

УДК 538.91
КП
№ держреєстрації 0112U006813
Інв.№

Міністерство освіти і науки України
Сумський державний університет
(СумДУ)
40007, м. Суми, вул. Римського – Корсакова, 2;
Тел.. (0542)334108; факс (0542)334049

ЗАТВЕРДЖУЮ
Проректор з наукової роботи,
д.ф. – м.н., професор
_____ А.М. Чорноус

ЗВІТ
ПРО НАУКОВО – ДОСЛІДНУ РОБОТУ
Дослідження процесів формування стаціонарних структур нано розмірного масштабу в процесах епітаксійного росту та конденсації
ОЗНАЙОМЛЕННЯ З ІСНУЮЧИМИ ЛІТЕРАТУРНИМИ ДАНИМИ ЩОДО ПРОЦЕСІВ УТВОРЕННЯ НАНОРОЗМІРНИХ СТРУКТУР ПРИ ЕПІТАКСІАЛЬНОМУ РОСТІ НА КОНДЕНСАЦІЇ. НАПИСАННЯ ПРОГРАМНОГО КОДУ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ ЧИСЕЛЬНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ФОРМУВАННЯ НАНО СТРУКТУР НА ПОВЕРХНІ МАТЕРІАЛІВ ПРИ ЕПІТАКСІАЛЬНОМУ РОСТІ, ІОННОМУ РОЗПИЛЕННІ ТА КОНДЕНСАЦІЇ
(проміжний)

Начальник НДЧ
К.ф.-м.н.

Д.І.Курбатов

Керівник НДР
К.ф.-м.н.

А.В.Дворниченко

2013

Рукопис закінчено 15 жовтня 2013р.
Результати цієї роботи розглянуто науковою радою СумДУ,
протокол від 2013.11.01 №1

Зміст

1 Вступ	5
2 Модель	9
3 Аналіз на стійкість дво-компонентної моделі	16
4 Чисельні результати	22
5 Обговорення	28
6 Висновки	34
Перелік посилань	36

Список авторів

Керівник теми
к.ф. - м.н.

Дворниченко Аліна Василівна

Реферат

Звіт про НДР 39с., 7 рис., 44 джерела.

Об'єктом дослідження є процес формування пірамідальних структур на поверхні матеріалу.

Метою роботи є розробка теоретичної схеми, яка дозволяє описати формування пірамідальних структур на поверхні матеріалу в процесах епітаксійного росту.

Методом дослідження. Розвинутий в роботі формалізм ґрунтується на методах стохастичної динаміки, теорії середнього поля та відповідної феноменологічної схеми та на методах чисельного моделювання.

Результатом роботи встановлено, що пірамідальні структури можуть формуватися за умови низьких значень інтенсивності взаємодії адсорбату внаслідок вкладу термодинамічної сили до потоку адсорбату, що є протилежним до дифузійного потоку.

Взаємозв'язок з іншими роботами результати роботи доповідались на наукових семінарах та конференціях, були опубліковані в наукових журналах.

Рекомендації по використанню результатів роботи результати роботи можуть бути використані для опису та прогнозування процесів епітаксимального росту пірамідальних структур на поверхні матеріалу.

Галузь застосування результати можуть бути використані для опису та прогнозування процесів епітаксимального росту пірамідальних структур на поверхні матеріалу.

Значущість роботи і висновки запропоноване узагальнення стандартної моделі фазового поля для опису процесів формування пірамідальних структур на поверхні матеріалу при епітаксимальному рості може бути використане для опису систем (наприклад, напівпровідників), для яких локальна зміна температури конденсату може відігравати визначну роль у процесах формування поверхневих структур.

Прогнозні припущення про розвиток об'єкту дослідження планується продовження дослідження процесів формування пірамідальних структур на поверхні матеріалу в процесах епітаксійного росту за умов врахування різниці у параметрах ґратки субстрату та матеріалу, що осажується

ЕПІТАКСІЙНЕ ЗРОСТАННЯ, ФАЗОВЕ ПОЛЕ, ФОРМУВАННЯ СТРУКТУР, АДАТОМ, АДСОРБАТ.

1 Вступ

Молекулярно - променева епітаксія є типовим прикладом сучасних технологій для вирощування монокристалів, які успадковують атомну структуру субстрату. Відомо, що при такому способі вирощування матеріалів осаджений матеріал утворює пучок нейтральних атомів всередині камери. За рахунок хімічного зв'язку атоми, що приходять до субстрату, можуть адсорбуватися (стати адатомами). Такі адатоми можуть десорбувати назад в парову фазу з кінченною ймовірністю. Якщо вони залишаються на підкладці, то вони можуть дифундувати по поверхні, займаючи найбільш енергетично вигідні положення. Адатоми можуть взаємодіяти один з одним і утворювати кластери, острови пірамідальної структури. Морфологія поверхневих структур визначається взаємодією між процесами адсорбції, десорбції, нуклеації на вершині острова, крайової дифузії, дифузії через тераси, димерної дифузії, приєднання та від'єднання від границі островів та коалісценції островів [1–3].

Симуляційні процедури для моделювання процесів росту островів при епітаксії слугують ефективним інструментом для розуміння та пояснення самого процесу епітаксіального росту. Насьогодні самоузгодженням чином використовуються кілька теоретичних методів для вивчення різних процесів в рамках схеми багаторівневого моделювання. Поведінка системи може бути розглянута на різних ієрархічних рівнях, що дозволяє описувати атомістичні процеси [4], процеси на дифузійних часових масштабах з утворенням окремих островків [5], теоретичні методами із сходінками, засновані на сходінкових моделях [6], морфології поверхні [7–10].

Серед таких підходів відома мезоскопічна модель Бартона - Кабрера - Франка (КБФ) для потоку по сходінкам, яка широко використовується при моделюванні процесів епітаксіального зростання поверхні за раху-

нок того, що вона дозволяє представити границі островів як сходи [11]. Дана модель є дискретною у напрямку зростання та неперервною в горизонтальному напрямку. Позиція сходи задається неперервною кривою і густина адатомів на кожній терасі описуються неперервною функцією. У рамках цього підходу границі островків можуть бути змодельовані рівнянням типу дифузійного, для густини адатомів при необхідних граничних умовах, пов'язаних з мікроскопічними деталями атомних процесів на границях острова.

Однією з модифікацій моделі КБФ є підхід, заснований на теорії фазового поля, що широко застосовується для загальної категорії проблем із вільними границями, таких як: затвердіння [12], твердо тільні фазові переходи [13], Освальдового визрівання [14], нуклеація [15] і т.д. Цей метод може бути представлено як розвинення теорії фазових переходів Гінзбурга - Ландау, де одночасно поєднанні частково диференціальні рівняння для концентрації та фазового поля (фазово поле відіграє роль параметра порядку при розрізненні різних фаз). Як пояснили Л'ю та Метью в роботі [16], і Карма та Плапп в роботі [17] теорія наближення фазового поля є хорошим методом для опису процесів епітаксійного росту. Узагальнення підходу фазового поля з урахуванням стохастичних ефектів у процесах пірамідального росту обговорювалося в роботі [18]. Було показано, що флуктуації дифузійного потоку можуть суттєво змінювати динаміку зростання островків і регулювати морфологію поверхневих структур. У попередніх дослідженнях було показано, що формування структур у системах реакційно - дифузійного типу з квазі - хімічними реакціями [19–22] або процесів адсорбції / десорбції [23] або підданих іонно - променевому впливу [8] дуже чутливі до флуктуацій, що представляють мультиплікативний шум.

У дослідженнях епітаксійного росту на основі стандартної моделі БКФ було зроблено припущення, що десорбція відбувається з постійною швидкістю і відсутня взаємодія з адсорбованими речовинами (за винятком нуклеації). З іншого боку, відомо, що така взаємодія може бути викликана невідповідністю ґратки або еластичного напруження. Крім того, у наближенні підходу фазового поля система розглядається при фіксованій (постійній) температурі, тобто передбачається еквівалентність температури бані (парова фаза) і температура конденсату. Враховуючи фізику епітаксії, слід вважати, що процеси адсорбції можуть локально збільшувати температури зростаючої поверхні, в той час як процеси десорбції призводять до локального зниження температури. Крім того, реконструкція терас, сформованих із адатомів на пірамідальних структурах потребує додаткової кількості енергії, отриманої від адатомів. У такому випадку при формуванні терас температура конденсату може зменшуватись. Таким чином, конкуренція таких процесів навіть на мезоскопічному рівні може локально змінювати температуру конденсату у осциляційний спосіб. Затухаючі коливання температури конденсату було експериментально виявлено та показано в роботі [24]). Коливання температури в системах з процесами адсорбції і десорбції були теоретично передбачені в роботі [25]. Було показано, що такі коливання викликані фіксованим ненульовим часом релаксації для врівноваження, тобто температура зростаючої поверхні T досягає температури бані T_0 протягом фіксованого інтервалу часу. Цей час може бути малим, але фіксованим, він задається мікроскопічними процесами в системі (реорганізація поверхні за рахунок анігіляції дефектів на поверхні та їх рух у стоки). У такому випадку, залишається відкритою проблема розуміння фізичної причини, що призводить до коливань температури конденсату в епітаксії і визначення умов епітаксійного росту, коли

реалізовано вищезгаданий режим.

При виконанні проекту нами запропоновано узагальнена модель фазового поля, коли температур конденсату є полем, що може змінюватися локально з часом. Нами буде визначено додаткові механізми та встановлено умови, коли в процесі епітаксії можуть організовуватись пірамідальні структури. Вивчення конкуренції різних механізмів, що приводять до нагріву / охолодження поверхні внаслідок адсорбції і десорбції, і просторова організація взаємодіючого адсорбата призводить, що призводить до температурних коливань нами буде розглянуто динаміку системи в статистичному сенсі в рамках аналізу середнього поля. Це дозволить встановити параметри системи (сила взаємодії адсорбата та потік осадження), коли реалізується коливальний режим зростання поверхні. Буде проведено порівняння отриманих теоретичних даних із чисельними симуляціями та проаналізовано динаміку зростання поверхні та поведінку поля температури. Порівнюючи динаміку зростання островів у стандартній моделі фазового поля, запропонованої Лю і Metiu в роботі [16] і узагальненої моделі, отриманої нами буде встановлено, що процес формування пірамідальних структур може бути підтриманий термодинамічною силою, що задається потоком адсорбата. Буде проведено порівняльний аналіз скейлінгових властивостей структур у вказаних двох моделях з метою встановити відмінність у процесах формування поверхневих структур з різними механізмами взаємодії адсорбата.

2 Модель

Для опису зростаючої поверхні запишемо рівняння для безрозмірного дифузійного поля $x = \Omega(c - c_{eq}^0)$, де c є концентрації адатомів, Ω атомна площа, c_{eq}^0 рівноважна концентрація в прямому напрямку. У рамках класичної БКФ моделі зростаючої поверхні основні рівняння мають вигляд [11]

$$\begin{aligned} \partial_t x &= F - \frac{x}{\tau_x} + \nabla \cdot D \nabla x, \\ v_n &= D \left[\left(\frac{\partial x}{\partial n} \right)_+ - \left(\frac{\partial x}{\partial n} \right)_- \right], \quad x = d_0 \kappa. \end{aligned} \quad (1)$$

Тут F це ефективна швидкість осадження, що пов'язана із актуальним потоком осадження, що приходить на атомну площину F_d у вигляді

$$F = F_d - c_{eq} \Omega / \tau_x, \quad (2)$$

τ_x це середній час для осадження адатомів з розчину. Складова $\nabla \cdot D \nabla x$ описує дифузію адатомів на гратці, D це коефіцієнт поверхневої дифузії. Тут v_n це нормальна швидкість на сходинці та $(\partial x / \partial n)_\pm$ це нормальний градієнт концентрації на нижній (+) та верхній сторонах сходинки (-). Мікроскопічна знерозмірена капілярна довжина d_0 визначається через локальну кривизну сходинки κ та її жорсткість γ у наступному вигляді $d_0 = \Omega^2 c_{eq}^0 \gamma / T$, T це температура. Звичайно, швидкість десорбції визначається згідно з рівнянням Ареніуса

$$\tau_x = \nu_0^{-1} \exp(E_{des}/T), \quad (3)$$

де ν_0 константа швидкості десорбції, E_{des} це енергія десорбції. Коефіцієнт дифузії визначається як

$$D = a^2 \nu_d \exp(-E_{diff}/T), \quad (4)$$

де a це параметр гратки фізичного субстрату(підкладки), ν_d це частота, E_{diff} енергія дифузійного бар'єру, $E_{des} < E_{diff}$.

Далі, згідно робатам Refs. [26–28] ми будемо вважати, що процес десорбції характеризується швидкістю τ_x^{-1} , що залежить від просторової взаємодій адсорбату. Сильний локальний зв'язок, індукований взаємодією $U(\mathbf{r})$ приводить до корекції швидкості десорбції:

$$\tau_x^{-1} = \tau_{x0}^{-1} \exp(U/T). \quad (5)$$

Заздалегіть було показано, що притягуючий потенціал генеріє потік, що є протилежним дифузійному потоку [26–28]. Потенціал притягання між частинками, розділених відстанню r може бути записаний у вигляді:

$$U(x(\mathbf{r})) = - \int u(\mathbf{r} - \mathbf{r}')x(\mathbf{r}')d\mathbf{r}', \quad (6)$$

де $u(r)$ це сферично - симетрична функція, що залежить від природи системи. Крім того, на адсорбовані частинки діє термодинамічна (хімічна) сила, $\mathbf{f} = -\nabla(U/T)$ що індукує швидкість $\mathbf{v} = D\mathbf{f}$ (зв'язок Ейнштейна). Відповідний потік частинок це $\mathbf{v}x$. Оскільки потік можливий лише на $(1 - x)$ вільних місць, таким чином, для опозиційного потоку маємо рівняння

$$\mathbf{J}_o = -Dx(1 - x)\nabla(U/T), \quad (7)$$

в той час, як дифузійний потік дається зв'язком $-D\nabla x$. Враховуючи даний потік, приходимо до рівняння для поля концентрації у наступному вигляді

$$\partial_t x = F - \frac{x}{\tau_{x0}} e^{U/T} - \nabla \cdot \mathbf{J}_{tot}; \quad (8)$$

$$\mathbf{J}_{tot} = -D [\nabla x + x(1 - x)\nabla(U/T)].$$

Вважаючи, що довжина взаємодії r_0 між двома адатомами є малою, порівняно із дифузійною довжиною $\ell = \sqrt{D\tau_{x0}}$ ($r_0 \sim 1nm$, $\ell \sim 1\mu m$ для металів), таким чином, $r_0 \ll \ell$, можна записати $U(x(r)) \simeq -\epsilon x(r)$ де $\epsilon = \int u(r)dr$. Представлений формалізм є загальним та може бути засто-

сований для великого класу систем: напівпровідники, де величина ϵ залежить від властивостей конкретного матеріалу.

Як відомо, що чисельне моделювання проблеми епітаксійного зростання матеріалу за умови наявності сходинок є нелегким завданням [29]. В роботі [16, 17] було показано, що модель БКФ, яка використовується тут може бути замінена на відповідну модель фазового поля, яка дозволяє спростити як аналітичний аналіз системи, так і чисельні симуляції процесів зростання епітаксіальної поверхні. Основна ідея наближення фазового поля полягає у введенні параметру порядку $\phi(\mathbf{r}, t)$ що визначає фазу у кожному положенні (роботи [17, 30–32]). В нашому випадку фазове поле ϕ пов'язане з висотою поверхні, вимірної в одиницях параметра ґратки a епітаксіального матеріалу згідно з кількістю моно - атомних шарів. Відповідно до [16], локальні стійкі мінімуми параметра порядку пов'язані з терасами, у той час, як простора варіація ϕ відповідає положенням сходинок. Відповідно до [16, 17] в нашій моделі використовується рівняння для поля концентрації, загальний потік адсорбату та та стандартне рівняння еволюції для фазового поля ϕ у вигляді

$$\tau_\phi \partial_t \phi = - \frac{\delta H}{\delta \phi}, \quad (9)$$

де функціонал вільної енергії

$$H = \int d\mathbf{r} [\varpi^2 (\nabla \phi)^2 / 2 + h(\phi, x)], \quad (10)$$

визначається через густину вільної енергії

$$h(\phi, x) = \frac{1}{2\pi} \cos(2\pi[\phi - \phi_s]) - \lambda x \left(\phi + \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi[\phi - \phi_s]) \right). \quad (11)$$

Тут ϖ визначає ширину сходинок, λ це знерозмірена константа зв'язку, $\phi_s/2$ це висота початкового субстрату(підкладки). Ця модель може бу-

ти зведена до моделі "тверде тіло на тверде тіло коли зв'язок між двома полями визначається константою пересичення. Складова із виразом $1 + \cos(\pi[\phi - \phi_s])$ визначає, що мінімуми функціоналу вільної енергії H можливі лише за умови $\phi - \phi_s = 2n + 1$, незалежно від концентрації адатомів [17].

Розглянемо вплив температури конденсованої фази на потік адсорбату. Використовуючи лінійну теорію Онзагера, можна записати загальний потік у формі

$$\mathbf{J}_{tot} = -L\nabla(\mu/T), \quad (12)$$

де L це кінетичний коефіцієнт та μ це хімічного потенціалу, для якого ми маємо

$$\nabla\mu = (\partial\mu/\partial x)_T \nabla x + (\partial\mu/\partial T)_x \nabla T. \quad (13)$$

Перетисуючи рівня загального потоку у вигляді

$$\mathbf{J}_{tot} = -\frac{L}{T} \left(\left. \frac{\partial\mu}{\partial x} \right|_T \nabla x + \left. \frac{\partial\mu}{\partial T} \right|_x \nabla T - \frac{\mu}{T} \nabla T \right), \quad (14)$$

можемо визначити функціонал вільної енергії \mathcal{F} , що задається хімічним потенціалом $\mu = \delta\mathcal{F}/\delta x$ у вигляді $\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 + \mathcal{F}_{int}$, де

$$\mathcal{F} = \int d\mathbf{r} \left\{ T [x \ln x + (1-x) \ln(1-x)] - \frac{\epsilon}{2} x^2 \right\}. \quad (15)$$

Тут перша складова відповідає невзаємодіючій частині \mathcal{F}_0 та представляє собою ентропійний вклад, тоді як друга складова відповідає за взаємодіючий вклад \mathcal{F}_{int} , пов'язаний з внутрішньою енергією. Визначаючи кінетичний коефіцієнт у формі $L \equiv Dx(1-x)$ для загального потоку отримуємо стандартну формулу:

$$\mathbf{J}_{tot} = -\frac{D}{T} x(1-x) \nabla \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta x}. \quad (16)$$

Добре відомо, що навіть у рівноважному стані термодинамічні величини, якими є температура, тиск, об'єм та термодинамічні потенціали, зазнають флуктуацій згідно із внутрішніми процесами у системі [33]. В цій

роботі нас цікавить саме флуктуації температури. Зазвичай, процес на-
 стіпу термічної рівноваги розглядається як швидкий (швидше, ніж любий
 поверхневий процес). З теоретичної точки зору необхідно враховувати, що
 любий фізичний процес характеризується своїм власним часовим мас-
 штабом. Це пов'язано не тільки з полями x та ϕ , але і з динамікою по-
 ля температури. Розглядаючи просторові системи, поле температури по-
 винно задовольняти закону Фур'є, який може біти записаний у загальній
 формі

$$\partial_t T = \nabla \cdot \int_0^t \mathcal{M}(t, t'; \tau_\chi) \nabla T(\mathbf{r}, t') dt'. \quad (17)$$

Швидка релаксація збурень температури відповідають вибору форми фун-
 кції пам'яті $\mathcal{M}(t, t'; \tau_\chi \rightarrow 0) = \chi \delta(t - t')$, де час кореляції $\tau_\chi \rightarrow 0$, χ грає
 роль термічної дифузії. Однак це протилежить природі реальних фізичних
 феноменів, що призводить до нескінченної швидкості розповсюдження для
 поля температури [34]. Щоб уникнути такої патології у даній моделі, не-
 обхідно припустити, що τ_χ це мала, але ненульова величина та відповідна
 функція пам'яті визначається наступним чином

$$\mathcal{M}(t, t'; \tau_\chi) = \chi \tau_\chi e^{-|t-t'|/\tau_\chi}. \quad (18)$$

З фізичної точки зору випадок $\tau_\chi \neq 0$ приводить до утворення темпера-
 турних хвиль [34] або процесів відбору структур (роботи [35–37]). В реак-
 ційно - дифузійних системах введення такого самого часового масштабу
 призводить до осциляційної динаміки процесів структуроутворення на по-
 верхні при конденсації [23, 38].

Така осцеляційна поведінка системи реалізується на початковій ста-
 дії еволюції системи та характеризується малими амплітудами. Фізичний
 зв'язок між τ_{x0} та τ_χ можна записати в наступному вигляді $\tau_{x0}/\tau_\chi \gg 1$.
 З іншого боку існує інший часовий масштаб $\tau_T \gg \tau_\chi$ пов'язаний з ре-
 лаксацією температури конденсату до температури бані T_0 . Розглядаючи

загальний випадок, ми припускаємо, що часовий масштаб температурної рівноваги зростаючої поверхні є малим (для металів) або такого ж порядку (напівпровідники або аморфні матеріали) у порівнянні з часовим масштабом для поверхневих процесів, таких як, $\tau_T/\tau_{x0} \equiv \nu \lesssim 1$. Для ілюстрації добре виражених осциляцій поля температури можна розглядати математичну границю $\nu > 1$ [35].

Як було вказано вище, температура зростаючої поверхні може локально змінюватись у процесах адсорбції десорбції: коли атом становиться адатомом, температура локально зростає та вона зменшується, коли спостерігається десорбція адатомів. Більш того, температура може зростати завдяки впливу потоку атомів заданого через F . Використовуючи вище зазначені механізми варіації температури можна записати рівняння еволюції поля температури у вигляді

$$\partial_t T = \frac{T_0 - T}{\tau_T} + \chi \Delta T + \alpha F x + \beta \partial_t x. \quad (19)$$

Тут третя складова описує перенагрів поверхні з інтенсивністю α обміну енергії із середовищем завдяки потоку адсорбції F . Це стандартне припущення широко використовується розглядаючи нестійкості температури в хімічних реакціях (роботи [39] або [40]). Тут нестійкість температури може спричиняти реорганізацію поверхні завдяки анігіляції дефектів на поверхні та їх міграції на стоки. Третя складова в рівнянні (19) не враховує зміну температури сходинки. Така зміна температури може бути описана параметром порядку (фазою) поля. В нашому розгляді цей ефект ефективно враховується через введення останнього доданку в рівняння (19). Це пов'язано також з локальним нагрівом ($\partial x/\partial t > 0$) або охолодженням ($\partial x/\partial t < 0$) на протязі процесів адсорбції - десорбції з інтенсивністю β , у загальному випадку це пов'язано з формуванням сходинки. В нашому випадку обидві константи α та β є параметром порядку.

В подальшому вивченні зручно перейти до безрозмірених величин вимірюючи час в τ_{x0} , та просторову змінну у величинах дифузійної довжини $\ell = \sqrt{D\tau_{x0}}$. Більш того, вводячи знерозмірені величини, $F' \equiv F\tau_{x0}$, $\varepsilon \equiv \varepsilon/T_0$, $\theta \equiv T/T_0$, $\chi' \equiv \chi\tau_T$, $\alpha' \equiv \alpha\tau_T/T_0$, $\beta' \equiv \beta\tau_T/T_0$, поклавши $\tau_\phi/\tau_{x0} = 1$ та опускаючи штрихи, приходимо до замкненої системи трьох рівнянь, що описують процеси епітаксіального зростання матеріалу у вигляді

$$\begin{cases} \partial_t x = F - x e^{-\varepsilon x/\theta} - \nabla \cdot \mathbf{J}_{tot} - \frac{1}{2} \partial_t \phi + \zeta_x(\mathbf{r}, t), \\ \partial_t \phi = \varpi^2 \Delta \phi - \partial_\phi h(x, \phi) + \zeta_\phi(\mathbf{r}, t), \\ \nu \partial_t \theta = 1 - \theta + \chi \Delta \theta + \alpha F x + \beta \partial_t x + \zeta_\theta(\mathbf{r}, t). \end{cases} \quad (20)$$

Ця модель є узагальненням стандартного підходу фазового поля поданого у Ref. [16] де динаміка островів описується концентрацією адатомів, полем висоти (виміряною у кількості моноатомних шарів) та температурою конденсату. Третя складова у рівнянні концентрації адатомів пов'язана з переносом маси між популяцією адатомів та сходиною. Тут ми включили флуктуаційні джерела, що відповідають за статистичний опис динаміки системи. Ці стохастичні джерела обиралися у формі Гаусових статистично незалежних шумів з нульовим середнім та однаковою інтенсивністю, а саме $\langle \zeta_\mu \rangle = 0$, $\langle \zeta_\mu(\mathbf{r}, t) \zeta_\varkappa(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta_{\mu,\varkappa} \delta(t-t') \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$, де $\mu, \varkappa \in \{x, \phi, \theta\}$. Далі, розглянемо окремо двокомпонентну модель, виключаючи фазове поле та трикомпонентну модель зростання островів.

3 Аналіз на стійкість дво-компонентної моделі

Відомо, що, враховуючи часову поведінку поля ϕ можна описати різні режими еволюції системи і відповідної зміна морфології поверхні [16]. У випадку $\partial_t \phi = 0$ поверхня не зростає з часом (висота поверхні залишається постійною). Тут ймовірність процесів адсорбції та десорбції еквівалентна. у випадку $\partial_t \phi \equiv v_\phi > 0$ висота поверхні зростає. Тут слід розрізняти два два можливі випадки $v_\phi = const$ та $v_\phi = v_\phi(t)$. В першому випадку висота зростає з постійною швидкістю. Це схоже на механізм Франка-ван дер Мерві (пошарове зростання). у більш складному випадку, коли $v_\phi = v_\phi(t)$ динаміка висоти поля ϕ управляє процесами формування островів (механізм Фольмер - Вебера або Странського - Крастанова). В третьому випадку, пов'язаному з $\partial_t \phi < 0$ процеси десорбція / випаровування мають перевагу і в результаті висота поверхні зменшується. В нашому випадку ми розглядаємо випадок, пов'язаний тільки з $\partial_t \phi = 0$ та $\partial_t \phi > 0$.

Щоб зробити детальний аналітичний аналіз, далі ми розглянемо статистичні середні, припускаючи, що $v_\phi = const > 0$ для зростаючої поверхні без утворення островів і $v_\phi = 0$ для поверхні, що не росте. В аналізі на стійкість вивчається найпростіший випадок, пов'язаних з макроскопічним наближенням, що дозволяє знехтувати всіма можливими кореляціями в системі. У рамках такого підходу ми може покласти $\langle \mathcal{A}(\cdot) \rangle \simeq \mathcal{A}(\langle \cdot \rangle)$ (for $\forall \mathcal{A}(\cdot)$) і знехтувати складовими з просторовими операторами. Для вивчення випадку $v_\phi > 0$ ми припускаємо, що $\phi \simeq v_\phi t$. Таким чином, проводячи усереднення другого рівняння системи (20), отримуємо співвідношення $\langle v_\phi \rangle \simeq \lambda x_0$, де $x_0 \equiv \langle x(t \rightarrow \infty) \rangle = const$ відповідає за стаціонарне значення поля концентрації. Таким чином, динаміка усереднення в макроскопічному наближенні може бути описана системою двох рівнянь

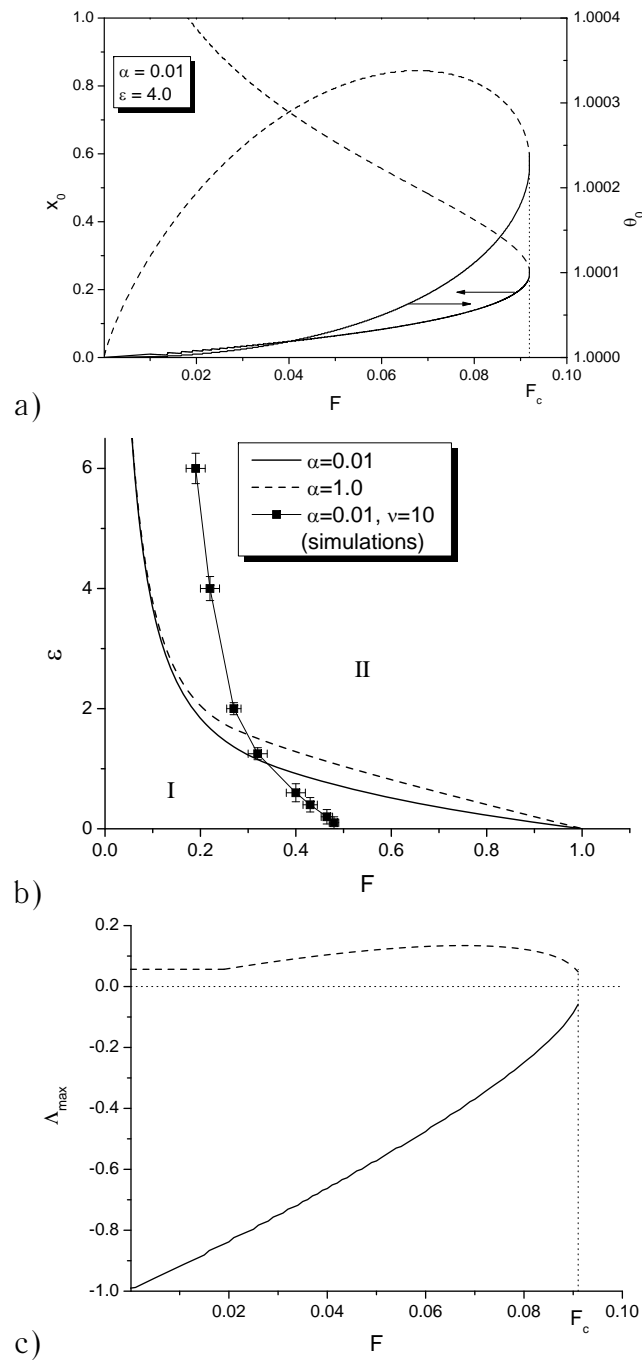


Рисунок 1— (а) Стационарні стани однорідної системи (21) від потоку F . (б) Фазова діаграма системи (в області 1 островки не ростуть, оскільки $\partial_t \langle \phi \rangle = 0$, в області 2 островки ростуть завдяки $\partial_t \langle \phi \rangle > 0$). (с) Максимальне значення показника Ляпунова для відповідних стаціонарних станів.

у вигляді:

$$\begin{cases} \partial_t \langle x \rangle = F - \langle x \rangle e^{-\varepsilon \langle x \rangle / \langle \theta \rangle} - \frac{1}{2} \langle v \phi \rangle, \\ \nu \partial_t \langle \theta \rangle = 1 - \langle \theta \rangle + \alpha F \langle x \rangle + \beta \partial_t \langle x \rangle; \end{cases} \quad (21)$$

де

$$\langle v_\phi \rangle = \begin{cases} 0, & \text{не зростаюча поверхня;} \\ \lambda x_0 > 0, & \text{зростаюча поверхня.} \end{cases}$$

При $v_\phi = 0$ ця система має два стаціонарні стани $\{x_0^{(1)}, \theta_0^{(1)}\}$, $\{x_0^{(2)}, \theta_0^{(2)}\}$ при певних фіксованих значеннях для вільних керуючих параметрів, що зводяться до F , ε , α та β .

Розглянемо найпростіший випадок формування плоскої поверхні. Стаціонарні значення концентрації адатомів та температури визначаються розв'язком двох рівнянь, що зводяться до $\theta_0 = 1 + \alpha F x_0$ та $F = x_0 e^{-\varepsilon x_0 / (1 + \alpha F x_0)}$. Відповідні залежності $x_0^{(1,2)}$ та $\theta_0^{(1,2)}$ від F представлені на малюнку Рис. 1а. Тут суцільна та штрихова лінії відносяться до $\{x_0^{(1)}, \theta_0^{(1)}\}$, та $\{x_0^{(2)}, \theta_0^{(2)}\}$, відповідно. Видно, що стаціонарні стани реалізуються нижче критичного значення потоку, що позначається як F_c . При $F > F_c$ стаціонарні стани не реалізуються у випадку $v_\phi = 0$. Використовуючи біфуркаційну діаграму, представлену на малюнку Ри. 1а можна обчислити фазову діаграму залежності критичного значення ε та потоку F (Рис. 1b). Тут в області нижче кривої може реалізуватися незростаюча поверхня. Використовуючи стандартну процедуру лінійного аналізу стійкості стаціонарних станів при $v_\phi = 0$ ми отримуємо відповідні показники Ляпунова. Залежності максимальних показників Ляпунова $\Lambda_{max}^{(i)} = \max\{\Lambda_1^{(i)}, \Lambda_2^{(i)}\}$ (тут i позначає відповідне стаціонарне значення $\{x_0^{(i)}, \theta_0^{(i)}\}$) для стаціонарних станів представлена на Рис. 1с. Звідси випливає, що стан, що характеризується великим значенням стаціонарного покриття та відповідної температури (штрихова лінія на Рис. 1а) являється нестійким. Порівнюючи отримані результати для узагальненої моделі із результатами, отриманими у стандартному підході при постійному значенні температури $\theta = 1$ можна показати, що у загальному випадку отримуємо стаціонарні значення для покриття,

визначеного як розв'язок рівняння $F = x_0 e^{\varepsilon x_0}$. Відповідна фазова діаграма може бути отримана аналітично та залежність критичних значень F та ε у наступному вигляді $F = (\varepsilon \varepsilon)^{-1}$. У стандартній моделі ми отримуємо значення ε та F , що обмежують область формування пірамідальних структур. В узагальненій моделі, коли вплив температури модифікує швидкість десорбції, пірамідальні структури можуть реалізовуватися за нескінченно малих значень для ε при $F > F_c$.

Далі, розглянемо випадок зростання острівців, взявши $\nu_\phi > 0$ при $F > F_c$. У такому випадку існує єдиний стаціонарний однорідний стан, що визначається як: $\theta_0 = 1 + \alpha F x_0$, $F - \lambda x_0 / 2 = x_0 e^{-\varepsilon x_0 / (1 + \alpha F x_0)}$. Далі, використовуючи стандартним способом лінійного аналізу на стійкість знаходимо відповідні показники Ляпунова. Отримує інтервал значень α та ν при фіксованому ε , F , та β коли показники Ляпунова мають дійсні та уявні частини (див. Рис2а). При від'ємній дійсній частині (суцільні лінії на Рис.2а) показників Ляпунова як усереднена концентрація і усереднена температура проявляють режим затухаючих коливань внаслідок ненульової уявної частини показника Ляпунова (пунктирні лінії) у інтервалі $[\nu_{c1}, \nu_{c2}]$ при фіксованому α (див. рис.2а). Фазова діаграма, представлена на рис.2б вказує на можливі значення α та ν обмеженої області коливального режиму. Він реалізується над кривими, нижче кривих реалізується звичайна релаксація Дебая до стаціонарних значень x_0 і θ_0 . Оскільки $\nu \equiv \tau_T / \tau_{x_0}$ коливання можливі в широкому діапазоні часових масштабів вимірювання динаміки $\langle x \rangle$ і $\langle \theta \rangle$. Дійсно, тут ν приймає значення менше 1 та $\nu > 1$. Зниження швидкості осадження F призводить до збільшення критичного значення ν для підвищених α (пряма та пунктирна крива крива). Якщо ми збільшимо енергію взаємодії ε , критичне значення для ν і α обмежує коливальну динаміку та приймає великі значення (див. штрих -

пунктирна лінія). Принципово важливо, що коливальний режим можливий навіть при $\beta = 0$ (див. пунктирна лінія). Тут критичні значення для ν зменшуються, а інтервал α і ν , що характеризує коливальний режим, стискається. Таким чином, в простому випадку, коли поверхня зростає постійно (осад / розпилення) реалізується коливальна поведінка, як $\langle x \rangle$ та $\langle \theta \rangle$ реалізується.

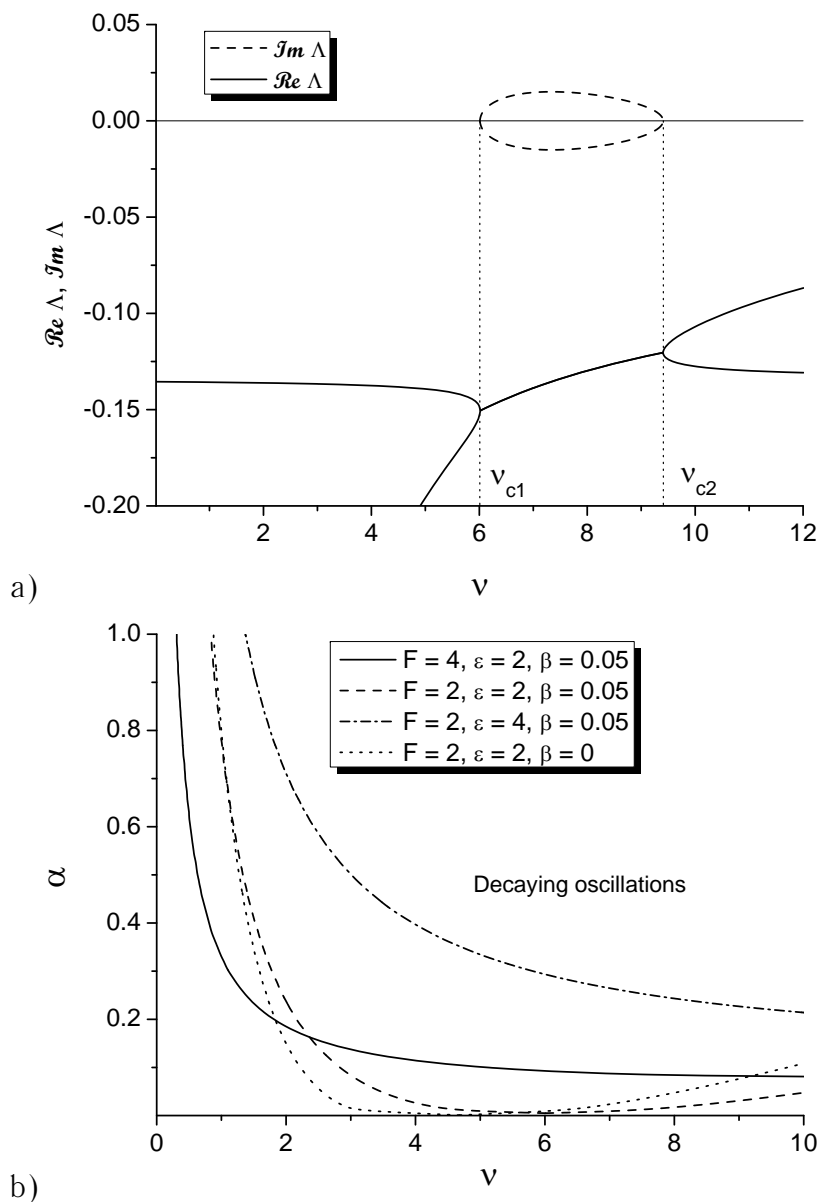


Рисунок 2— (а) Залежності дійсної (суцільна лінія) уявної частин (пунктирна лінія) показників Ляпунова ν при $\alpha = 0.01$ (інші параметри: $\varepsilon = 2, F = 2, \lambda = 10, \beta = 0.05$). (б) Фазова діаграма реалізації коливального режиму при $\lambda = 10$. В області над кривими реалізується згасаючий осциляційний режим, в той час, як під кривими реалізується Дебаєвська релаксація

Треба підкреслити, що в нашому підході для двокомпонентної моделі було припущено, що $v_\phi = const$, у той час, коли, в трикомпонентній моделі $\partial_t \langle \phi \rangle$ має більш складний вид, викликаний переходами до кількох мінімумів щільності гамільтоніану, $h(\phi, x)$, відображаючи формування терас на зростаючому острові. У разі трикомпонентної моделі поведінка системи може бути вивчена тільки чисельно. Використовуючи цей підхід, далі буде розглянуто випадок з малою швидкістю осадження, $F < F_c$, що призведе до $\partial_t \langle \phi \rangle = 0$. Буде встановлено, що при $F > F_c$ кількість $\partial_t \langle \phi \rangle$ має тимчасову залежність у вигляді збільшення ступінчастої функції. В результаті отримаємо осциляторну поведінка середніх $\langle x \rangle$ та $\langle \theta \rangle$ довільному виборі значень α та ν .

4 Чисельні результати

Далі розглянемо динаміку формування структур шляхом чисельного розв'язку системи (20) на двовимірній ґратці $L \times L$ з лінійним розміром $L = 256\ell$ та періодичними граничними умовами. Просторовий оператор розраховувався за методом кінцевих різниць. При моделюванні обирався крок за часом $\Delta t = 2.5 \times 10^{-4}$ та крок по ґратці $l = 1$. У якості початкових умов обиралося гаусове розподілене поле $\phi(\mathbf{r}, 0)$ з $\langle \phi(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0$ та $\langle (\delta\phi(\mathbf{r}, 0))^2 \rangle = 0.1$. У якості початкових умов для покриття та температури використовувалось $x(\mathbf{r}, 0) = 0$ та $\theta(\mathbf{r}, 0) = 1$.

Ілюстрації типової еволюції системи представлені на рис.3 при $F > F_c$.

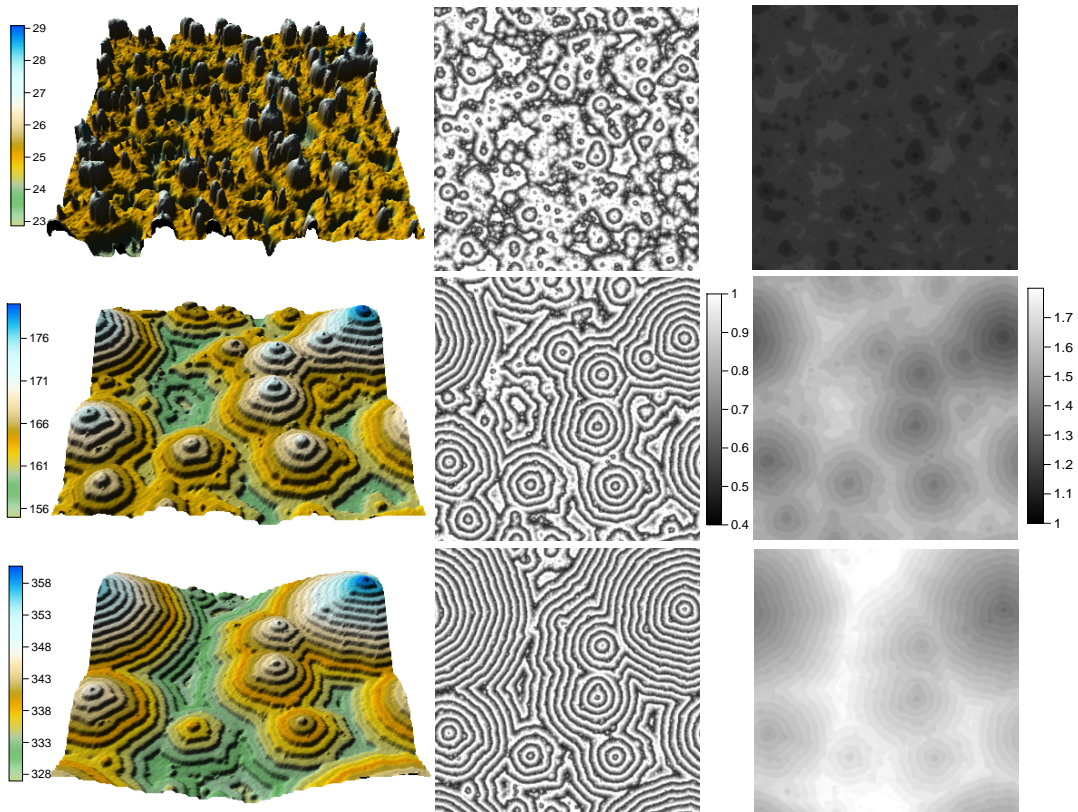


Рисунок 3— Еволюція фазового поля (перший стовпчик) та поля концентрації (другий стовпчик), та поля температури (третій стовпчик) при $t = 5, 30$, та 60 (перший, другий та третій рядки, відповідно). Інші параметри: $\varepsilon = 4$, $F = 4$, $\nu = 10$, $\chi = 10$, $\varpi = 2$, $\lambda = 10$, $\alpha = 0.01$, $\beta = 0.05$

Видно, що на початкових стадіях еволюції системи формуються малі острови адсорбату. Тут поле температури може локально змінюватись. Під час еволюції системи такі острови становляться центрами пірамідальних структур та відповідні піраміди з'єднуються одна з одною терасами еквівалентної висоти (див. першу і другу колонки на рис. ??). Аналізуючи поведінку поля температури необхідно зауважити, що з часом температура збільшується, поки не досягне рівня, що відповідає рівновазі між газовою і твердою фазами. Як видно із третього стовпця на рис. ?? температура набуває більш низьких значень на високих терасах пірамід в порівнянні з її значеннями на нижніх терасах. Фізична причина цього полягає в наступному: на більш високому рівні піраміди процеси реконструкції поверхні мають великі ефективності та адатоми починають організувати новий рівень піраміди. Цей процес описується витратами енергії, приводячи до локального зниження температури в безпосередній близькості в околі високого рівня піраміди або в безпосередній близькості від терас. На нижньому рівні піраміди температура приймає підвищені значення. Тут адсорбований атом збільшує локально температуру поверхні, але ця частина енергії не може бути ефективно перерозподілена у зв'язку з наявністю тераси великої площі та всі тераси дуже розділені. Таким чином, вся кінетична енергія від приєднаних адатомів залишається на найнижчому рівні піраміди. Під час еволюції системи і пірамідального росту адатоми з більш теплих областей (від найнижчий рівня піраміди) десорбуються з великою ймовірністю, у той час як адатоми на високому рівні, що мають більш низькі температури, десорбують з малою ймовірністю. Тому, якщо виникає будь-яка піраміда, то вона буде рости протягом еволюції системи і не може бути зруйнована, вона може бути захоплена іншими пірамідами з більш високим рівнем висоти, що описується полем ϕ .

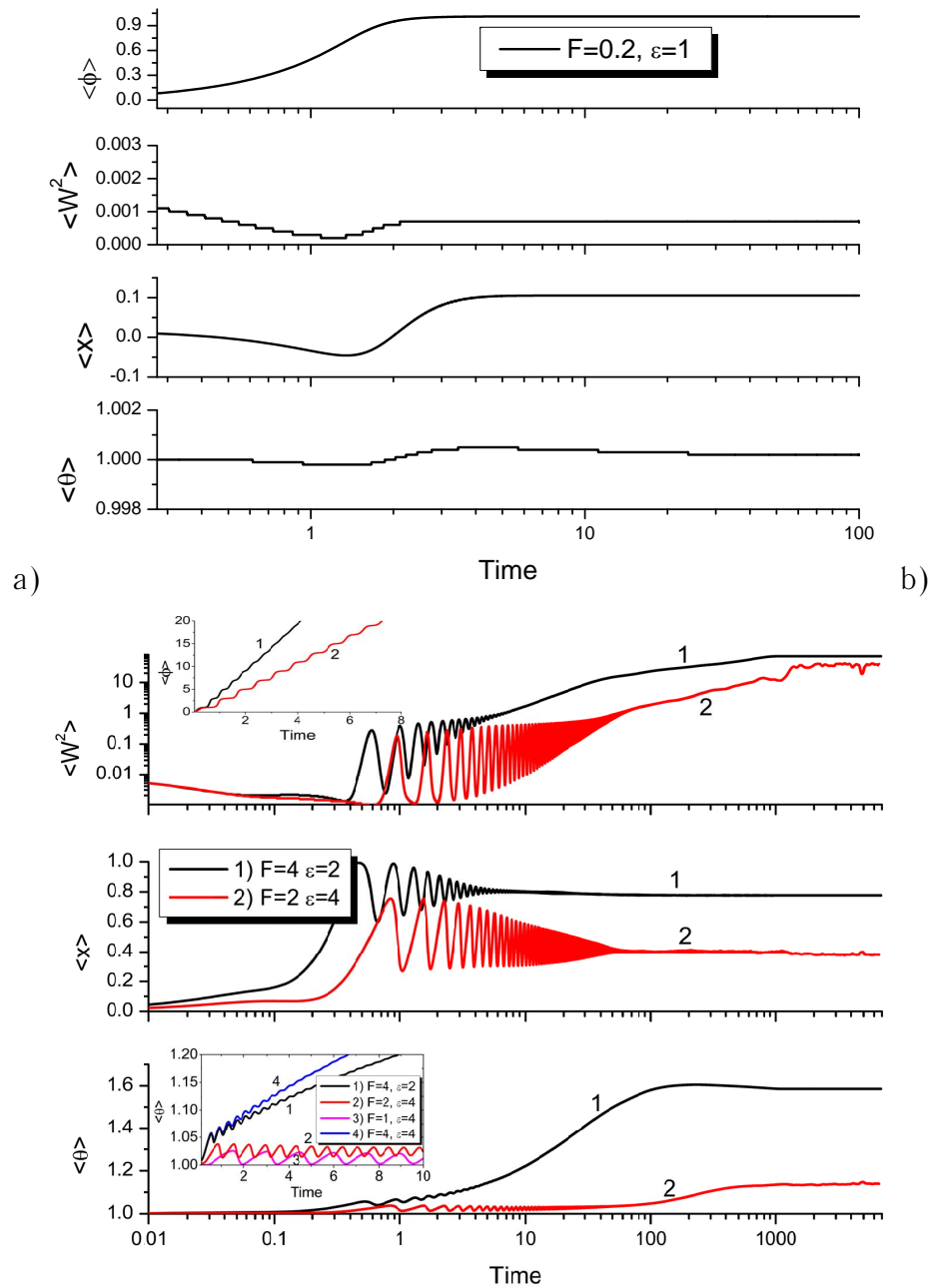


Рисунок 4— Еволюція усередненого фазового поля, ширини інтерфейсу, поля концентрації адатомів і температурного поля при різних значеннях ε та F : а) $F = 0.2, \varepsilon = 1$; б) 1 — $F = 4, \varepsilon = 2$ та 2 — $F = 2, \varepsilon = 4$. Інші параметри: $\nu = 10, \chi = 10, \varpi = 2, \lambda = 10, \alpha = 0.01, \beta = 0.05$

Розглянемо детально динаміку системи, досліджуючи поведінку середніх $\langle x \rangle, \langle \theta \rangle, \langle \phi \rangle$, та $W^2 = \langle (\phi - \langle \phi \rangle)^2 \rangle$. Ширина інтерфейсу $W(t)$ вимірює динаміку зростання острова. Типова залежність вказаних середніх показано на рис.4 при різних значеннях параметрів системи. У найпростішому випадку $F < F_c$ (рис.4а) величина $\langle \phi \rangle$ досягає стаціонарного стану на

ранніх стадіях і не змінюється у великих інтервалах часу. Таким чином, внаслідок $\partial_t \langle \phi \rangle = 0$ процеси росту не спостерігаються. Дійсно, ширина інтерфейсу набуває малого постійного значення, що означає, що процеси упорядкування у системі неможливі. На ранніх стадіях середня концентрація $\langle x \rangle$ набуває від'ємних значень, що означає випарювання матеріалу з підкладки. Дака десорбція відповідає зменшенню середньої температури $\langle \theta \rangle$. На великих часових інтервалах температура системи T набуває еквівалентних значень до температури газової фази T_0 і, як наслідок, $\langle \theta(t \rightarrow \infty) \rangle = 1$, тоді як $\langle x(t \rightarrow \infty) \rangle$ набуває малого постійного значення, що характеризує депозицію з газовою фазою. Цей результат добре передбачений лінійним аналізом на стійкість при $v_\phi = 0$, що було зроблено в попередньому розділі.

При $F > F_c$ маємо більш складну картину еволюції системи. Тут середнє $\langle \phi \rangle$ представляється сходинково-зростаючою функцією (вставка на рис.4b). Кожна сходинка відповідає за формування тераси, коли ϕ досягає одного з $2n + 1$ мінімумів густини гамільтоніану $h(\phi, x)$. Згідно з такою поведінкою $\langle \phi \rangle$ ширина інтерфейсу (верхня панель на рис.4b) поведе себе осциляційним чином, викликаючи реорганізацію адсорбату у процесі формування пірамід. Завдяки немонотонній поведінці $\langle \phi \rangle$ середня концентрація адсорбату також еволюціонує у осциляційний спосіб. Тут зменшення $\langle x \rangle$ пов'язано із десорбцією з одного боку та формуванням конденсату з іншого боку (останнє пов'язано з формуванням терас на островах). Осциляційний режим $\langle x \rangle$ приводить до осциляцій середньої температури конденсату. тут температура та концентрація проявляють однофазні осциляції (коливання), що означає, що температура зменшується в наслідок десорбції / випаровування, та збільшується при осадженні. Видно, що осциляції мають різну інтенсивність затухання, що залежить від па-

раметрів системи. Із вставки на нижній панелі рис.4b можна бачити, що період осциляції збільшується з ростом потоку осадження та слабо збільшується з ростом енергії взаємодії адсорбату.

Залежності частоти осциляції ω від потоку осадження F при різних значеннях енергії взаємодії адсорбату ε , показані на рис.5. Як бачимо, з ростом потоку осадження частота осциляцій збільшується, що означає формування великої кількості терас при підвищених F . Збільшення енергії взаємодії адсорбату приводить до зростання частоти осциляцій, тобто взаємодія адсорбату приводить до формування нових терас на пірамідах. Цікаво зазначити, що величина $\nu \equiv \tau_T/\tau_{0x}$ не має суттєвого впливу на залежність $\omega(F)$. Це можна пояснити сильною взаємодією числа адатомів та температури адсорбату.

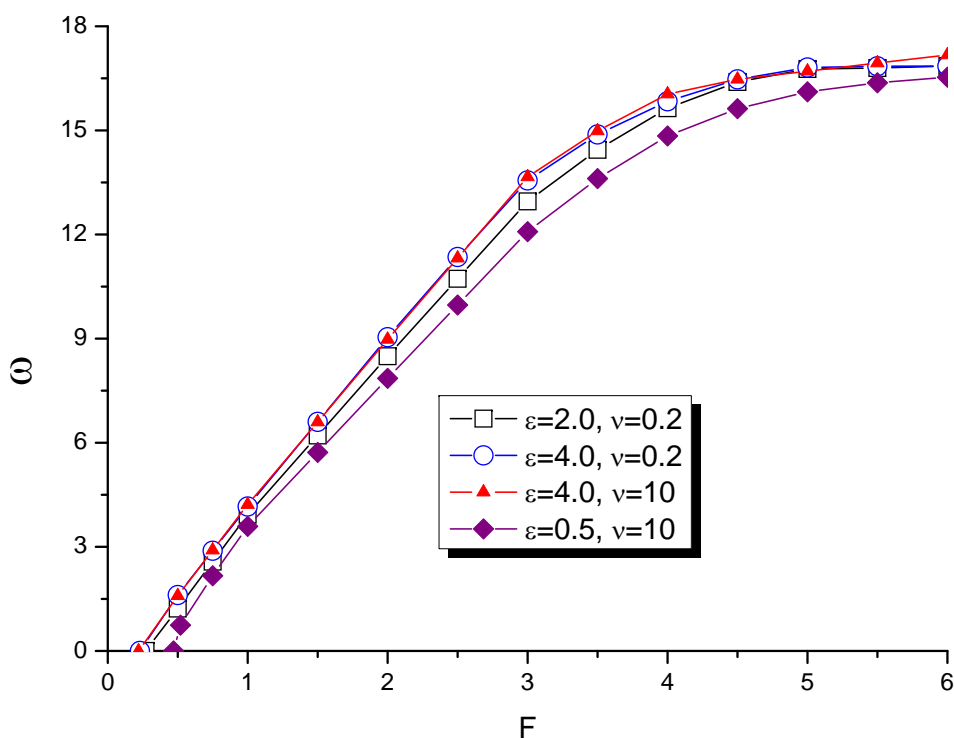


Рисунок 5— Залежність частоти осциляцій ω від потоку осадження F при різних значеннях енергії взаємодії ε та величини ν . Інші параметри: $\chi = 10$, $\varpi = 2$, $\lambda = 10$, $\alpha = 0.01$, $\beta = 0.05$

На часових інтервалах, коли осциляції згасли і процес зростання остро-

ві проходить у монотонний спосіб, можна оцінити скейлінгову поведінку величини $W(t)$. Відомо, що динаміка островів описується скейлінговим співвідношенням $W^2(t) \propto t^{2\tilde{\beta}}$, де показник росту $\tilde{\beta}$ може бути обчислений як кут нахилу у подвійних логарифмічних вісях. З наших розрахунків випливає, що при підвищених значеннях F та ε маємо прискорене зростання островів. На часових інтервалах, коли реалізуються справжній скейлінговий режим (коли процеси нуклеації починають відігравати визначну роль), показник росту приймає значення в околі 0.35 ± 0.1 при різних значеннях ε та F .

З проведеного чисельного аналізу еволюції усередненого фазового поля, можна розрахувати критичні значення енергії взаємодії адсорбату ε та потоку осадження F , що обмежують область, коли реалізується осциляторна динаміка структуроутворення та область, коли зростання поверхні є неможливим. Відповідні критичні значення параметрів системи лежать на кривій, позначеній квадратами на рис.1b. Чисельні результати загалом повторюють аналітичні. Різниця між критичними значеннями, отриманими з аналітичних розрахунків та з чисельних симуляцій пов'язана з використанням макроскопічної апроксимації, що дає лише якісний результат. Крім того, чисельний аналіз проводився для трикомпонентної моделі у той час, як аналітичні розрахунки було зроблено для двокомпонентної моделі.

5 Обговорення

Проведемо порівняльний аналіз процесів формування структур у двох випадках, що зводяться до стандартної моделі фазового поля [16] та запропонованої узагальненої моделі фазового поля для росту пірамідальних структур у процесах епітаксії. На рис.6 представлено розраховані функції густини ймовірності фазового поля, центрованого в околі середнього значення $\langle \phi \rangle$. В обох випадках початковий розподіл поля ϕ є Гаусовим, отже, при $t = 0$ маємо Гаусову форму функції густини ймовірності. В процесі еволюції з'являються додаткові піки, що означає формування терас (кількість піків відповідає кількості терас): найменший пік відповідає верхньому рівню висоти пірамідальної структури, у той час, як найбільший пік пов'язаний із найнижчим рівнем висоти структури.

Спочатку розглянемо поведінку функції густини ймовірності для стандартної моделі, коли температура є постійною (див. рис.6а). У цьому випадку протилежний потік адсорбату, що дається рівнянням Eq.(7) задається виразом $\mathbf{J}_o = \varepsilon x(1 - x)\nabla x$. Таким чином, варіація енергії взаємодії адсорбату ε може розумітися як ефективна варіація температури всієї системи. З іншого боку, за умови фіксованої температури, варіація ε означає варіацію енергії ε (залежності від типу матеріалу). З рис.6а видно, що при підвищених значеннях енергії взаємодії адсорбату ε в системі спостерігаються добре виражені пірамідальні структури островів, коли відмінність у висотах на найвищому та найнижчому рівнях терас $\Delta_\phi \equiv \phi_{max} - \phi_{min}$ є високою, $\Delta_\phi = 30$. Тут реалізується велика кількість терас, тоді як висота сходинки є малою та тераси характеризуються малою шириною. Така структура пірамід є результатом взаємодії адсорбату, що призводить до великого вкладу із потоку \mathbf{J}_o , що є протилежним до дифузійного потоку $-D\nabla x$. При малих ε (див. другий рядок на рис.6) на протязі еволюції си-

стеми, коли досягається велика концентрація адатомів, процеси випаровування та дифузії починають відігравати визначну роль, що призводить до руйнування терас. Так, при малх значеннях енергії взаємодії адатомів ϵ останні не мають змоги взаємодіяти, і як наслідок, формувати пірамідальні структури з добре вираженими терасами ($\Delta_\phi \simeq 6$); вони випаровуються та дифундують по терасах. У такому випадку піки функції гістини ймовірності пов'язані із різницею у висотах для Гаусової поверхні, але не з терасами.

Розглянемо функції густини ймовірності для узагальненої моделі епітаксійного росту при тих же значеннях потоку осадження F та ϵ (тут $\epsilon = \epsilon/\theta_0$, θ_0 є константою, що пов'язана із температурою бані), що представлено на рис.6b. При підвищених значеннях ϵ середня температур конденсату набуває значень, більших ніж температура теплової бані ($\langle\theta\rangle = 1.1$). Це означає, що потік осадження ефективно збільшується, що в свою чергу має призводити до розупорядкованої гаусової поверхні. Однак, вказана ситуація не реалізується. Дійсно, у такому разі маємо додатковий вклад до потоку \mathbf{J}_o , що пов'язаний із термодинамічною силою. Цей вклад визначає рух адсорбату до границі терас і як результат, призводить до формування пірамідальних структур при підвищених температурах. Тут різниця висот є підвищеною, $\Delta_\phi \simeq 12$; відповідна функція густини ймовірності характеризується невеликою кількістю добре виражених піків, що означає формування малої кількості добре виражених терас. Ці тераси характеризуються великою площею та великою різницею у висотах, порівняно із відповідним випадком у стандартній моделі фазового поля. При малих значеннях ϵ маємо $\langle\theta\rangle \simeq 1$. Тут вклади термодинамічної сили до потоку \mathbf{J}_o призводить до аналогічної ситуації, а саме, до формування пірамідальних структур (у випадку стандартної моделі фазового поля даний ефект не

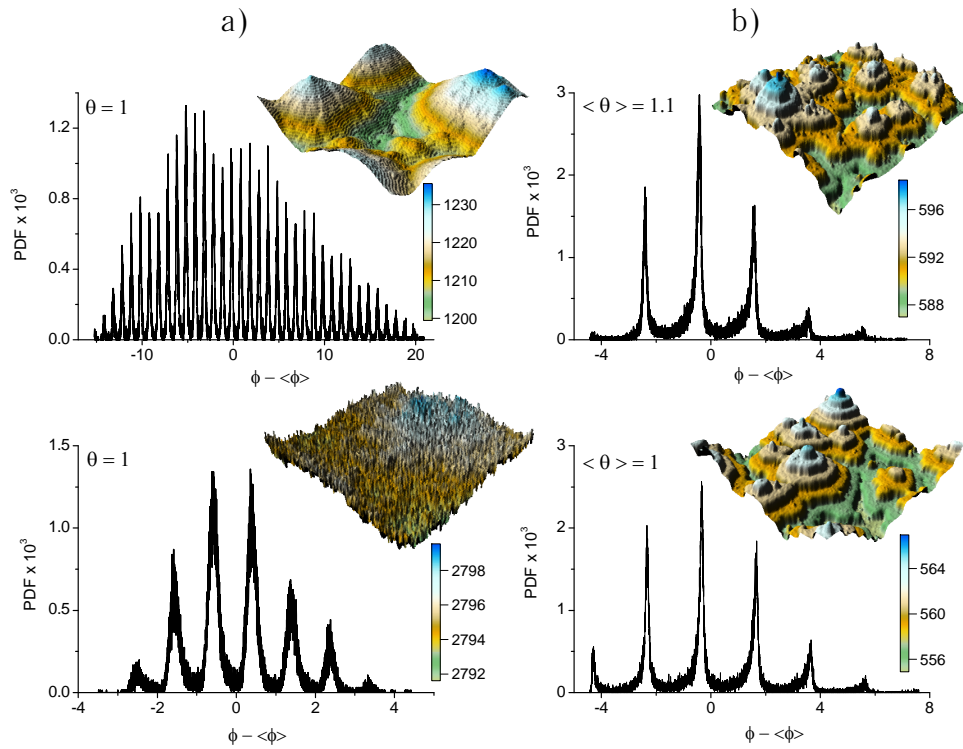


Рисунок 6— Функції густини ймовірності фазового поля, розрахованого від середнього значення $\langle \phi \rangle$ при $F = 2$ та різних значень енергій взаємодії адсорбату ε для двох типів моделей: а) стандартної двокomпонентної моделі при фіксованій температурі; б) узагальненої моделі при змінному полі температури (середнє значення температур показано на рисунках). Верхній рядок відповідає випадку $\varepsilon = 4$, нижній рядок відповідає випадку $\varepsilon = 2$

спостерігається), тут маємо $\Delta_\phi \simeq 10$. Таким чином, із отриманих результатів можна зробити висновок про те, що у випадку узагальненої моделі фазового поля механізм формування пірамідальних структур при низьких значеннях енергії взаємодії адсорбату пов'язаний з потоком осадження, що задається термодинамічною силою.

Поверхнєве впорядкування для двох типів моделей може бути описано за допомогою кореляційної функції $C_0(r) = \langle (\phi(r_0 + r) - \langle \phi \rangle)(\phi(r_0) - \langle \phi \rangle) \rangle$. Для поверхні, що ілюструє самоафінну поведінку на малих часових масштабах, можна використати апроксимацію:

$$C(r) = C_{max} \exp(-(r/\xi)^{2\tilde{\alpha}}),$$

де ξ це поперечна кореляційна довжина, що визначає середню довжину,

на якій висоти між двома точками на поверхні є скорельованими. Великі значення ξ означають, що дві точки на різних терасах є добре скорельованими, тобто різниця висот між ними є малою. У протилежному випадку, якщо відповідна середня різниця висот є великою, то ξ є малим, тобто тут дві точки на терасі є скорельованими. З іншого боку, ξ є мірою поперечних флуктуацій у шорсткості. Показник шорсткості $\tilde{\alpha}$, відомий як показник Херста, пов'язаний із локальною фрактальною розмірністю $D = 3 - \tilde{\alpha}$ [41–43]. Величина C_{max} характеризує вертикальну шорсткість поверхні. Для розрахунку величини ξ , знаходилась точка $r/L = \xi$ що задовольняє умові $C(r/L = \xi) = C_{max}/e$. Відповідна залежність кореляційних функцій при фіксованих значеннях потоку осадження, подані на рис.7.

Спочатку розглянемо поведінку кореляційної функції для стандартної двокомпонентної моделі. При великих значеннях енергії взаємодії адсорбату ε реалізуються пірамідальні структури з великим значенням C_{max} та кореляційною довжиною $\xi = 0.242$. У цьому випадку показник шорсткості набуває значення $\tilde{\alpha} \simeq 1$, що означає формування добре організованої структури, яка характеризується фрактальною розмірністю $D \simeq 2$. При малих значеннях ε кореляційна довжина прямує до 0 (вона набуває значень на декілька порядків менших, ніж у попередньому випадку) та кореляційна функція може бути наближено розглянута як дельта-функція Дірака із $\xi = 0.008$. У такому випадку її апроксимація у формі розтягнутої експоненти дає $\tilde{\alpha} \simeq 0.12$, що означає формування зашумленої (зазубреної) поверхні.

В узагальненому випадку трикомпонентної моделі кореляційна функція суттєво не відрізняється при $\varepsilon = 2$ та $\varepsilon = 4$. Тут кореляційна довжина набуває менших значень при підвищених ε , ніж у випадку малої ін-

тенсивності взаємодії адсорбату. крім того, показник шорсткості набуває більших значень при $\varepsilon = 2$ у порівнянні з випадком, коли $\varepsilon = 4$. Іншими словами, поверхневі структури при малих ε характеризуються фрактальною розмірністю $D \simeq 2$, тоді як при підвищених ε , маємо $D \leq 2$. Даний ефект може бути пояснено лише впливом термодинамічної сили, що задається потоком адсорбату на границі тераси.

Дійсно, в рамках стандартної моделі, температура є фіксованою, $\theta = 1$, тоді як у загальному підході температура може змінюватися із впливом як потокоосадження F так і енергії взаємодії адсорбату ε . При підвищених ε середня температура набуває значень $\langle \theta \rangle > 1$, що призводить до збільшення потокоосадження, і як результат, до зубчастої поверхні. У випадку малих ε середнє значення температури $\langle \theta \rangle \simeq 1$ і процеси десорбції характеризуються малою ефективністю у порівнянні з потоком адсорбату на границю тераси, пов'язаним з термодинамічною силою. Таким чином, тут така сила відіграє конструктивну роль у процесах формування структур.

Із стандартного термодинамічного підходу можна оцінити критичний радіус для утворення островів [44]. Дійсно, використовуючи вираз для вільної енергії для острову розміром R маємо $\Delta F = 2\pi\gamma R - \pi\Delta\mu R^2$, де $\Delta\mu \equiv (c - c_{eq}^0)/Tc_{eq}$ визначає різницю у хімічних потенціалах та відповідає за пересичення. Густина адатомів може бути оцінена у наступний спосіб: $x \simeq F\tau_{0x}$. У такому разі бар'єр нуклеації $\Delta F(R_c) = \pi\gamma^2/\Delta\mu$. Отже, при $\Delta F(R_c) < T$ тераси легко можуть формуватися. Оскільки $\Delta\mu \propto x$ маємо, що при низькому значенні пересичення, або при $F < F_c$ на протязі еволюції системи формування островів із терасами є неможливим. У протилежному випадку, коли пересичення велике, формуються острови із пірамідальною структурою. В останньому випадку можна оцінити величину середнього розміру острову. For the last case one can estimate values

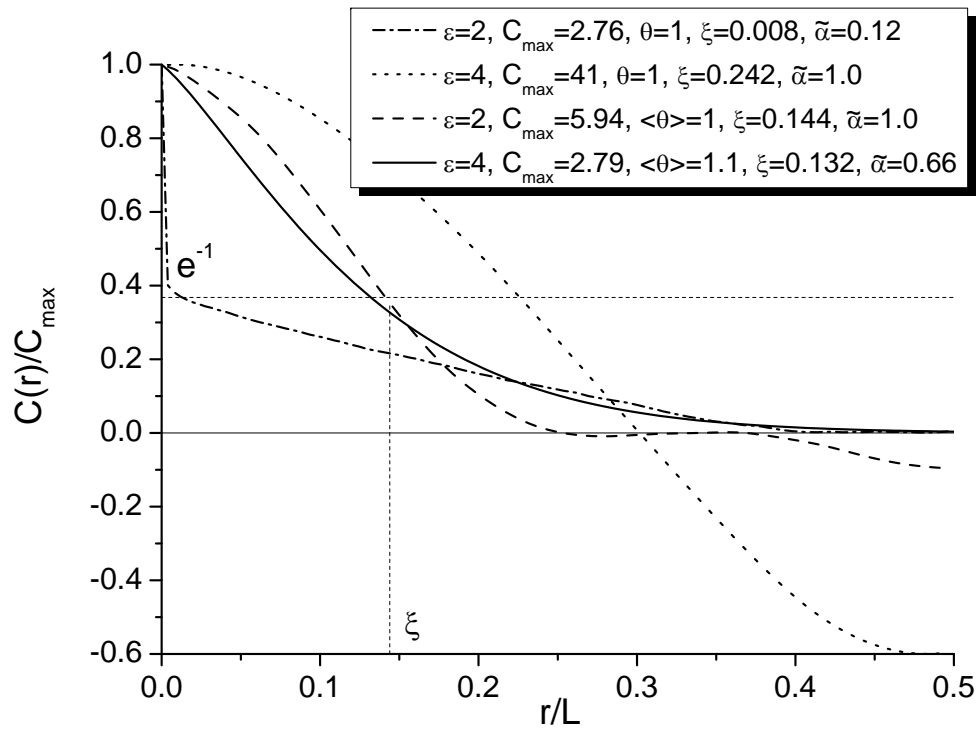


Рисунок 7— Кореляційна функція для двох типів моделей при $F = 2$ та різних значеннях енергії взаємодії адсорбату ε

for the averaged size of islands. Оцінка для дифузійного коефіцієнту дає $D \simeq 2.7 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{sec}$ та для масштабу випаровування в залежності від параметрів матеріалу маємо $\tau_{0x} \sim (10^{-3} \div 10^{-2}) \text{ sec}$. Отже, фізичний час осадження складає приблизно від 1 до 10 хвилин. Процес росту островів спостерігається на інтервалах $(10^1 \div 10^2)$ секунди. Дифузійна довжина набуває значень в околі $\ell \sim 1.6 \cdot 10^{-6}$ м, що дозволяє оцінити повний розмір системи, $L \simeq 10^{-4}$ м. Таким чином, для середнього розміру острову, що визначається на середній висоті піраміди, маємо $\langle R \rangle \simeq \xi \simeq (10^{-6} \div 10^{-5})$ м.

6 Висновки

Нами запропонована узагальнена модель фазового поля, що враховує динаміку поля температури. Останнє задає той факт, що температура конденсату може локально змінюватись при проходженні процесів адсорбції/ десорбції.

В рамках досліджуваної моделі було показано, що на ранніх стадіях еволюції системи внаслідок конкуренції процесів адсорбції та десорбції на ранніх стадіях еволюції системи спостерігається осциляторний режим формування островів. Нами досліджено вказану осциляторну динаміку з використанням підходу середнього поля та проведено порівняльну характеристику отриманих аналітично результатів із комп'ютерними симуляціями. Показано, що частота температурних осциляцій суттєво залежить від потоку осадження, тоді як інтенсивність взаємодії адсорбату не приводить до суттєвих змін у значеннях частоти осциляції. Отримано динамічну фазову діаграму, що дозволяє представити два різні режими еволюції системи, а саме: при малих значеннях потоку осадження та малих значеннях інтенсивності взаємодії адсорбату поверхня зростає без формування пірамідальних островів; при великих значеннях інтенсивності взаємодії адсорбату на поверхні формуються пірамідальні структури. Останній режим може бути описаний моделлю Вольмера - Вебера або моделлю Штанскі - Крастановадля для росту островів.

Порівнюючи результати, отримані в запропонованій узагальненій моделі із результатами для стандартної моделі фазового поля встановлено, що у першому випадку пірамідальні структури можуть формуватись за умови низьких значень інтенсивності взаємодії адсорбату внаслідок вкладу термодинамічної сили до потоку адсорбату, що є протилежним до дифузійного потоку. Розглядаючи скейлінгову поведінку кореляційної фун-

кції, показано, що пірамідальні структури, що реалізуються в узагальненій моделі фазового поля, характеризуються великою різницею у висотах між двома найближчими терасами та малими відхиленнями у показниках шорсткості, порівняно із стандартною двокомпонентною моделлю.

Запропоноване узагальнення стандартної моделі фазового поля для опису процесів формування пірамідальних структур на поверхні матеріалу при епітаксіальному рості може бути використана для опису систем (наприклад, напівпровідників), для яких локальна зміна температури конденсату може відігравати визначну роль у процесах формування поверхневих структур.

Основні результати опубліковано в роботі Kharchenko D.O., Kharchenko V.O., Zhylenko T.I., Dvornichenko A.V. / A study of pyramidal islands formation in epitaxy within the generalized phase-field model / Eur.Phys.J.B.(2013) **86**: 175.

Перелік посилань

1. A.-L.Barabasi, H.E.Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995)
2. A.Pimpinelli, J.Villain, *Physics of Crystal Growth* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998)
3. J. Krug, *Physica A*, **318**, 47 (2002)
4. C. Ratsch, P. Puggerone, M. Scheffler, in *Surface Diffusion: Atomistic and Collective Processes*, ed. by M.C. Tringides (plenum, New York, 1997)
5. H. Metiu, Y.-T. Lu, Z.Y. Zhang, *Science* **255**, 1088 (1992).
6. C. Ratsch, M.F. Gyure, R.E. Caflisch, et al. *Phys.Rev.B*, **65**, 195403 (2002)
7. S. Park, H. Jeong, B. Kahng, *Phys.Rev.E*, **59**, 6184 (1999)
8. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, I. O. Lysenko and S. V. Kokhan, *Phys.Rev.E*, **82** 061108 (2010)
9. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, *Cond. Mat. Phys.*, **14**, N2, 23602 (2011).
10. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, *PAST*, **97**, N2, 16 (2011)
11. W. K. Burton, N. Cabrera and F. C. Frank, *Philos.Trans.R.Soc. London A* **243** 299 (1951)
12. A. M. Mullis *Phys.Rev.E* **68**, 011602 (2003)
13. A. E. Lobkovsky, J.A. Warren, *Phys.Rev.E*, **63**, 051605 (2001)

14. M. Conti, B. Meerson, A. Pleg, and P.V. Sasorov, *Phys.Rev.E* **65**, 046117 (2002)
15. M. Castro *Phys.Rev.B* **67**, 035412 (2003).
16. F. Liu and H. Metiu, *Phys.Rev.E.* **49** 2601 (1994)
17. A. Karma and M. Plapp, *Phys.Rev.Lett.* **81** 4444 (1998)
18. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, I. O. Lysenko, *Physica Scripta*, **83** 045802 (2011)
19. D.O. Kharchenko, S.V. Kokhan, A.V. Dvornichenko, *Physica D*, **238**, 2251 (2009)
20. V.O. Kharchenko, *Physica A*, **388**, 268 (2009)
21. D.O. Kharchenko, S.V. Kokhan, A.V. Dvornichenko, *Metallofiz.Noveishie Tekhnol.*, **31**, 23 (2009)
22. D.O. Kharchenko, A.V. Dvornichenko, V.O. Kharchenko, *Jour.Phys.Stud.*, **13**, N4, 4005 (2009)
23. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, *Phys.Rev.E*, **86**, 041143 (2012)
24. A.J. SpringThorpe, A. Majeed. *J.Vac.Sci.Technol.B*, **8**, 266, (1990)
25. A.I. Olemskoi, O.V. Yuschenko, T.I. Zhilenko, N.V. Prodanov, *Metallofiz.Noveishie Tekhnol.*, **32**, N 11, 1555 (2010)
26. D. Batogkh, M. Hildebrant, F. Krischer, A. Mikhailov, *Phys.Rep.*, **288**, 435 (1997)
27. S. E. Mangioni and H. S. Wio, *Phys.Rev.E.* **71** 056203 (2005)
28. S. E. Mangioni, *Physica A* **389** 1799 (2010)

29. H. Emmerich, *Continuum Mech. Thermodyn.* **15** 197 (2003)
30. G. Fix *Free Boundary Problems*, ed. by A. Fasano and M. Primicario (London: Pittman) (1983)
31. J.B. Collins and H. Levine, *Pys. Rev. B* **31** 6119 (1985)
32. J.S. Langer *Directions in Condensed Matter Physics*, ed. by G. Grinstein and G. Mazenko (Singapore: World Scientific, 1986)
33. L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Statistical Physics, Part 1* Vol.5 (3rd ed.). (Butterworth—Heinemann, 1980).
34. D.D. Joseph, L. Preziosi, *Rev. Mod. Phys.*, **61**, No1, 41 (1989)
35. P. Galenko, *Phys. Lett. A*, **287**, 190, (2001)
36. P.K. Galenko, D. Kharchenko, I. Lysenko, *Physica A*, **389**, 3443, (2010)
37. D. Kharchenko, V. Kharchenko, I. Lysenko, *Cent. Eur. J. Phys.*, **9**, 698, (2011)
38. V.O. Kharchenko, D.O. Kharchenko, S.V. Kokhan, et al., *Physica Scripta*, **86**, 055401, (2012).
39. W. Horsthemke, R. Lefever, *Noise induced Transitions*, (Springer—Verlag, 1984)
40. F.Kh. Mirzoev, V.Ya. Panchenko, L.A. Shelepin, *Physics—Uspekhi*, **39** 1, (1996)
41. B.B. Mandelbrodt, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, New York, 1982)
42. Christian Teichert, *Physics Reports*, **365** (2002) 335

43. P. Meakin, *Fractals, Scaling and Growth Far from Equilibrium*
(Cambridge University Press, Cambridge, 1998)
44. L.P. Pitaevskii, E.M. Lifshitz, *Physical Kinetics*, Vol. 10 (1st ed.)
(Pergamon Press, 1981).