойной сильно локализованной адсорбции [15], когда потенциал поверхности  $U(\vec{R}, z)$  ( $\vec{R}$  – двумерный вектор в плоскости поверхности,  $z$  – расстояние по нормали к поверхности) имеет резкие минимумы при  $\vec{R} = \vec{R}_1, \vec{R}_2 \dots \vec{R}_i \dots$  (координаты адсорбционных ячеек),  $z = z_0$ , и активационный барьер десорбции превосходит активационный барьер латеральной диффузии. Считается, что адсорбция на уже занятом адсорбционном месте происходит с пренебрежимо малой вероятностью. Данное предположение отвечает случаю малых давлений газа и, соответственно, поверхностных концентраций адсорбата, или близком к послойному механизму роста при молекулярной эпитаксии. Таким образом, адсорбированная фаза представляет собой двумерный решеточный газ, в котором адсорбированные частицы (адатомы) основное время локализованы в ячейках  $i = 1, 2, 3 \dots$  и совершают малые колебания вблизи положения равновесия. Кинетика адсорбата определяется процессами адсорбции, десорбции и поверхностной миграции. Для поверхности с нулевой заполненностью число актов адсорбции в ячейку  $i$  за единицу времени равно  $\sigma J$  ( $\sigma$  – площадь ячейки), число актов десорбции есть  $1/t_A^{(0)}$ , а число диффузионных прыжков из ячейки  $i$  в ячейку  $j$  равно  $W_{ij}/t_D^{(0)}$ . Вероятности переходов  $W_{ij}$  удовлетворяют условиям  $W_{ij} = W_{ji} = W(\vec{R}_{ij})$  и  $\sum_{j \neq i} W_{ij} = 1$ . Характерные времена жизни на поверхности  $t_A^{(0)}$  и в адсорбционной ячейке  $t_D^{(0)}$  определяются обычными выражениями [15]

$$t_A^{(0)} = \nu_{\perp}^{-1} \exp(E_A^{(0)}/k_B T),$$

$$t_D^{(0)} = \nu_{\parallel}^{-1} \exp(E_D^{(0)}/k_B T), \quad (2)$$

где  $E_A^{(0)}$ ,  $E_D^{(0)}$  есть активационные барьеры десорбции и поверхностной миграции при нулевой заполненности,  $\nu_{\perp}, \nu_{\parallel}$  – частоты колебаний в нормальном и латеральном направлениях. В дальнейшем предполагается, что потенциал поверхности является периодической функцией  $\vec{R}$ , так что  $E_A^{(0)}$  и  $E_D^{(0)}$  не зависят от  $i$ . Учитывается взаимодействие между адатомами, которое оказывает существенное влияние на кинетику и стационарные свойства адсорбционной фазы, и может при определенных условиях приводить к фазовому переходу типа плотность – плотность [12,15].

Пусть  $n_i = 0, 1$  есть числа заполнения ячейки  $i$ ,  $\vec{n} = n_1, n_2 \dots n_i \dots$  есть некоторая случайная конфигурация адсорбата и  $p(\vec{n}, t)$  – вероятность осуществления такой конфигурации в момент времени  $t$ . Локальная заполненность  $\theta_i(t)$  (вероятность обнаружения адатома в ячейке  $i$  в момент времени  $t$ ) определяется выражением

$$\theta_i(t) = \sum_{\vec{n}} n_i p(\vec{n}, t), \quad (3)$$

где суммирование производится по всевозможным конфигурациям  $\vec{n}$ . Корреляционная функция  $\Psi_{ij}(t)$  есть

$$\Psi_{ij}(t) = \sum_{\vec{n}} n_i n_j p(\vec{n}, t) - \theta_i(t) \theta_j(t). \quad (4)$$

Аналогично определяются и корреляционные функции высших порядков. Вероятности  $p(\vec{n}, t)$  подчиняются основному кинетическому уравнению [1,3], из которого можно получить цепочку связанных уравнений для частичных функций распределения, аналогичную обычной цепочке уравнений Боголюбова. В частности, в [1] было показано, что в приближении среднего поля (пренебрежение флуктуациями в переходных вероятностях и локальным порядком) можно вывести самосогласованное нелинейное уравнение для одночастичной функции  $\theta_i(t)$ . Ниже приводится более простой вывод этого уравнения, основанный на соображениях феноменологического характера. В модели решеточного газа отталкивание частиц запрещает нахождение двух и более адатомов в одной

ячейке. На языке вероятностей  $\theta_i$  это соответствует введению ленгмюровских множителей  $1 - \theta_i$ , так что адсорбционный вклад становится равным  $\sigma J(1 - \theta_i)$  и т.д. Притяжение адатомов приводит к увеличению характерных времен жизни  $t_A$  и  $t_D$  по сравнению с их значениями при нулевой заполненности  $t_A^{(0)}$  и  $t_D^{(0)}$ . В рамках метода среднего поля  $t_A(\theta)$ ,  $t_D(\theta)$  представляется в виде некоторых функционалов вектора распределения  $\vec{\theta} = \theta_1, \theta_2 \dots \theta_i \dots$ . В простейшем локальном варианте используют приближение среднего поля для активационных барьеров в виде  $E_A = E_A(\theta_i)$  и  $E_D = E_D(\theta_i)$  [1-4,15]. Тогда

$$t_A(\theta_i) = t_A^{(0)} \exp \left[ (E_A(\theta_i) - E_A^{(0)}) / k_B T \right], \quad (5)$$

$$t_D(\theta_i) = t_D^{(0)} \exp \left[ (E_D(\theta_i) - E_D^{(0)}) / k_B T \right]. \quad (6)$$

Очевидно, что число переходов из ячейки  $i$  в ячейку  $j$  в результате поверхностной миграции в единицу времени есть  $W_{ij}\theta_i(1 - \theta_j)/t_D(\theta_i)$ , а число обратных переходов равно  $W_{ij}\theta_j(1 - \theta_i)/t_D(\theta_j)$ . Скорость десорбции из ячейки  $i$  есть  $\theta_i/t_A(\theta_i)$ . В результате приходим к кинетическим уравнениям вида

$$\begin{aligned} \dot{\theta}_i = & \sigma J(1 - \theta_i) - \theta_i/t_A(\theta_i) + \\ & + \sum_{j \neq i} W_{ij} [\theta_j(1 - \theta_i)/t_D(\theta_j) - \\ & - \theta_i(1 - \theta_j)/t_D(\theta_i)], \quad (7) \\ & (i = 1, 2, 3 \dots). \end{aligned}$$

Уравнение (7) с точностью до обозначений совпадает с уравнением обобщенной кинетической модели Брунауэра-Эммета-Тейлера [1,3,4] для частного случая монослойной адсорбции на идеальной поверхности. Для дальнейшего исследования необходимо конкретизировать зависимости  $E_A(\theta)$  и  $E_D(\theta)$ . Ясно, что активационные барьеры являются возрастающими функциями заполненности. В настоящей работе принимается линейная аппроксимация

$$\begin{aligned} (E_A(\theta_i) - E_A^{(0)}) / k_B T & \simeq \phi_A \theta_i; \\ (E_D(\theta_i) - E_D^{(0)}) / k_B T & \simeq \phi_D \theta_i, \quad (8) \end{aligned}$$

которая, как будет показано ниже, приводит к известной изотерме адсорбции (при  $T = T_g$ ) и позволяет качественно описать фазовый переход в монослойных пленках. С учетом (5),(6),(8) система (7) принимает вид

$$\begin{aligned} \dot{\theta}_i = & \sigma J(1 - \theta_i) - (1/t_A^{(0)})\theta_i \exp(-\phi_A \theta_i) + \\ & + (1/t_D^{(0)}) \sum_{j \neq i} W_{ij} [\theta_j \exp(-\phi_D \theta_j)(1 - \theta_i) - \\ & - \theta_i \exp(-\phi_D \theta_i)(1 - \theta_j)]. \quad (9) \end{aligned}$$

Видно, что уравнения (9) - сугубо нелинейные. Они линейризуются лишь в частном случае идеального адсорбата  $\phi_A, \phi_D \rightarrow 0$ . Система (9) при этом решается точно. Например, в прямоугольной геометрии эволюция первоначально пространственно-неоднородного распределения описывается некоторым рядом по функциям Бесселя мнимого аргумента, а стационарное распределение всегда пространственно-однородно [15]. Отметим, что ранее похожий результат был получен в [17] для кинетики одномерной модели Изинга с взаимодействием между соседними спинами. Фазовые переходы в идеальном адсорбате, разумеется, отсутствуют.

## 2. Переход к континуальному приближению

Систему уравнений (9) можно свести к одному нелинейному уравнению в частных производных типа "диффузия+реакции" с нелинейной зависимостью самосогласованного коэффициента диффузии от плотности. Переход к континуальному приближению оправдан, например, если диффузионные скачки происходят только между ближайшими соседями. Рассмотрим, для определенности, случай квадратной решетки с шагом  $ap = \sqrt{\sigma}$ , тогда

$$W(\vec{R}) = \begin{cases} 1/4, & |\vec{R}| = \alpha; \\ 0, & |\vec{R}| > \alpha. \end{cases} \quad (10)$$

В (9) перейдем к безразмерному времени  $\tau$ , выраженному в единицах характерного времени жизни адатома на поверхности

$$\tau \equiv t/t_A^{(0)} \quad (11)$$

В результате в (9) образуется два безразмерных параметра  $b$  и  $\Gamma$ , определяемые выражениями

$$b \equiv \sigma J t_A^{(0)}; \quad \Gamma \equiv t_A^{(0)}/t_D^{(0)} \quad (12)$$

Параметр  $b$  пропорционален плотности потока из газовой фазы и, следовательно, с точностью до аддитивной константы совпадает с химическим потенциалом идеального газа. Параметр  $\Gamma$  по физическому смыслу есть среднее число диффузионных прыжков, совершаемых адатомом за время его жизни на поверхности и удовлетворяет сильному неравенству  $\Gamma \gg 1$ . Подстановка (10)–(12) в правую часть (9) приводит к следующему выражению для миграционного оператора в декартовых координатах  $\vec{R} = (X, Y)$

$$\begin{aligned} \hat{M}(\theta(X, Y)) = & (\Gamma/4) \times \\ & \times [(F(X+a, Y) + F(X-a, Y)) \times \\ & \times G(X, Y) - F(X, Y)(G(X+a, Y) + \\ & + G(X-a, Y)) + (F(X, Y+a) + \\ & + F(X, Y-a))G(X, Y) - F(X, Y) \times \\ & \times (G(X, Y+a) + G(X, Y-a))] \simeq \\ & \simeq (\Gamma\sigma/4) [\partial_X(G\partial_X F - F\partial_X G) + \\ & + \partial_Y(G\partial_Y F - F\partial_Y G)], \end{aligned} \quad (13)$$

где  $F \equiv \theta \exp(-\phi_D \theta)$ ,  $G \equiv 1 - \theta$ . При переходе к континуальной аппроксимации миграционного оператора в правой части (13) удержаны лишь первые два члена разложения. Поскольку

$$\begin{aligned} G\partial_X F - F\partial_X G = \\ = \exp(-\phi_D \theta)(1 - \phi_D \theta + \phi_D \theta^2)\partial_X \theta \end{aligned} \quad (14)$$

и аналогично для  $G\partial_Y F - F\partial_Y G$ , окончательно получаем следующее континуальное уравнение для плотности адсорбата  $\theta(\vec{r}, \tau)$ :

$$\partial_\tau \theta = A(\theta) + \vec{\nabla} D(\theta) \vec{\nabla} \theta, \quad (15)$$

$$A(\theta) = b(1 - \theta) - \theta \exp(-\phi_A \theta), \quad (16)$$

$$D(\theta) = \exp(-\phi_D \theta) f_D(\theta), \quad (17)$$

$$f_D(\theta) \equiv 1 - \phi_D \theta + \phi_D \theta^2. \quad (18)$$

В (15) для удобства введены безразмерные

координаты

$$\vec{r} = (x, y) = 2\vec{R}/\sqrt{\sigma\Gamma}, \quad (19)$$

$\vec{\nabla} = (\partial_x, \partial_y)$  есть двумерный оператор дифференцирования по этим координатам. Функция  $A(\theta)$  описывает процессы адсорбции–десорбции. Миграционный оператор  $\vec{\nabla} D(\theta) \vec{\nabla} \theta$  содержит нелинейную зависимость  $D(\theta)$  (17), (18), которая в самосогласованной форме учитывает как диффузионное размытие пространственной неоднородности, так и взаимное притяжение адатомов. Это обстоятельство отличает модель (15)–(18) от стандартных уравнений типа "диффузия + реакции" [18], где нелинейность содержится только в источниках, а диффузионный оператор линеен. В уравнении (15)  $\vec{\nabla} D(\theta) \vec{\nabla} \theta \rightarrow \Delta \theta$  только при  $\phi_D \rightarrow 0$ . Основным предметом исследования в дальнейшем будет являться стационарное уравнение (15) для  $\theta_s(\vec{r}) = \theta(\vec{r}, \tau \rightarrow \infty)$

$$\vec{\nabla} D(\theta_s) \vec{\nabla} \theta_s + A(\theta_s) = 0. \quad (20)$$

Очевидно, всегда имеется одно или несколько (в зависимости от значений  $\phi_A$  и  $b$ ) пространственно-однородных решений (20):  $A(\theta_0) = 0$ ,  $\vec{\nabla} \theta_0 = 0$ . Возникает вопрос о возможности существования пространственно-неоднородных стационарных решений. Данный вопрос ниже исследуется для случая, когда функции  $A(\theta)$ ,  $D(\theta)$  выбраны в простом, но нетривиальном виде (16)–(18).

### 3. Свойства функций $A(\theta)$ , $D(\theta)$ и пространственно-однородные стационарные решения

Пространственно-однородные решения стационарного уравнения (20)  $\theta_0 = const$  находятся из (16):

$$b = \frac{\theta}{1 - \theta} \exp(-\phi_A \theta). \quad (21)$$

Выражение (21) при  $T_g = T$  совпадает с изотермой Фаулера–Гугенгейма для монослойной локализованной адсорбции [15]. При малых давлениях газа (21) удовлетворяет закону Генри, а в отсутствие притяжения адатомов переходит в изотерму Ленгмюра  $\theta_0 =$

$b/(1+b)$ . Подчеркнем, что при  $T_g \neq T$  мы всегда пренебрегаем тепловыми эффектами, рассматривая идеализированный случай, когда температура поверхности поддерживается постоянной, а все поступающее тепло мгновенно отводится. Увеличение температуры газа при этом ведет лишь к увеличению плотности потока  $J$  и параметра  $b$ , а уравнение (21) остается справедливым и при  $T_g \neq T$ . Выражение в правой части (21) равно экспоненте от химического потенциала решеточного газа в единицах  $k_B T$  в приближении среднего поля  $\mu(\theta) = -\phi_A \theta + \ln(\theta/(1-\theta))$  [19]. Поэтому, полагая  $\mu_g \equiv \ln b$ , уравнению (21) можно придать вид условия сосуществования газовой и адсорбированной фаз  $\mu_g = \mu(\theta)$ . Таким образом, стационарное пространственно-однородное решение модельного уравнения (15)–(18) дает изотерму, которая получается из статистической термодинамики. В этом смысле можно говорить о согласованности кинетической модели с равновесной термодинамикой адсорбата. Подробный вывод уравнения (21) при  $T_g = T$  из канонической статсуммы в предположении сильной локализации монослоя и в приближении среднего поля можно найти, например, в [1]. При  $\phi_A < 4$  уравнение (21) имеет единственное решение  $\theta_0$ , причем  $\theta_0$  возрастает с ростом  $b$ . При  $\phi_A > 4$  появляются два вещественных корня производной  $\mu_\theta(\theta)$

$$\theta_{1,2}^A = (1/2)(1 \mp \sqrt{1 - 4/\phi_A}), \quad (22)$$

которые совпадают с нулями функции

$$f_A(\theta) \equiv 1 - \phi_A \theta + \phi_A \theta^2. \quad (23)$$

Это говорит о наличии фазового перехода первого рода и о возможности сосуществования  $\alpha$  и  $\beta$  - фаз монослоя соответственно с меньшей и большей плотностью. Легко видеть, что при  $\phi_A > 4$  функция  $A(\theta)$  имеет единственный корень  $\theta_0 = \theta_{0\alpha}$  для  $b < b_{min}$  и  $\theta_0 = \theta_{0\beta}$  для  $b > b_{max}$ , тогда как для промежуточных значений  $b_{min} < b < b_{max}$  имеется три корня  $\theta_0 = \theta_{0\alpha}, \theta_0, \theta_{0\beta}$ ; причем всегда  $\theta_{0\alpha} < \theta_1^A < \tilde{\theta}_0 < \theta_2^A < \theta_{0\beta}$ . Критические значения  $b$  определяются выражениями

$$b_{min} = (\theta_2^A / \theta_1^A) \exp(-\phi_A \theta_2^A);$$

$$b_{max} = (\theta_1^A / \theta_2^A) \exp(-\phi_A \theta_1^A). \quad (24)$$

Они соответствуют случаю двух корней  $\theta_0 = \theta_{0\alpha}; \theta_2^A$  или  $\theta_0 = \theta_1^A; \theta_{0\beta}$ . Поведение функции  $A(\theta)$  при  $\phi_A < 4$  и  $\phi_A > 4$  показано на рис.1,2.

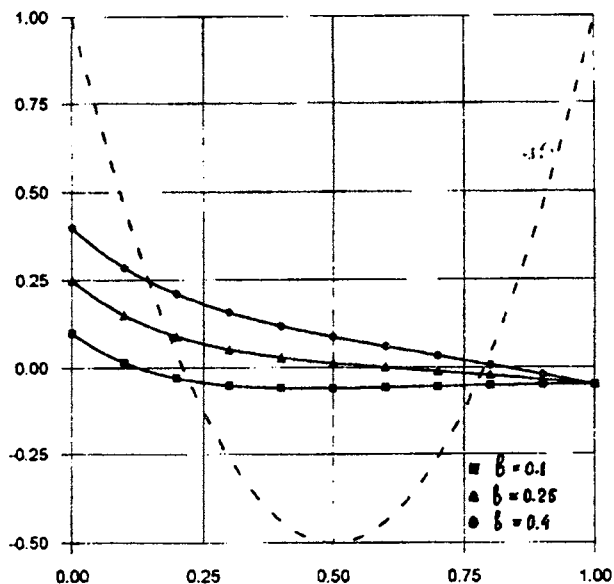
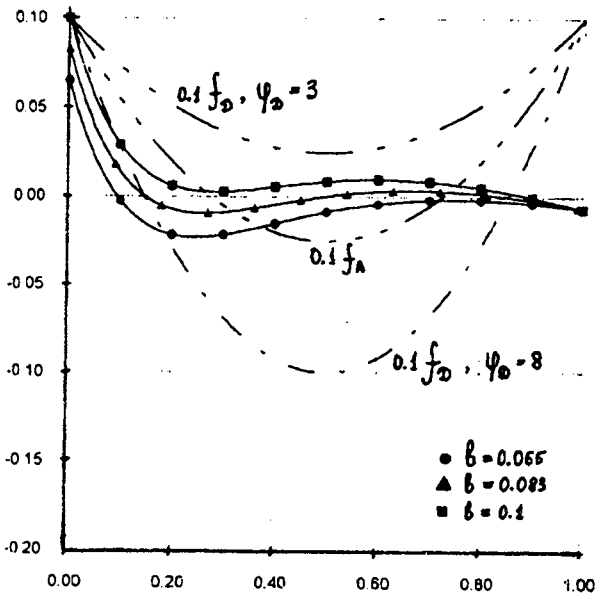


Рис.1. Графики функций  $A(\theta)$  при  $\phi_A = 3$  для трех значений  $b = 0.1; 0.25; 0.4$  (сплошные кривые) и  $f_D(\theta)$  при  $\phi_D = 6$  (пунктирная кривая). Коэффициент диффузии  $D(\theta)$  меняет знак в точках  $\theta_1^D = 0.211, \theta_2^D = 0.789$ . Критические значения параметра  $b$  (формула (34)) равны  $b_{c1} = 0.142, b_{c2} = 0.351$ . При  $0.142 < b < 0.351$  возможно образование периодических стационарных распределений плотности.

При наличии трех решений (21) средний корень  $\tilde{\theta}_0$  является термодинамически неустойчивым, поскольку  $\mu_\theta(\tilde{\theta}_0) < 0$ . Таким образом, при  $b_{min} < b < b_{max}$  наблюдается сосуществование трех фаз: газа с химическим потенциалом  $\mu_g = \ln b$ ,  $\alpha$  - фазы адсорбата с плотностью  $\theta_{0\alpha}$  и  $\beta$  - фазы с плотностью  $\theta_{0\beta}$ . При  $b < b_{min}$  и  $b > b_{max}$  в равновесии с газом находится лишь одна из фаз адсорбата.



**Рис.2.** Графики функций  $A(\theta)$  при  $\phi_A = 5$  для трех значений  $b = 0.065; 0.083$  и  $0.1$  (сплошные кривые),  $0.1 f_D(\theta)$  при  $\phi_D = 3$  и  $\phi_D = 8$  (пунктирные кривые) и  $0.1 f_A(\theta)$  при  $\phi_A = 5$  (пунктирная кривая). Коэффициент диффузии  $D(\theta)$  при  $\phi_D = 8$  меняет знак в точках  $\theta_1^D = 0.146, \theta_2^D = 0.854$ . Функция  $f_A(\theta)$  обращается в ноль в точках  $\theta_1^A = 0.276, \theta_2^A = 0.724$ . Минимальное и максимальное значения параметра  $b$  (формула (24)) равны  $b_{min} = 0.0703, b_{max} = 0.0959$ . Периодические стационарные решения возможны для корней в области  $\alpha$  и  $\beta$ -фаз  $\theta_{0\alpha}, \theta_{0\beta}$  при  $\phi_D = 8$  и для промежуточного корня  $\bar{\theta}_0$  при  $\phi_D = 3$ .

Если воспользоваться правилом Максвелла [19]

$$\int_{\bar{\theta}_{0\alpha}}^{\bar{\theta}_{0\beta}} d\theta \mu(\theta) = (\bar{\theta}_{0\beta} - \bar{\theta}_{0\alpha}) \mu(\bar{\theta}_{0\alpha}) = (\bar{\theta}_{0\beta} - \bar{\theta}_{0\alpha}) \mu(\bar{\theta}_{0\beta}), \quad (25)$$

то можно однозначно фиксировать значение плотностей  $\bar{\theta}_{0\alpha}, \bar{\theta}_{0\beta}$  и химического потенциала  $\bar{\mu}_g = \mu(\bar{\theta}_{0\alpha}) = \mu(\bar{\theta}_{0\beta})$ , соответствующих равновесию трехфазной системы. Тогда состояния с  $\theta_{0\alpha} < \bar{\theta}_{0\alpha}$  и  $\theta_{0\beta} > \bar{\theta}_{0\beta}$  термодинамически устойчивы, а состояния с  $\bar{\theta}_{0\alpha} < \theta_{0\alpha} <$

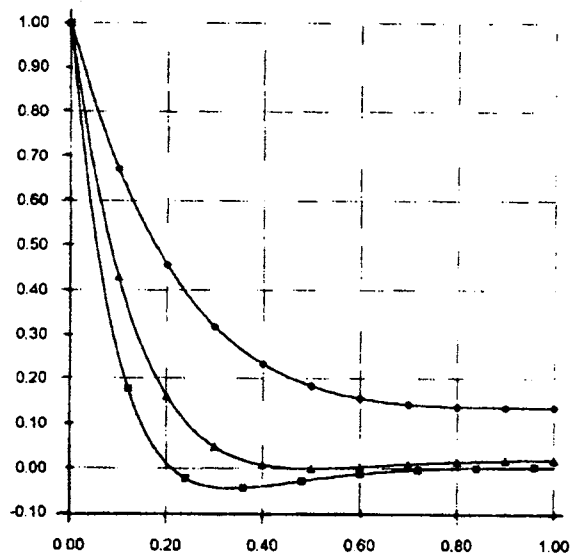
$\theta_1^A$  и  $\theta_2^A < \theta_{0\beta} < \bar{\theta}_{0\beta}$  метастабильны. Привлекательная известное термодинамическое соотношение [15]

$$\theta = -(\partial\gamma/\partial\mu)_T = -(\partial\gamma/\partial\theta)_T (\partial\theta/\partial\mu)_T, \quad (26)$$

убеждаемся, что (25) равносильно требованию равенства поверхностных энергий  $\gamma$  в  $\alpha$  и  $\beta$  - фазе, помимо равенства химических потенциалов:  $\mu(\bar{\theta}_{0\alpha}) = \mu(\bar{\theta}_{0\beta})$ ;  $\gamma(\bar{\theta}_{0\alpha}) = \gamma(\bar{\theta}_{0\beta})$  [20]. Обратимся к изучению свойств функции  $D(\theta)$ . Очевидно,  $D(\theta) > 0$  для всех  $\theta$  при  $\phi_D < 4$ , обращается в ноль в точке  $\theta = 1/2$  при  $\phi_D = 4$  и меняет знак в точках

$$\theta_{1,2}^D = (1/2)(1 \mp \sqrt{1 - 4/\phi_D}) \quad (27)$$

при  $\phi_D > 4$  (рис.3).



**Рис.3.** Коэффициент диффузии  $D(\theta)$  для трех значений  $\phi_D = 2, 4, 6$ ; кружками отмечена кривая при  $\phi_D = 2$ , треугольниками - кривая при  $\phi_D = 4$ , а квадратами - при  $\phi_D = 6$ .

Физически отрицательность коэффициента диффузии при  $\theta_1^D < \theta < \theta_2^D$  означает, что в этой области притяжение адатомов доминирует над диффузионным размы-

тием. Следовательно, в рассматриваемой модели возникает область диффузионной неустойчивости, внутри которой миграция частиц направлена в сторону увеличения концентрации адсорбата. Наличие такого свойства в уравнении второго порядка (15) вследствие учета латеральных взаимодействий отличает нашу модель от моделей типа [13], в которых неустойчивость появлялась только при введении в исходное уравнение билапласиана  $\Delta\Delta\theta$ . Кроме того подчеркнем, что уравнения (15)–(18) могут быть, хотя и приближенно, выведены из первых принципов.

Проведем еще выражение для производной  $A_\theta(\theta_0)$ , которое понадобится в дальнейшем. Согласно (16),(21),(23)

$$-A_\theta(\theta_0) = b f_A(\theta_0)/\theta_0, \quad (28)$$

то есть знак  $-A_\theta(\theta_0)$  совпадает со знаком  $f_A(\theta_0)$ . Поэтому  $-A_\theta(\theta_0) > 0$  при  $\phi_A < 4$ , тогда как при  $\phi_A > 4$   $-A_\theta(\theta_0) > 0$  для корней  $\theta_{0\alpha}, \theta_{0\beta}$  и  $-A_\theta(\theta_0) < 0$  для промежуточного корня  $\tilde{\theta}_0$ .

#### 4. Периодические стационарные решения линейризованного кинетического уравнения

Перепишем нелинейное стационарное уравнение в виде

$$\partial_x(D(\theta)\partial_x\theta) + \partial_y(D(\theta)\partial_y\theta) = -A(\theta), \quad (29)$$

опуская здесь и в дальнейшем значок у  $\theta_s$ . Полагая  $V_1(\theta) \equiv D(\theta)\partial_x\theta$ ,  $V_2(\theta) \equiv D(\theta)\partial_y\theta$  убеждаемся, что (29) имеет первый интеграл вида

$$H = D^2(\theta)\vec{\nabla}\theta\vec{\nabla}\theta + 2 \int_{\theta_0}^{\theta} d\theta' A(\theta')D(\theta') = const. \quad (30)$$

Пусть  $\theta_0$  есть пространственно-однородное решение  $A(\theta_0) = 0$ , и пусть

$$\eta(\vec{r}) = \theta(\vec{r}) - \theta_0 \quad (31)$$

есть отклонение от  $\theta_0$ , которое должно зависеть от  $\vec{r}$  или тождественно равняться нулю. В линейном приближении по  $\eta(\vec{r})$  из (29) следует

$$D(\theta_0)\Delta\eta(\vec{r}) = -A_\theta(\theta_0)\eta(\vec{r}). \quad (32)$$

Ясно, что (32) может иметь периодические решения только при  $A_\theta(\theta_0)D(\theta_0) > 0$ . Согласно (17),(18),(23),(28), это имеет место, когда выражения  $f_A(\theta_0)$  и  $f_D(\theta_0)$  имеют разные знаки. Такое возможно только при  $\phi_A \neq \phi_D$  и хотя бы одном из значений  $\phi_A, \phi_D > 4$ . Периодические решения (32) имеют волновой вектор длины  $k_c = const$ , где  $k_c$  определяется выражением

$$k_c = \sqrt{|b f_A(\theta_0)/\theta_0 f_D(\theta_0)|} \exp(\phi_D\theta_0/2) = \sqrt{|A_\theta(\theta_0)/D(\theta_0)|}. \quad (33)$$

Если в линейризованное нестационарное уравнение (15) подставить решение в виде диффузионной волны  $\exp(-\lambda\tau + i\vec{k}\vec{r})$ , получим дисперсионное соотношение  $\lambda = -A_\theta(\theta_0) + D(\theta_0)k^2$ . Следовательно, (33) определяет критическое значение волнового вектора, при котором происходит потеря устойчивости пространственно-однородного решения по линейному приближению. Легко убедиться, что в случае  $f_A(\theta_0) < 0$ ;  $f_D(\theta_0) > 0$  неустойчивыми являются моды с  $k < k_c$  (длинноволновые возмущения), а при  $f_A(\theta_0) > 0$ ;  $f_D(\theta_0) < 0$  неустойчивыми будут коротковолновые возмущения с  $k > k_c$ .

Проанализируем случаи, в которых допустимы периодические стационарные распределения. Очевидно, возможны три ситуации, представленные на рис.1,2.

1) Случай  $f_A(\theta_0) < 0$ ;  $f_D(\theta_0) > 0$  (рис.2). Это возможно только при  $\phi_A > 4$  и  $b_{min} < b < b_{max}$  для промежуточного корня  $\tilde{\theta}_0$ , когда коэффициент диффузии положителен вблизи  $\theta_0$ . В данной ситуации имеем диффузионное размытие неустойчивого решения, которое может приводить к периодическому распределению с минимальной и максимальной плотностью, близкой соответственно к  $\theta_{0\alpha}$  и  $\theta_{0\beta}$ .

2) Случай  $f_A(\theta_0) > 0$ ;  $f_D(\theta_0) < 0$  при  $\phi_A < 4$   $\phi_D > 4$ . Уравнение  $A(\theta) = 0$  имеет единственное решение  $\theta_0$ , и коэффициент

диффузии в точке  $\theta_0$  отрицателен:  $\theta_1^D < \theta_0 < \theta_2^D$  (рис.1). Малые возмущения плотности развиваются за счет восходящей диффузии, стимулирующий рост двумерных кластеров, и система может стабилизироваться в новом, уже пространственно-неоднородном состоянии. Данный случай наблюдается только при  $b_{c1} < b < b_{c2}$ . Критические значения безразмерного потока  $b_{c1}, b_{c2}$  соответствуют  $\theta_0 = \theta_1^D$  и  $\theta_0 = \theta_2^D$ :

$$\begin{aligned} b_{c1} &= (\theta_1^D / \theta_2^D) \exp(-\phi_A \theta_1^D); \\ b_{c2} &= (\theta_2^D / \theta_1^D) \exp(-\phi_A \theta_2^D). \end{aligned} \quad (34)$$

3) Случай  $f_A(\theta_0) > 0$ ;  $f_D(\theta_0) < 0$  при  $\phi_D > \phi_A > 4$  для одного из корней  $\theta_{0\alpha}$  или  $\theta_{0\beta}$  или для корней  $\theta_{0\alpha}$  и  $\theta_{0\beta}$  одновременно, когда коэффициент диффузии в этих точках отрицателен (рис.2). Здесь может происходить пространственное упорядочение в метастабильных состояниях  $\alpha$  и  $\beta$  - фаз адсорбата, также за счет восходящей диффузии. Очевидно, значение  $b = b_{min}$  соответствует касанию  $A(\theta)$  оси  $\theta$  в точке  $\theta_2^A$ , а  $b = b_{max}$  - в точке  $\theta_1^A$ . Пусть  $\theta_{0\alpha}(b_{min})$  есть корень в области  $\alpha$  - фазы при  $b = b_{min}$  и  $\theta_{0\beta}(b_{max})$  корень в области  $\beta$  - при  $b = b_{max}$ , причем  $\theta_{0\alpha}(b_{min}) > \theta_1^D$  и  $\theta_{0\beta}(b_{max}) < \theta_2^D$ . Тогда вся область изменения параметра  $b$  разбивается на следующие отрезки:

а)  $b_{c1} < b < b_{min}$  ( $b_{c1}$  соответствует  $\theta_{0\alpha}(b_{c1}) = \theta_1^D$ ) - возможно одно периодическое решение, ответвляющееся от корня  $\theta_{0\alpha}$ ;  $\theta_1^D < \theta_{0\alpha} < \theta_{0\alpha}(b_{min})$ ;

б)  $b_{min} < b < b_{max}$  - возможны два различных периодических решения, ответвляющиеся от корней  $\theta_{0\alpha}$  и  $\theta_{0\beta}$ ;  $\theta_{0\alpha}(b_{min}) < \theta_{0\alpha} < \theta_1^A$  и  $\theta_2^A < \theta_{0\beta} < \theta_{0\beta}(b_{max})$ ;

в)  $b_{max} < b < b_{c2}$  ( $b_{c2}$  соответствует  $\theta_{0\beta}(b_{c2}) = \theta_2^D$ ) - возможно одно периодическое решение, ответвляющееся от корня  $\theta_{0\beta}$ ;  $\theta_{0\beta}(b_{max}) < \theta_{0\beta} < \theta_2^D$ .

Итак, линеаризация стационарного уравнения (29) с функциями  $A(\theta), D(\theta)$  в виде (16)-(18) указывает на возможность существования периодических распределений плотности адсорбата. В следующем пункте будет показано, что уравнение (29) имеет пе-

риодические решения и при учете нелинейных эффектов.

### 5. Доказательство ляпуновского характера стационарной модели для одномерного случая

Рассмотрим уравнение (29) в одномерном случае  $\vec{r} = x$ ,  $\theta = \theta(x)$ . Одномерный случай формально соответствует сильно неізотропной диффузии, которую нетрудно было бы ввести и в первоначальную модель (15). Рассмотрение диффузии по выделенному направлению приводит к упорядоченным структурам типа "квантовых проволок" [14]. Одномерное уравнение (29) и первый интеграл (30) имеет вид

$$\frac{d}{dx} \left[ D(\theta(x)) \frac{d\theta}{dx} \right] = -A(\theta(x)), \quad (35)$$

$$\begin{aligned} H &= \left[ D(\theta(x)) \frac{d\theta}{dx} \right]^2 + \\ &+ 2 \int_{\theta_0}^{\theta} d\theta' A(\theta') D(\theta') = const. \end{aligned} \quad (36)$$

Введем новые неизвестные функции  $\eta(x)$  и  $\xi(x)$  согласно определению

$$\begin{aligned} \theta(x) &\equiv \theta_0 + \eta(x), \\ D(\theta_0 + \eta(x)) \frac{d\eta}{dx} &\equiv \xi(x), \end{aligned} \quad (37)$$

где  $\theta_0$  - по-прежнему есть пространственно-однородное решение  $A(\theta_0) = 0$ . Тогда (35) эквивалентно системе двух нелинейных уравнений первого порядка

$$\begin{cases} d\eta/dx = \xi/D(\theta_0 + \eta) = a_{12}\xi + P(\eta, \xi), \\ d\xi/dx = -A(\theta_0 + \eta) = a_{21}\eta + Q(\eta). \end{cases} \quad (38)$$

В (38) для краткости введены обозначения

$$a_{12} \equiv D^{-1}(\theta_0); \quad a_{21} \equiv -A_{\theta}(\theta_0) \quad (39)$$

Из (35) следует, что нелинейные добавки



$$P(\eta, \xi) = [D^{-1}]_{\theta}(\theta_0)\eta\xi + (1/2)[D^{-1}]_{\theta\theta}(\theta_0)\eta^2\xi + \dots, \quad (40)$$

$$Q(\eta) = -(1/2)A_{\theta\theta}(\theta_0)\eta^2 - (1/6)A_{\theta\theta\theta}(\theta_0)\eta^3 - \dots \quad (41)$$

являются аналитическими функциями своих аргументов и их разложения начинаются с квадратичных членов. Корни характеристического уравнения вспомогательной линейной системы при  $f_A(\theta_0)f_D(\theta_0) < 0$  (или  $a_{12}a_{21} < 0$ ) чисто мнимые:

$$\gamma = \pm i\sqrt{|a_{12}a_{21}|} = \pm ik_c \quad (42)$$

где  $k_c$  определяется выражением (33). Интегральные кривые линейной системы при различных значениях  $H$  представляют собой концентрические эллипсы, особая точка  $\eta = \xi = 0$  есть центр. Поскольку  $A(\theta_0) = 0$ , из (36), (37), (39), (33) следует

$$H(\eta, \xi) = |a_{21}/a_{12}|\eta^2 + \xi^2 + (2/3)[A_{\theta\theta}(\theta_0)D(\theta_0)/2 + A_{\theta}(\theta_0)D_{\theta}(\theta_0)]\eta^3 + \dots = const. \quad (43)$$

Вклад нелинейных членов в первый интеграл является аналитической функцией переменной  $\eta$ , и его разложение начинается с  $\eta^3$ . Таким образом, стационарная модель удовлетворяет условиям теоремы Ляпунова [21], согласно которой все решения уравнений (38) с функциями  $P, Q$  вида (40), (41) и первым интегралом (43) при чисто мнимых корнях линейной системы являются периодическими функциями  $x$ . Если задать условия при  $x = 0$  в виде

$$\eta(0) = \epsilon, \quad (d\eta/dx)|_{x=0} = 0, \quad (44)$$

то решение является аналитической функцией  $\epsilon$  - отклонения  $\theta$  от  $\theta_0$  при  $x = 0$ . Период колебаний  $l$  также является аналитической функцией  $\epsilon$  и представим в виде ряда

$$l = \frac{2\pi}{k_c}(1 + h_2\epsilon^2 + h_3\epsilon^3 + \dots), \quad (45)$$

где  $h_2, h_3 \dots$  некоторые коэффициенты, подлежащие определению. В пределе  $\epsilon \rightarrow 0$  переходит в период линейных колебаний, в полном соответствии с (32), (33).

## 6. Нахождения явного вида стационарного решения

Явный вид периодических решений одномерного стационарного уравнения (35) может быть найден стандартными методами [21]. Перейдем к новой переменной

$$\bar{x} = k_c x / (1 + h_2\epsilon^2 + h_3\epsilon^2 + \dots), \quad (46)$$

где  $k_c, \epsilon$  определены в (33), (44). В терминах переменной  $\bar{x}$  период решений (35) будет равен  $2\pi$  в любых порядках по  $\epsilon$ . Отклонение стационарного решения от пространственно-однородной заполненности  $\theta_0$   $\eta(\bar{x}) = \theta(\bar{x}) - \theta_0$  ищем в виде

$$\eta(\bar{x}) = \eta_1(\bar{x})\epsilon + \eta_2(\bar{x})\epsilon^2 + \eta_3(\bar{x})\epsilon^3 + \dots \quad (47)$$

Согласно (44), условия при  $\bar{x} = 0$  есть

$$\eta_1(0) = 1, \quad \eta_1'(0) = 0, \quad (48)$$

$$\eta_2(0) = \eta_3(0) = \dots = \eta_2'(0) = \eta_3'(0) = \dots = 0, \quad (49)$$

где штрихи означают производную по  $\bar{x}$ . Подставляя (46), (47) в (35) и раскладывая левую и правую части получившегося уравнения в ряд по  $\epsilon$ , имеем

$$\begin{aligned} & D(\theta_0)\eta_1''\epsilon + [D(\theta_0)\eta_2'' + D_{\theta}(\theta_0)\eta_1\eta_1'' + \\ & + D_{\theta}(\theta_0)\eta_1'^2]\epsilon^2 + [D(\theta_0)\eta_3'' + D_{\theta}(\theta_0)\eta_1\eta_2'' + \\ & + D_{\theta}(\theta_0)\eta_1'\eta_2 + 2D_{\theta}(\theta_0)\eta_1'\eta_2' + \\ & + (1/2)D_{\theta\theta}(\theta_0)\eta_1^2\eta_1'' + \\ & + D_{\theta\theta}(\theta_0)\eta_1\eta_1'^2]\epsilon^3 + \dots = \\ & = -A_{\theta}(\theta_0)\eta_1\epsilon/k_c^2 - \\ & - [A_{\theta}(\theta_0)\eta_2 + (1/2)A_{\theta\theta}(\theta_0)\eta_1^2]\epsilon^2/k_c^2 - \\ & - [A_{\theta}(\theta_0)\eta_3 + 2h_2A_{\theta}(\theta_0)\eta_1 + A_{\theta\theta}(\theta_0)\eta_1\eta_2 + \end{aligned}$$

$$+(1/6)A_{\theta\theta\theta}(\theta_0)\eta_1^3] \epsilon^3/k_c^2 + \dots \quad (50)$$

$$C_3 = \frac{1}{4} \left( \frac{10}{3} B_0 B_2 - \frac{8}{3} B_0^2 - \frac{2}{3} B_2^2 + K \right) \quad (56)$$

Для первой поправки  $\eta_1$  из (50),(33) следует  $\eta_1'' + \eta_1 = 0$ , что с учетом условия при  $\bar{x} = 0$  (48) дает

$$\eta_1(\bar{x}) = \cos \bar{x}. \quad (51)$$

Уравнение для второй поправки  $\eta_2$  с учетом (33),(51) после простых преобразований можно записать в виде

$$\eta_2'' + \eta_2 = -B_0 + (B_2 - B_0) \cos 2\bar{x}. \quad (52)$$

Коэффициенты  $B_0$  и  $B_2$  выражаются через значения функций  $A(\theta)$ ,  $D(\theta)$  и их производных при  $\theta = \theta_0$ :

$$\begin{aligned} B_0 &\equiv A_{\theta\theta}(\theta_0)/4D(\theta_0)k_c^2; \\ B_2 &\equiv D_{\theta}(\theta_0)/D(\theta_0). \end{aligned} \quad (53)$$

Решением уравнения (52) с условиями при  $\bar{x} = 0$  (49) будет функция

$$\begin{aligned} \eta_2(\bar{x}) &= -B_0 + \frac{(B_2 + 2B_0)}{3} \cos \bar{x} - \\ &- \frac{(B_2 - B_0)}{3} \cos 2\bar{x}. \end{aligned} \quad (54)$$

Рассмотрим третью поправку  $\eta_3$ , нахождение которой позволит определить коэффициент  $h_2$  в (46), то есть квадратичную по  $\epsilon$  поправку к периоду колебаний. С учетом (33), (51), (54) после некоторых преобразований из (50) следует уравнение

$$\eta_3'' + \eta_3 = -C_0 + (C_1 - 2h_2) \cos \bar{x} + C_2 \cos 2\bar{x} + C_3 \cos 3\bar{x} \quad (55)$$

с коэффициентами  $C_n$  вида

$$\begin{aligned} C_0 &= \frac{2}{3}(B_0 B_2 + 2B_0^2) \\ C_1 &= \frac{31}{6} B_0 B_2 + \frac{10}{3} B_0^2 - \frac{B_2^2}{2} + \frac{3}{4} K \\ C_2 &= \frac{2}{3}(B_2^2 + B_0 B_2 - 2B_0^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K &\equiv D_{\theta\theta}(\theta_0)/2D(\theta_0) - \\ &- A_{\theta\theta\theta}(\theta_0)/6D(\theta_0)k_c^2 \end{aligned} \quad (57)$$

Для того, чтобы (55) имело периодическое решение, необходимо и достаточно, чтобы его правая часть была ортогональным решением однородного уравнения. Следовательно, правая часть (55) не должна содержать  $\cos x$ , откуда

$$h_2 = C_1/2. \quad (58)$$

Решением (55) с нулевыми начальными условиями (49) в этом случае будет функция

$$\begin{aligned} \eta_3(\bar{x}) &= -C_0 + (C_0 + C_2/3 + C_3/8) \times \\ &\times \cos \bar{x} - (C_2/3) \cos 2\bar{x} - \\ &- (C_3/8) \cos 3\bar{x}. \end{aligned} \quad (59)$$

Аналогично можно найти поправки более высоких порядков. Ясно, что уравнение для  $\eta_n(\bar{x})$  будет содержать некоторую линейную комбинацию  $\cos m\bar{x}$  с  $m < n$ . Условие существования периодического решения  $\eta_n(\bar{x})$  позволяет определить коэффициент  $h_{n-1}$  в разложении (45). Решение  $\eta_n(x)$  также будет линейной комбинацией  $\cos m\bar{x}$  с коэффициентами, выраженными через значения функций  $A(\theta)$ ,  $D(\theta)$  и их производных порядка не старше  $n$  при  $\theta = \theta_0$ . Период колебаний  $l$ , определяющий средний размер периодических структур в монослойной адсорбционной пленке, при учете нелинейных членов может существенно изменяться по сравнению с периодом линейных колебаний  $2\pi/k_c$ . Возвращаясь к координате  $x$  и используя (47), (51),(54),(59), периодическое стационарное распределение плотности можно представить в развернутом виде

$$\begin{aligned} \theta(x) &= \\ &\theta_0 + \epsilon \cos(k_c x / (1 + C_1 \epsilon^2 / 2 + \dots)) + \\ &+ \epsilon^2 \left[ -B_0 + \frac{(B_2 + 2B_0)}{3} \cos(\right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& k_c x / (1 + C_1 \epsilon^2 / 2 + \dots) - \frac{(B_2 - B_0)}{3} \times \\
& \times \cos(2k_c x / (1 + C_1 \epsilon^2 / 2 + \dots)) \Big] + \\
& + \epsilon^3 \Big[ -C_0 + (C_0 + C_2 / 3 + C_3 / 8) \times \\
& \times \cos(k_c x / (1 + C_1 \epsilon^2 / 2 + \dots)) - \\
& - \frac{C_2}{3} \cos(2k_c x / (1 + C_1 \epsilon^2 / 2 + \dots)) - \\
& - \frac{C_3}{8} \cos(3k_c x / (1 + \\
& + C_1 \epsilon^2 / 2 + \dots)) \Big] + \dots, \quad (60)
\end{aligned}$$

что и дает решение нелинейного уравнения (35) с возмущением  $\epsilon$  в начале координат при  $f_A(\theta_0)f_D(\theta_0) < 0$ . Согласно (18),(19), (23),(33),(45), размерный период

$$\begin{aligned}
L &= \sqrt{\sigma \Gamma l} / 2 = \\
& \pi / 2 \sqrt{\frac{|\sigma \Gamma \theta_0 (1 - \phi_D \theta_0 + \phi_D \theta_0^2)|}{|b(1 - \phi_A \theta_0 + \phi_A \theta_0^2)|}} \times \\
& \times \exp(\phi_D \theta_0 / 2) (1 + h_2 \epsilon^2 + h_3 \epsilon^3 + \dots) \quad (61)
\end{aligned}$$

зависит от физических параметров модели  $\Gamma, b, \phi_A, \phi_D$  и возмущения  $\epsilon$ , поскольку  $\theta_0$  и коэффициенты  $h_n$  сами являются функциями параметров  $b, \phi_A, \phi_D$ .

### Заключение

Таким образом, в случае  $\phi_A \neq \phi_D$  и хотя бы одним из значений  $\phi_A, \phi_D > 4$  стационарное уравнение модели (15)–(18) для поверхностной плотности при определенных  $\theta_0$  имеет периодические решения. Отметим, что речь идет именно о множестве возможных периодических решений, отличающихся друг от друга начальным возмущением  $\epsilon$ , или значениями первого интеграла  $H$ . Какие из этих решений будут реализованы в действительности, зависит от допустимых значений величины  $H$ . Следовательно, данный вопрос требует раскрытия физического смысла  $H$  и введения некоторых дополнительных требований, которым должно удовлетворять стационарное состояние. Другим возможным способом выделения допустимых пространственно упорядоченных структур является рассмотрение иерархии неустойчивых и устойчивых мод при наложении зависящего от времени возмущения [18]. Этому вопросу будут посвящены наши

следующие сообщения.

### Литература

1. Дубровский Г.В., Кузьменко А.В., Марков Ю.Г. // ТМФ. 1995. Т.105. №1. С.130.
2. Дубровский Г.В., Козачек В.В. // ЖТФ. 1995. Т.65. №4. С.124.
3. Kreuzer H.J. // Phys. Rev. B. 1991. V.44 №3. P.1232.
4. Дубровский Г.В., Козачек В.В. // Коллоидный журнал. 1994. Т.56. №3. С.354.
5. Осипов А.В. // Поверхность. Физика, химия, механика. 1989. №11. С.116.
6. Кукушкин С.А., Слезов В.В. // Поверхность. Физика, химия, механика. 1989. №4. С.38.
7. Бельский В.З. // ДАН СССР. 1989. Т.306. №4. С.831.
8. Dubrovskii V.G. // Phys. Stat. Sol.(b). 1992. V.171. P.345.
9. Tersoff J. and Tromp R.M. // Phys.Rev. Lett. 1993. V.70. №18. P.2782.
10. Asada H. and Sekito H. // Surf. Sci. Lett. 1991. V.258. P.697.
11. Kardar M., Parisi G. and Zhang Y.-C. // Phys. Rev. Lett. 1986. V.56. P.889.
12. Kinetics of Ordering and Growth at Surfaces // Ed. by Lagally M. New York: Plenum Press, 1990.
13. Siegert M. and Plischke M. // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. №13. P.2035.
14. Cirilin G.E., Guryanov G.M., Golubok A.O., Tapishev S.Ya., Ledentsov N.N., Kop'ev P.S., Grundmann M. and Bimberg D. // Appl. Phys. Lett. 1995. V.67. №1. P.97.
15. Межфазовая граница газ-твердое тело // Пер.с англ. Под. ред. Флада Э.М.: Мир, 1970.
16. Дубровский В.Г., Дубровский С.Г. // Вестник СПбГУ. Сер. физ.хим. 1996. (в печати).
17. Glauber R.J. // Journ.Math. Phys. 1963. V.4. №2. P.294.

18. Хакен Г. Синергетика. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. Пер. с англ. М.: Мир, 1985.
19. Браун Р. Фазовые переходы. Пер. с англ. М.: Мир, 1967.
20. Kashchiev D. // Surf. Sci. 1989. V.220. №2-3. P.428.
21. Мусеев Н.Н. Асимптотические методы нелинейной механики. М.: Наука, 1969.

## ON THE PERIODIC STATIONARY SOLUTIONS OF A LATTICE MODEL FOR ADSORBED MONOLAYER

V.G. Dubrovskii <sup>a</sup>, V.V. Kozachek <sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Institute for Analytical Instrumentation RAS*

<sup>b</sup> *Institute of Interphase Interactions*

A kinetic lattice gas model for the adsorbed monolayer within the frame of mean field approximation for lateral interactions is studied. A non-linear second order equation of "diffusion + reactions" type describing surface phase transition is obtained. The existence of periodic stationary density distributions is shown. In the case of quasi one-dimensional diffusion an explicit form of periodic stationary solutions is found.