

Letters to the Editor
Писма до редакцията

АНАЛИЗ НА РАЗМЕРНОСТИТЕ: ПРИМЕР ОТ ИЗСЛЕДВАНИЯТА ВЪРХУ ГРУПИРАНЕ НА СТЪПАЛА

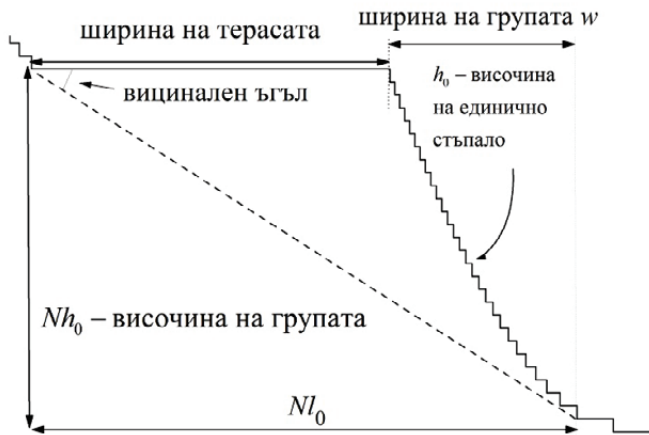
DIMENSIONAL ANALYSIS: AN EXAMPLE

Веселин Тончев

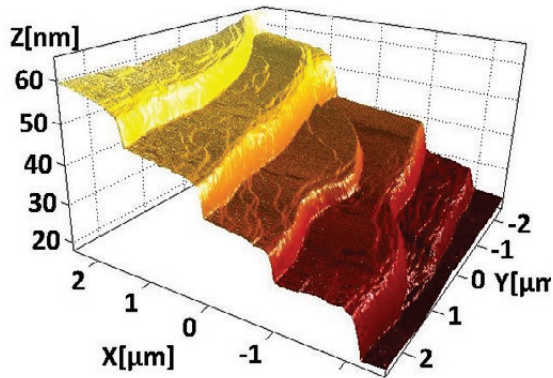
Институт по физикохимия „Акад. Ростислав Каишев“, БАН

В настоящето писмо представям един метод за получаване на научни резултати с малко начални инвестиции, който обаче има поне два значителни ефекта: (1) значително намаляване на разходите чрез драстично намаляване на броя на необходимите изследвания; и (2) достигане до резултати, до които принципно не може да се достигне директно, с използването на „груба сила“ (има и такъв подход в науката – „brutal force“!). Методът се нарича *анализ на размерностите* (*dimensional analysis*). Стигнах до него в рамките на числени изследвания върху модели на движението на стъпала върху вицинални кристални повърхности, но за разбиране на примера, който предлагам тук, не са необходими каквито и да е познания в тази област. За по-любознателните ще добавя, че кристалните повърхности биват два вида – гладки на атомен мащаб и вицинални. Вторите дължат съществуването си на дискретния характер на природата на атомен мащаб. Така кристалите не могат да бъдат срязани под произволен ъгъл и това винаги да води до гладки повърхности (Фиг. 1). Напротив, най-често се получават вицинални повърхности (или *вицинали*) – редуващи се атомно-гладки тераси и (моно-) стъпала. Вициналите са морфологически благоприятни за съвременните технологии за отлагане на тънки слоеве, защото кристалният растеж върху тях е по-добре контролируем, тъй като е *послоен* (*step-flow growth*) – стъпалата се движат по кристалната повърхност, присъединявайки или отделяйки градивните единици на дадения кристал. Алтернативата е чрез образуване на различни агрегати върху гладките повърхности, но то има до голяма степен случаен характер. Различните аспекти на послойния растеж са обект на интензивни проучвания от последните 60-ина години. Ако гледаме една такава повърхност от страни, тя напомня стълба. В някои случаи по време на движението си стъпалата се групират и така оставят големи тераси без (или с малък брой) стъпала върху тях (Фиг. 1 и 2). Както самите

групи, така и терасите между тях са обект на специален интерес с оглед на синтеза на нано-структури, за които се явяват подходящ наношаблон (Verre et al., 2013; Aqua et al., 2013). Напоследък групиране на стъпала е наблюдавано по време на синтез на графин (Eriksson et al., 2012).



Фиг. 1. Схема на вицинална повърхност, гледана от страни, с образувана върху нея група от N стъпала. Обозначени са и някои от величините, които се наблюдават при числено или експериментално изследване на групирането. Равнината на срязване склучва с хоризонталата ъгъл, наречен вицинал (също Tonchev et al., 2010).



Фиг. 2. Групи стъпала (почти отвесни), образувани при хомоепитаксиален растеж на InP филми, между групите се виждат и индивидуални стъпала. АСМ-изображението е предоставено любезно от Е. Пелучи и А. Гоцалинска, Тиндал, Корк, Ирландия (също Gocalinska et al., 2012).

Нека сега запишем в общ вид едно обикновено диференциално уравнение за скоростта на кое да е от стъпалата (с пореден номер i и координата x_i) в тази стълба:

$$v_i \equiv \frac{dx_i}{dt} = ka_i + ur_i \quad (1)$$

където a_i и r_i са функции, дефинирани в рамките на конкретния модел и съдържащи само разстояния между стъпала от вида $\Delta x_i \equiv x_i - x_{i-1}$ и (евентуално) безразмерни параметри, Δx_i дава ширината на терасата между стъпалата с номера i и $i-1$ в поредицата стъпала и има размерност на дължина (отбелязвана обикновено с L за Length). Размерността на a_i и r_i нека е L^q и L^m , съответно. Материалните параметри k и u допълват размерността на съответните членове до размерност на скорост, $L \cdot T^{-1}$ (T е за размерност на време), а числената им стойност определя относителното влияние на съответния член върху скоростта. Обособяването на два различни члена е резултат от присъствието в моделите на обикновено две различни тенденции. Едната винаги стабилизира движението на стъпалата и е резултат от отблъскване (repulsion) между тях вследствие на различни термодинамични фактори – при ниски температури енергетични, а при високи температури – ентропийни. Стабилизиращата роля се осъществява чрез „насърчаване“ на намалението на по-големите и увеличаване на по-малките разстояния в съседство с всяко стъпало посредством увеличение на скоростта в посока на по-далечното стъпало и, респективно, намаление на скоростта в посока на по-близкото. Другата тенденция може при определени условия да дестабилизира разстоянията между стъпалата, увеличавайки по-големите и намалявайки по-малките, т.е. има ефекта на междустъпално привличане (attraction). В явен вид размерностите на k и u са съответно $[k] = L^{1-q} T^{-1}$; $[u] = L^{1-m} T^{-1}$. Заедно с u -ние 1 се задава и началното разстояние между стъпалата l_0 , неговата константна стойност по протежение на вициналната повърхност отразява структурната кохерентност на кристала.

Ще използваме комбинации от тези параметри, за да обезразмерим уравнение (1), идентифицирайки характеристичните мащаби за дължина и време $\xi \equiv (u \cdot k^{-1})^{\frac{1}{q-m}}$ и $\tau^{-1} \equiv k(u \cdot k^{-1})^{\frac{q-1}{q-m}}$ и така въвеждайки безразмерни координати и време $X_i \equiv x_i/\xi$; $T \equiv t/\tau$. След заместване в уравнение (1) и извършване на съкращенията получаваме:

$$\frac{dX_i}{dT} = A_i + R_i \quad (2)$$

като сега A_i и R_i съдържат само *безразмерни* разстояния между стъпала от вида $\Delta X_i \equiv X_i - X_{i-1}$ и безразмерните параметри, ако са били в оригиналното уравнение (1). Така в резултат от процедурата по обезразмеряване се „отървахме“ от два параметъра и получихме ново уравнение, което е без параметри. При численото интегриране на система от такива уравнения, записана за даден брой стъпала (достъпен в изчислително отношение), вече не се задават поотделно параметрите k и u , а само безразмерното начално разстояние между стъпалата $L_0 \equiv l_0 / \xi$. „Класическото“ обезразмеряване на уравнение (1) при изследване на модели в областта на кристалния растеж използва вместо ξ началното разстояние между стъпалата l_0 и така в обезразмереното у-ние за алтернативните $X_i' \equiv x_i / l_0$ и $T' \equiv t k l_0^{q-1}$ остава един безразмерен параметър $U \equiv (u \cdot k^{-1}) l_0^{m-q} = L_0^{q-m}$ пред втория член в дясната му страна.

Да видим сега какви са ползите от новото безразмерно (*универсално*) уравнение (2). Преди всичко намаляването на броя на параметрите с един намалява необходимия брой изчисления с приблизително един порядък! Допълнително при всяка оценка на производната в процеса на численото интегриране на уравнение (2) се извършват по две умножения по-малко. Втората принципна полза от сравнително лесната операция, водеща до уравнение (2), е следствие от първата и засяга принципните резултати от изчисленията. При интегрирането на диференциални у-ния, описващи процеса на групиране, фокусът на изследването е върху т.нар. „режим на междинна асимптотика“ (Varenblat, 1996), когато образуваните се структури са самоподобни както във времето, така и в пространството. Количествен израз на това самоподобие (Pimpinelli et al., 2002) са скейлингови съотношения от вида¹⁾

$$l t^\delta = s_{lt} \tag{3}$$

където l е някакъв характеристичен размер – например средната ширина на групата w или средната ширина на терасата между групите или глобалното минимално разстояние (вж. Фиг. 1 за някои обозначения), а s_{lt} е скейлингов параметър (пред-фактор), l и t имат обичайните си размерности на дължина и време. Намирането на степента δ в експерименти и теоретично/числено е сравнително лесно, при условие че се следва един и същ протокол за наблюдение (Tonchev et al., 2010), а получаването на една и съща стойност в различни модели/експерименти е знак за *универсално* поведение (Pimpinelli et al., 2002; Krug et al., 2005). Едновременно с това намирането на s_{lt} като функция на моделните параметри (отвъд числената стойност, получена при напасването на данните със степенен закон) е нетривиално и досега не е бил предложен продуктивен подход.

Тази методологическа трудност е изкушаваща да бъдат обявени скейлинговите предфактори за *неуниверсални*.

Ако вместо уравнение (1) интегрираме уравнение (2), можем да очакваме скейлингово отношение – например за безразмерната ширина на групата $W \equiv w/\xi$, от вида

$$WT^{-1/z} = S_{WT} \quad (4)$$

Скейлинговият предфактор S_{WT} вече ще бъде (най-много) функция на L_0 и може да бъде значително по-лесно определен, а степента $1/z$ се очаква да бъде същата. Ако сега запишем *обратно* в размерен вид уравнение (4), ще получим

$$wt^{-1/z} = \xi \tau^{-1/z} S_{WT} = (u.k^{-1})^{\frac{z+q-l}{z(q-m)}} k^{1/z} S_{WT} = s_{wt} \quad (5)$$

Както се вижда, получаването на явния вид на s_{wt} в рамките само на числено изследване на оригиналното уравнение (1) дори за повишен брой стойности на оригиналните параметри k и u е практически непродуктивно поради нехомогенния му характер. Може сравнително лесно да бъде показано, че при изследване на у-ния, обезразмерени по „класическия“ начин с използване на началното междустъпално разстояние l_0 не би намалило принципната трудност за определяне на скейлинговия предфактор $S'_{W'T'}$, тъй като той остава нехомоген

$$W' \equiv \frac{W}{l_0} = U^{\frac{z+q-l}{z(q-m)}} S_{WT} T'^{\frac{1}{z}} = S'_{W'T'} T'^{\frac{1}{z}} \quad (6)$$

Търсеният предфактор $S'_{W'T'}$ е по-прост от оригиналния s_{wt} (уравнение (5)), но не достатъчно, за да бъде намерен практически. Ключът и към двете зависимости (уравнения (5) и (6)) е S_{WT} , чието намиране е практически възможно само при изследването на универсалното уравнение (2). Процедурата по представяне на уравненията на различни, изследвани и не толкова, модели във вида на уравнение (2), представителни за различните типове групиране (Tonchev, 2012) е предмет на настоящите ни изследвания.¹⁾

Дотук приложихме анализа на размерностите към „готови уравнения“, но силата на метода е дори по-голяма. В литературата са известни многобройни изследвания, в които информация за адекватно описание на дадено явление е получена, без да е налично у-ние, а само с правилно изброяване на факторите, от които би зависила интересуващата ни величина и анализ на техните размерности. Някои от най-по-

пулярните примери са въвеждането на числото на Рейнолдс, довело до отлагане на цялата налична дотогава информация по течения в тръби върху една-единствена крива и предсказанието на Дж. А. Тейлър за скоростта на вълната от ядрен взрив като функция от енергията на взрива (Barenblat, 1996). Следвайки тази формула Тейлър успява да определи по няколко кадъра от кинопреглед енергията на първия ядрен опит, извършен в САЩ – величина, допреди това пазена в строга секретност! На анализа на размерностите са посветени и немалък брой публикации в списания, както и интересно написани книги от различните периоди в развитието на метода (Barenblat, 1996; Bridgman, 1922; Huntley, 1967).

Благодарности. Авторът благодари на договор BG 051PO001-3.3.06-0038 за частичната финансова подкрепа и на Е. Пелучи и А. Гоцалинска за любезността им да предоставят Фиг. 2 в рамките на един неформален обмен.

БЕЛЕЖКИ

1. Tonchev, V., Staneva, D. & Akutsu, N. – to be submitted.

ЛИТЕРАТУРА

- Aqua, J.-N., Berbezier, I., Favre, L., Frisch, T. & Ronda, A. (2013). Growth and self-organization of SiGe nanostructures. *Phys. Rep.*, 522, 59 – 189.
- Barenblat, G.I. (1996). *Scaling, self-similarity and intermediate asymptotics: dimensional analysis and intermediate asymptotics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Bridgman, P.W. (1922). *Dimensional analysis*. New Haven: Yale University Press.
- Eriksson, J., Pearce, R., Iakimov, T., Virojanadara, C., Gogova, D., Andersson, M., Syvajarvi, M., Spetz, A.L. & Yakimova, R. (2012). The influence of substrate morphology on thickness uniformity and unintentional doping of epitaxial graphene on SiC. *Appl. Phys. Lett.*, 100, art. no. 241607.
- Gocalinska, A., Manganaro, M., Pelucci, E. & Vvedensky, D.D. (2012). Surface organization of homoepitaxial InP films grown by metalorganic vapor-phase epitaxy. *Phys. Rev. B*, art. no. 165307.
- Huntley, H.E. (1967). *Dimensional analysis*. New York: Dover.
- Krug, J., Tonchev, V., Stoyanov, S. & Pimpinelli, A. (2005). Scaling properties of step bunches induced by sublimation and related mechanisms. *Phys. Rev. B*, 71, art. no. 045412.
- Pimpinelli, A., Tonchev, V., Videcoq, A. & Vladimirova, M. (2002). Scaling and universality of self-organized patterns on unstable vicinal surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 88, art. no. 206103.

- Tonchev, V. (2012). Classification of the step bunching phenomena. *Bulg. Chem. Commn.*, 44 (special issue), 124-130.
- Tonchev, V., Rangelov, B., Omi, H. & Pimpinelli, A. (2010). Scaling and universality in models of step bunching: the “C⁺-C⁻” model. *Eur. Phys. J. B*, 73, 539-546.
- Verre, R., Fleischer, K., McGilp, J.F., Fox, D., Behan, G., Zhang, H. & Shvets, I.V. (2012). Controlled in situ growth of tunable plasmonic self-assembled nanoparticle arrays. *Nanotechnology*, 23, art. no. 035606.

Dr. Vesselin Tonchev,

✉ Institute of Physical Chemistry
Bulgarian Academy of Sciences,
1113 Sofia, Bulgaria

E-mail: vesselin.tonchev@gmail.com