

УДК 532.62:621.891

УКПП

№ держреєстрації 0117U003927

Інв. №

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Сумський державний університет (СумДУ)

40007, м. Суми, вул. Р.-Корсакова, 2: тел. (0542) 33-41-08, факс (0542) 33-40-49

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з наукової роботи

д-р фіз.-мат. наук, проф.

_____ А.М. Чорноус

ЗВІТ

ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ

**Дослідження процесів формування багат шарових анізотропних
нано-розмірних структур адсорбату при конденсації та
епітаксіальному рості**

**МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ РОСТУ АНІЗОТРОПНИХ
СТРУКТУР АДСОРБАТУ З УРАХУВАННЯМ АНІЗОТРОПІЇ
ПОВЕРХНЕВОГО ПОТОКУ АДАТОМІВ ТА ЙОГО
ФЛУКТУАЦІЙ В СИСТЕМІ ГАЗ-КОНДЕНСАТ
(проміжний)**

Керівний НДР

канд. фіз.-мат. наук

А.В.Дворниченко

2019

Рукопис закінчено 24 грудня 2019 р.

Результати цієї роботи розглянуто на засіданні наукової ради СумДУ, протокол
від 26.11.2019 № 4

СПИСОК АВТОРІВ

Керівник НДР канд. фіз.-мат наук (24.12.2019)	А.В. Дворниченко (реферат, вступ, розд.1, висновки)
Відповідальний виконавець доктор фіз.-мат. наук, пров.н.с. (24.12.2019)	В.О. Харченко (реферат, вступ, розд.1, висновки)
Виконавці:	
Ст. наук. співр. канд. фіз.-мат. наук (24.12.2019)	І.О. Лисенко (розд.1)
Ст. наук. співр. канд. фіз.-мат. наук (24.12.2019)	О.М. Щокотова (розд.1)
Ст. викладач канд. фіз.-мат. наук (24.12.2019)	А.М. Заскока (розд.1)
Ст. викладач канд. фіз.-мат. наук (24.12.2019)	Т.І. Жиленко (розд.1)
Ст. викладач канд. фіз.-мат. наук (24.12.2018)	В.М. Борисюк (розд.1)
Асистент мол. наук. співр. (24.12.2019)	Ю.Ю. Волк (розд.1)
Асистент канд. фіз.-мат. наук (24.12.2019)	Н.М. Манько (розд.1)
Асистент канд. фіз.-мат. наук (24.12.2019)	А.Ю. Бадалян (розд.1)
Студент лаборант (24.12.2019)	М.О. Яценко (розд.1)
Студент лаборант (24.12.2018)	М.Д. Харченко (розд.1)
Студент лаборант (24.12.2019)	Я.О. Чернишова (розд.1)
Студент лаборант (24.12.2019)	Я.А. Голоденко (розд.1)

РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 67 с., 27 рис., 58 джерел.

КОНДЕНСАЦІЯ, АДСОРБАТ, САМООРГАНІЗАЦІЯ, ПОВЕРХНЕВІ СТРУКТУРИ, ФЛУКТУАЦІЇ, АНІЗОТРОПНА ДИФУЗІЯ.

Об'єкт дослідження — процеси формування та росту поверхневих структур адсорбату при конденсації з урахуванням флуктуацій та анізотропії поверхневої дифузії.

Метою роботи є дослідження впливу флуктуацій напруженості електричного поля біля підкладки, що приводить до анізотропії вертикальної дифузії адсорбату на динаміку процесів структурування тонкої плівки при конденсації, морфологію зростаючої поверхні та статистичні властивості поверхневих структур задля виявлення додаткових механізмів контролювання процесами формування поверхневих структур адсорбату заданої форми та розміру. До мети також відноситься дослідження динаміки формування та росту поверхневих структур адсорбату при конденсації на розупорядковану підкладку, що представляє високоентропійний сплав з п'яти компонентів рівної концентрації, виявлення впливу ступеня розупорядкованості підкладки на морфологію поверхневих структур та їх статистичні характеристики; а також виявлення умов формування перколюючих кластерів адсорбату, що з'єднують протилежні краї підкладки, при підведенні до підкладки електричного поля у напрямку вздовж підкладки з виявленням можливості контролювати формою поверхневих структур адсорбату та їх розміром за рахунок напруженості цього поля.

Методи дослідження — в роботі використовувались метод лінійного аналізу на стійкість стаціонарних однорідних станів до неоднорідних збурень, метод числового інтегрування стохастичних диференціальних рівнянь, та методи статистичного аналізу та методи обчислення фрактальних розмірностей.

ЗМІСТ

ВСТУП	5
1 МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ РОСТУ АНІЗОТРОПНИХ СТРУКТУР АДСОРБАТУ З УРАХУВАННЯМ АНІЗОТРОПІЇ ПОВЕРХНЕВОГО ПОТОКУ АДАОМІВ ТА ЙОГО ФЛУКТУАЦІЙ В СИСТЕМІ ГАЗ-КОНДЕНСАТ	9
1.1 Математична модель	9
1.2 Встановлення умов реалізації стійких просторових структур при конденсації	15
1.3 Індуковані шумом ефекти самоорганізації адсорбату при конденсації	19
1.4 Статистичні властивості зростаючого шару адсорбату на підкладці з багато-компонентного сплаву	36
1.5 Формування перколюючих кластерів адсорбату в системі з анізотропною дифузією, викликаною ефектами електроміграції	51
1.6 Багатшарове подання результатів одношарового наближення	58
ВИСНОВКИ	61
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ	64

ВСТУП

Процеси конденсації осаджуваної речовини можуть бути описані за рахунок використання систем реакційно-дифузійного типу, де основні вклади, що визначають просторово-часову динаміку системи, зазвичай пов'язані як з локальною динамікою (квазіхімічними реакціями), так і з масопереносом. Такі нерівноважні системи проявляють процеси самоорганізації з формуванням різних просторово-часових структур. Ці структури виникають у результаті взаємодії нелінійної кінетики реакцій, дифузії рухомих частинок (адатомів на поверхні підкладки) та їх взаємодії. Такі ефекти набувають підвищеної уваги в різних областях, включаючи фізику, хімію та біологію [1].

Самоорганізація адсорбованих частинок (адатомів) в абсорбційних бістабільних системах приводить до утворення стабільних відокремлених островів адсорбату на підкладці або утворення розділених отворів усередині матриці адсорбату [2–4]. Нелінійні системи зазвичай проявляють невпорядковану поведінку за відсутності флуктуацій. Вплив флуктуацій різної природи на динаміку та статистичні властивості просторово-розподілених систем є предметом підвищеної уваги теоретичних досліджень протягом останніх десятиліть [5–11]. Було показано, що шум може спричинити упорядкування та індукувати реалізацію нових динамічних станів [12, 13]. В останні десятиліття багато досліджень були зосереджені на вивченні індукованих флуктуаціями явищ, які демонструють здатність флуктуацій приводити до ефектів самоорганізації. Велика частина ранніх робіт була присвячена дослідженню ефектів флуктуацій у нульвимірних системах. Останнім часом стало широко досліджуватися вплив флуктуацій на системи з великим числом ступенів свободи, так звані просторово-розподілені системи. Найбільш цікавими ефектами у таких системах є індуковані шумом процеси формування просторових структур та фазові переходи [14, 15]. Фазовий перехід з формуванням упорядкованого стану (фази у термодинамічному сенсі) реалізується, коли до динамічної системи вводиться випадкове флуктуююче джерело [16–19]. З фундаментальної точки зору такі ефекти мають динамічне походження: у короткочасній межі флуктуації дестабілізують невпорядкований

однорідний стан. Шум відіграє організуючу роль, якщо його амплітуда залежить від змінної поля [12, 13]. Крім того, упорядкована фаза може існувати для певного діапазону значень інтенсивності шуму. Ці ефекти відомі як реверсивні фазові переходи, коли збільшення інтенсивності шуму приводить до формування впорядкованого стану у фіксованому діапазоні зміни інтенсивності шуму. Така реверсивність є результатом спільної дії нелінійності системи та просторової взаємодії.

Більшість теоретичних досліджень формування та структур та їх самоорганізації при осадженні пов'язано з ізотропними системами (див., наприклад, посилання. [20–22]). Тут передбачається, що коефіцієнт дифузії адатомів однаковий у будь-якій точці досліджуваної підкладки, яка являє собою чистий матеріал з приблизно нульовою шорсткістю. Такі моделі характеризуються поступальною та обертальною симетрією і можуть бути використані при вивченні рідинних систем або розчинів. У реальних системах газ/плазма-конденсат підкладка завжди характеризується дефектами, такими як вакансії, дислокації та інші. Наявність дефектної структури на поверхні підкладки призводить до неоднорідності системи. У результаті коефіцієнт дифузії адатомів на підкладці стає залежним від просторового положення та/або локальної концентрації адсорбату. Типовим прикладом анізотропної реакційно-дифузійної системи є система плазма-конденсат, в якій електричне поле поблизу підкладки індукує анізотропний рух адатомів між сусідніми шарами [23, 24]. Сила електричного поля впливає на динаміку формування поверхневих структур та морфологію зростаючої поверхні [25, 26]. Високоентропійні сплави, які використовуються в якості підкладки для осадження, є анізотропним для поверхневої дифузії адатомів. Такі сплави утворюються шляхом змішування рівних або відносно великих пропорцій (зазвичай п'яти) елементів. У таких системах коефіцієнт дифузії адатому залежить не тільки від концентрації адсорбату, але й від просторового розподілу легуючих елементів підкладки. Така поверхнева анізотропія може індукувати нові динамічні стани та поверхневі структури. Анізотропні реакційно-дифузійні системи привертають підвищену увагу як при теоретичних, так й експериментальних дослідженнях у різних системах [27–38].

Відомо, що внаслідок дії зовнішнього поля на поверхні підкладки реалізуються процеси електроміграції — викликаного електричним полем перенесення речовини. Це явище носить досить загальний характер і зустрічається в твердих тілах, рідинах і газах, незалежно від того, чи проводять вони електричний струм. Електроміграція являє собою важливу технологічну проблему, особливо в областях надійності мікроелектронних схем, очищення твердих і рідких речовин, конструкції ниток розжарювання лампочок та поділу рідких і біологічних систем. Вона допомогла забезпечити фундаментальне розуміння взаємодії електричних полів з атомами. Переважна більшість досліджень з електроміграції почалась з 1960-х років, та була мотивована стурбованістю з приводу надійності електронних пристроїв. Атоми в твердому тілі рухаються за рахунок дифузійних процесів. У більшості металів дифузійні стрибки атомів відбуваються за вакансійним механізмом, коли атом та сусідня вакансія обмінюються положеннями в ґратці. Взаємодія електронів і локального електричного поля з атомом часто ділиться на дві складові. Одна складова це так звана пряма сила, електростатична сила, обумовлена дією зовнішнього поля на іони, що становлять тверде тіло. Зазвичай вважається, що ця сила мала в металах через ефективне електронне екранування. Інша складова, яка, як очікується, буде домінувати в металах, це сила електронного вітру, що виникає при передачі імпульсу електронами провідності, що розсіюються на іонах в твердому тілі і штовхають іони в напрямку електронного потоку. При наявності рушійної сили процес дифузії в матеріалі стає анізотропним та направленим у напрямку цієї сили. Останнє приводить до чистого потоку атомів в цьому напрямку.

У даному дослідженні нами вивчено вплив флуктуацій напруженості підведеного до підкладки електричного поля на динаміку упорядкування адсорбату на поверхні та статистичні властивості поверхневих структур при конденсації, та виявлено вплив анізотропії поверхневої дифузії адатомів на підкладці, що являє собою високоентропійний сплав, на просторовий розподіл адсорбату на першому шарі системи газ-конденсат. Для цього проведено комплексне дослідження флуктуаційних ефектів у стохастичній моделі реакційно-дифузійного типу, що описує зростання наноструктурованих тонких плівок при

конденсації в системах плазма-конденсат. Шляхом урахування зовнішнього потоку адсорбату між сусідніми моноатомними шарами, обумовленого наявністю електричного поля поблизу підкладки, у розгляд уводяться флуктуації напруженості такого поля. Досліджується конкуруючий вплив регулярної та стохастичної частин зовнішнього потоку на динаміку системи. Показано, що уведені флуктуації здатні індукувати процеси формуванням поверхневих структур, керувати динамікою структуроутворення, просторовим порядком, морфологією поверхні, законом росту середнього розміру островів адсорбату, типом та лінійним розміром поверхневих структур. Детально проаналізовано вплив інтенсивності флуктуації на статистичні властивості наноструктурованої поверхні.

Проведено дослідження анізотропної модель газ-конденсат розглядаючи процеси формування та росту структур адсорбату при конденсації адатомів на розупорядковану підкладку, що представляє модель багато-компонентного (високо-ентропійного) сплаву. Коефіцієнт поверхневої дифузії адсорбату моделюється замороженим просторовим безладом. Враховуючи наявність другого шару та відповідні переходи адатомів між двома шарами, показано, що за умови підвищених значень тиску всередині камери просторовий безлад підкладки індукує процеси структуроутворення на поверхні. Вивчено вплив розупорядкованості підкладки на динаміку росту наноструктурованої плівки, тип поверхневих структур та статистичні властивості зростаючого моношару.

Розглянуто анізотропну модель газ-конденсат з анізотропною направленою поверхневою дифузією, викликаною ефектами електроміграції, за рахунок підведеного до підкладки зовнішнього електричного поля з напрямком вздовж підкладки. Проаналізовано можливість контролювання морфологією поверхні, типом та розміром структур адсорбату за рахунок коефіцієнту індукованої підведеним електричним полем направленої поверхневої дифузії адсорбату, що зводиться до напруженості цього поля. Встановлено умови реалізації перколюючих кластерів адсорбату, що з'єднують протилежні краї підкладки.

1 МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ РОСТУ АНІЗОТРОПНИХ СТРУКТУР АДСОРБАТУ З УРАХУВАННЯМ АНІЗОТРОПІЇ ПОВЕРХНЕВОГО ПОТОКУ АДАТОМІВ ТА ЙОГО ФЛУКТУАЦІЙ В СИСТЕМІ ГАЗ-КОНДЕНСАТ

1.1 Математична модель

У процесах осадження адатомів при конденсації з газової фази або плазми еволюція локального покриття адсорбату на підкладці обумовлена наступними основними процесами: адсорбцією, десорбцією, ізотропним перенесенням адатомів між сусідніми шарами (для багат шарового осадження), поверхневою дифузією адатомів на будь-якому шарі адсорбату, взаємодіє адатомів між собою і можливим анізотропним рухом, індукованим зовнішніми полями. Конкуренція цих механізмів приводить до просторово-часової зміни локальної концентрації адсорбату на кожному шарі багат шарової системи і формування поверхневих структур адсорбату на зростаючій тонкій плівці. Схематичне представлення основних механізмів, що описують процеси осадження адсорбату на підкладку та просторовий перерозподіл адатомів, представлено на рис.1.1. Для аналітичного опису еволюції концентрації адсорбату у багат шаровій системі газ/плазма-конденсат будемо використовувати мезоскопічний підхід, досліджуючи еволюцію поля покриття $x_n(\mathbf{r}, t)$ на будь-якому n -му шарі; \mathbf{r} — просторова координата та t — час осадження; $n = 1 \dots N$, де N — загальне число шарів. Локальне покриття адсорбатом підкладки (та кожного n -того шару) визначається як відношення між кількістю адатомів та кількістю можливих вільних положень в елементарній комірці на n -му шарі, що дає $x_n \in [0, 1]$; $x_0 = 1$ відповідає підкладці. Такий підхід дозволяє побудувати модель реакційно-дифузійного типу, що описує еволюцію концентрації адсорбату на кожному n -тому шарі у стандартному вигляді:

$$\partial_t x_n(\mathbf{r}, t) = f_n - \nabla \cdot \mathbf{J}_n, \quad (1.1)$$

де перша складова у правій частині, f_n , відповідає за квазі-хімічні реакції на n -ому шарі, що включають адсорбцію, десорбцію та переходи адатомів між

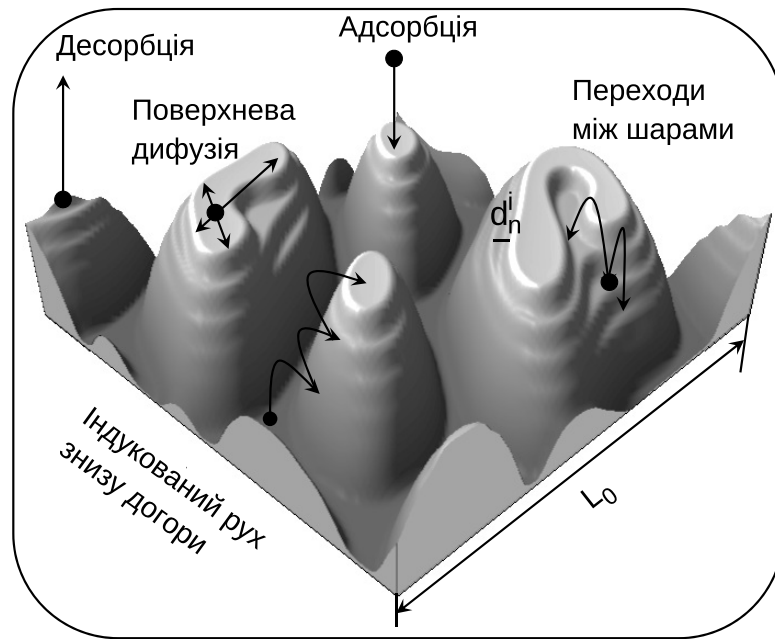


Рисунок 1.1 — Схематичне представлення основних механізмів, що протікають в системі газ/плазма-конденсат при осадженні.

сусідніми шарами; другий доданок \mathbf{J}_n визначає поверхневий потік адатомів вздовж шару.

У процесі осадження атом (або іон) з газової фази (або плазми) може потрапити на зростаючу поверхню та стати адатомом зі швидкістю k_a . Швидкість адсорбції k_a визначається наступним чином $k_a = \varpi p \exp(-E_a/T)$, де p — тиск всередині камери, E_a — енергія активації адсорбції, T — температура, виміряна тут в енергетичних одиницях, а ϖ задає частотний фактор. Адсорбція можлива при наявності вільних місць на поточному n -му шарі для адсорбції; вимагає наявності зайнятих адсорбатом місць на попередньому $(n - 1)$ -ому шарі, що служить підкладкою (субстратом) для адсорбції на n -тий шар, та вільні місця на наступному $(n + 1)$ -ому шарі. Отже, процеси адсорбції описуються вкладом $k_a x_{n-1}(1 - x_n)(1 - x_{n+1})$. Адсорбовані атоми (адатоми) можуть десорбуватися з даного n -го шару назад до газової фази (плазми) зі швидкістю k_d , яка включає швидкість десорбції для невзаємодіючих частинок $k_d^0 = \varpi \exp(-E_d/T)$, де E_d — енергія активації десорбції, та внесок, викликаний сильною локальною взаємодією $\exp(-U_n/T)$, яка визначається потенціалом взаємодії $U_n(\mathbf{r})$. Швидкість десорбції k_d^0 пов'язана з часом життя адатомів τ_d наступним чином: $\tau_d = [k_d^0]^{-1}$. Для багат шарової системи процеси десорбції вимагають наявності зайнятих

адсорбатом місць на попередньому $(n - 1)$ -му шарі та вільних місць на наступному $(n + 1)$ -му шарі і описуються вкладом $-k_d x_n x_{n-1} (1 - x_{n+1})$. При багатошаровій конденсації модель має бути узагальнена врахуванням складової, пов'язаної з переміщенням (рухом) адатомів між сусідніми шарами. Такі процеси для дискретного подання багатошарової системи у вертикальному напрямку, представляють стандартну одномірну вертикальну дифузію, та визначаються складовою $D_{\updownarrow}(x_{n-1} + x_{n+1} - 2x_n)$, де D_{\updownarrow} - коефіцієнт вертикальної дифузії між шарами [39].

Поверхневий потік адсорбату на будь-якому n -му шарі $(\mathbf{J})_{\mathbf{n}}$ визначається як комбінація вільної дифузії $-D_{\leftrightarrow} \nabla x_n$ та дифузії, викликані процесами взаємодії адсорбату з потенціалом взаємодії $U_n(r)$ у вигляді $-D_{\leftrightarrow}/T \mu(x_n) \nabla U_n$; D_{\leftrightarrow} - коефіцієнт поверхневої дифузії, а $\mu(x_n) = x_n(1 - x_n)$ вказує на те, що ця дифузія можлива тільки на вільні від адсорбату місця. Використовуючи апроксимацію самоузгодженості, потенціал взаємодії $U_n(r)$ можна визначити через бінарний потенціал притягування $u(r)$ для адатомів, розділених відстанню r у вигляді $U_n(r) = -x_{n-1} \int u(r - r') x_n(r') dr'$ [22, 26, 39–44]. У найпростішому випадку ми будемо використовувати потенціал $u(r)$ у гаусовій формі $u(r) = 2\epsilon(4\pi r_0^2)^{-1/2} \exp(-r^2/4r_0^2)$, де ϵ та r_0 задають енергію взаємодії адатомів та радіус їх взаємодії, відповідно. Беручи до уваги, що концентрація адсорбату змінюється повільно на відстані радіусу взаємодії, інтеграл $\int u(r - r') x_n(r') dr'$ можна розкласти у ряд:

$$\begin{aligned} \int u(\mathbf{r} - \mathbf{r}') x_n(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' &\simeq \\ \int u(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sum_m \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^m}{m!} \nabla^m x_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Далі, шляхом підстановки $u(r)$ до рівняння (1.2), враховуючи, що $r_0^{2m} \rightarrow 0$ при $m > 2$ отримуємо вираз для потенціалу взаємодії $U_n(r)$ для певного n -ого шару у вигляді:

$$U_n(r) \simeq -\epsilon x_{n-1} [x_n + (1 + r_0^2 \nabla^2)^2 x_n]. \quad (1.3)$$

Множник x_{n-1} враховує взаємодію, адатомів при наявності попереднього шару з ненульовою концентрацією адсорбату на ньому, що відіграє роль підкладки

(субстрату) для даного шару. Якщо невідповідність параметрів ґратки адсорбованого матеріалу та підкладкою є значною, то зв'язок між адатомами на першому шарі та підкладкою стає досить сильним [43]. У такому випадку потенціал взаємодії (1.3) має бути узагальненим врахуванням пружних ефектів, що виникають при притягальній взаємодії між підкладкою і адсорбованими частинками у вигляді $U_1^{el} = \epsilon_s < 0$ [43, 44]. У таких системах пружні ефекти приводять до того, що ефективність десорбції стає малою під час росту першого шару. Це, в свою чергу, приводить до однорідного та майже щільного заповнення адсорбатом субстрату. При досить малому значенні невідповідності параметрів ґратки матеріалу, що осаджується, та субстрату пружні ефекти є слабкими і, без втрати загальності, ними можна знехтувати навіть для першого зростаючого шару на підкладці [45]. При осадженні однотипних атомів на n -тому шарі з $n > 1$ (осадження одного сорту атомів), пружні ефекти відсутні. Вони впливають тільки на просторовий перерозподіл адатомів на першому шарі, тоді як просторова конфігурація адсорбату на будь-якому n -тому шарі з $n > 1$ повторює конфігурацію адсорбату на попередньому $(n - 1)$ -ому шарі. При дослідженні еволюції адсорбату на певному n -ому шарі, що задається динамічним рівнянням (1.1), враховуючи конденсацію адатомів одного сорту, далі, не втрачаючи загальності, пружні ефекти не будуть враховані.

Відомо, що при дослідженні процесів конденсації для виготовлення наноструктурованих тонких плівок, для отримання поверхневих структур різного типу (нано-точки, нано-отвори, видовжені структури) використовують зовнішні поля. Типовим прикладом є ефект електроміграції, коли спостерігається іонне перенесення в напрямку, зворотному до напрямку електричного поля, обумовлене перенесенням імпульсу від вільних електронів до іонів металу. Цей метод використовується для виготовлення структур лінійного типу (видовжених структур адсорбату) [46, 47]. В акумулятивних плазмово-іонних пристроях процес структурування адсорбату підтримується зовнішнім електричним полем, підведеним до підкладки. У таких системах адсорбовані частки можуть десорбироватися назад до плазми для додаткової іонізації та адсорбуватися на більш високі рівні багатшарової структури адсорбату [48, 49]. Для опису

такого індукованого вертикального руху адатомов від нижніх шарів до верхніх уведемо до реакційної складової f_n нашої моделі (1.1) додатковий доданок $D_E[x_{n-1}(1-x_n) - x_n(1-x_{n+1})]$, де коефіцієнт анізотропної вертикальної дифузії $D_E = |\mathbf{E}|Ze/T$ пропорційний напруженості електричного поля поблизу підкладки $|\mathbf{E}|$; Z — координаційне число, а e — заряд електрона [26, 50].

Для опису еволюції зростаючої поверхні в більш реалістичних умовах необхідно враховувати стохастичну природу електричного поля. Це означає, що напруженість електричного поля $|\mathbf{E}|$ може розглядатися як флуктуюючий параметр моделі. Враховуючи невеликі відхилення напруженості електричного поля від середнього значення $|\mathbf{E}_0|$, далі розкладемо реакційну складову $f_n(D_E)$ рівняння (1.1) в околі $D_E^0 = |\mathbf{E}_0|Ze/T$. У результаті отримуємо: $f_n = f_n(D_E^0) + (\partial f_n / \partial D_E)|_{D_E=D_E^0} \xi$, де ξ представляється стохастичним полем, $\xi = \xi(\mathbf{r}, t)$, що у найпростішому випадку являє собою білий дельта-корельований гаусів шум з властивостями:

$$\langle \xi(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\sigma^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (1.4)$$

де σ^2 — інтенсивність флуктуацій напруженості підведеного до підкладки зовнішнього електричного поля, пропорційна до середнього значення напруженості $|\mathbf{E}_0|$.

У недавній роботі [51] було показано, що динаміка процесів формування структур адсорбату в багатошаровій системі при конденсації може бути ефективно описана в рамках одношарової моделі на певному n -ому шарі, визначивши концентрацію адсорбату на попередньому $(n-1)$ -ому та на наступному $(n+1)$ -му шарі через концентрацію адсорбату на поточному n -му шарі. Для цього, концентрацію адсорбату на будь-якому n -му шарі будемо розглядати як відношення площі, покритої адсорбатом на n -му шарі, S_n , та площі підкладки S_0 , тобто, $x_n = S_n/S_0$: $S_0 \propto L_0^2$, де L_0 — лінійний розмір підкладки; $S_n = \sum_i^M s_{ni} = \pi \sum_i^M r_{ni}^2$, де s_{ni} — площа i -ої структури на n -му шарі; сума береться по всім M структурам. Дотримуючись принципу мінімізації поверхневої енергії припускаємо, що лінійний розмір кожної i -ої багатошарової структури зменшується з ростом кількості шарів n на ширину тераси $d = \overline{d_n^i}$, усередненої за всіма M структурами та всіма N шарами (див. рис.1.1). Формально

ми можемо об'єднати всі M площ, вкритих адсорбатом, на n -му шарі, в одну структуру з лінійним розміром r_n , що дає $S_n \propto r_n^2$. В такому випадку r_n зменшується з номером шару n на величину Δ , яка представляє ширину тераси для побудованої багат шарової структури. З наївного розгляду випливає, що $d < \Delta < L_0$ і $\Delta = \Delta(d, L_0, N)$. У найпростішому випадку ми можемо покласти $r_n = r_1 - (n-1)\Delta$. Цей вираз дає відношення між площею, покритою адсорбатом на будь-якому n -му шарі, та площею зайнятою адсорбатом на першому шарі у вигляді: $S_n \propto S_1[1 - (n-1)\Delta/r_1]^2$. Таким чином, для концентрації адсорбату на n -му шарі та сусідніх $(n-1)$ -му й $(n+1)$ -му шарах отримуємо:

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{S_1}{S_0} \left[1 - (n-1) \frac{\Delta}{r_1} \right]^2, \\ x_{n\pm 1} &= \frac{S_1}{S_0} \left\{ \left[1 - (n-1) \frac{\Delta}{r_1} \right] \mp \left[\frac{\Delta}{r_1} \right] \right\}^2 \\ &= \underbrace{\frac{S_1}{S_0} \left[1 - (n-1) \frac{\Delta}{r_1} \right]^2}_{x_n} \mp 2 \underbrace{\frac{\Delta S_1}{r_1 S_0} \left[1 - (n-1) \frac{\Delta}{r_1} \right]}_{\sqrt{x} \sqrt{S_0/S_1}} + \frac{S_1}{S_0} \left(\frac{\Delta}{r_1} \right)^2. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Після простих алгебраїчних перетворень знаходимо:

$$x_{n\pm 1} = (\sqrt{x_n} \mp \beta/2)^2, \quad (1.6)$$

де $\beta = 2\Delta/L_0 < 1$. З фізичної точки зору, значення ширин терас Δ та d залежать властивостей осаджуваного матеріалу, температури та умов осадження та можуть бути встановлені в рамках реального експерименту. При проведенні теоретичних розрахунків та числового моделювання у нашій моделі величини Δ та d є параметрами моделі.

Далі, більш зручно вираховувати час в одиницях t/k_d^0 , та увести безрозмірні параметри $\varepsilon \equiv \epsilon/T$, $\alpha \equiv k_a/k_d^0$, $u_E = D_E^0/k_d^0$, $D_0 \equiv D_{\downarrow}/k_d^0$. Уводячи у розгляд дифузійну довжину $L_d \equiv \sqrt{D_{\leftrightarrow}/k_d^0} > r_0$ рівняння еволюції концентрації адсорбату $x = x_n$ на певному шарі багат шарової системи плазма-конденсат в інтерпретації стратоновича набуває вигляду:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = f(x) - L_d^2 \nabla \cdot \mathbf{J} + \sigma^2 g(x) \frac{dg(x)}{dx} + g(x) \xi(\mathbf{r}, t), \quad (1.7)$$

де реакційна складова $f(x)$ задається виразом:

$$f(x) = \alpha(1-x)\nu(x) - x\nu(x)e^{-2\varepsilon x(\sqrt{x} + \frac{1}{2}\beta)^2} + u_E\beta_0\sqrt{x}(1-2x) + \frac{1}{4}\beta^2(u_E + 2D_0), \quad (1.8)$$

з $\nu(x) = (\sqrt{x} + 1/2\beta)^2 [1 - (\sqrt{x} - 1/2\beta)^2]$ та $g(x) = [(1-x)(\sqrt{x} + 1/2\beta)^2 - x(1 - (\sqrt{x} - 1/2\beta)^2)]$. Загальний поверхневий потік адсорбату \mathbf{J} набуває виду:

$$\mathbf{J} = - [\nabla x - \varepsilon\gamma(x)\nabla \{x + (1 + r_0^2\nabla^2)^2 x\}], \quad (1.9)$$

де $\gamma(x) = \mu(x)(\sqrt{x} + 1/2\beta)^2$.

1.2 Встановлення умов реалізації стійких просторових структур при конденсації

У даному розділі проведемо лінійний аналіз досліджуваної системи на стійкість з метою встановлення умов реалізації стійких просторових структур при конденсації. Для цього проведемо аналіз стійкості однорідних стаціонарних станів x_{st} до неоднорідним збурень. Однорідне стаціонарне значення x_{st} може бути знайдене з рівняння

$$f(x) + \sigma^2 g(x) d_x g(x) = 0. \quad (1.10)$$

В рамках стандартного аналізу на стійкість відхилення концентрації адсорбату x від стаціонарного значення x_{st} приймемо у вигляді $\delta x = x - x_{st} \propto e^{\lambda(k)t} e^{ikr}$, де k це хвильове число, а $\lambda(k)$ це показник стійкості. Розглядаючи відхилення δx як малий невеликий параметр, ми можемо розкласти ліву частину рівняння (1.10) в околі x_{st} . В такому випадку з еволюційного рівняння (1.7) відразу ж виходить дисперсійне співвідношення:

$$\lambda(\kappa) = d_x [f(x) + \sigma^2 g(x) d_x g(x)] |_{x=x_{st}} - \kappa^2 [1 - 2\varepsilon\gamma(x_{st})(1 - \rho^2\kappa^2)], \quad (1.11)$$

де використовуються позначення $\kappa \equiv kL_d$, $\rho \equiv r_0/L_d$ і розглядається межа $\rho^4 \rightarrow 0$. Показник стійкості $\lambda(\kappa)$ може бути пов'язаний з параметром порядку

існування просторової нестійкості в досліджуваній системі. Якщо $\lambda(\kappa) < 0 \forall \kappa$, то система стабільна, що означає, що всі просторові нестійкості зникнуть у часі. В такому випадку адсорбат буде покривати підкладку однорідно без формування будь-яких стійких відокремлених структур (островів). Наявність позитивних значень показника стійкості $\lambda(\kappa)$ означає, що просторове збурення буде зростати в часі, приводячи до просторового впорядкування поля покриття з утворенням відокремлених поверхневих структур. В такому випадку $\lambda(\kappa) > 0$ при $\kappa \in (\kappa_1, \kappa_2)$, а період просторових модуляцій κ_m відповідає максимальному значенню показника стійкості, яке можна визначити зі співвідношення $d_\kappa \lambda(\kappa) = 0$.

З рівняння на показник стійкості (1.11) випливає, що член з κ^4 стабілізує систему за рахунок $\gamma(x_{st}) > 0$. З іншого боку перший член в правій частині в рівнянні (1.11) має бути негативним для виконання умови $\kappa_1 > 0$. Нестійкість системи (1.7) визначається складовою $1 - 2\varepsilon\gamma(x_{st})$ з $x_{st} = x_{st}(\alpha, \varepsilon, u_E, \sigma^2)$. Отже, можна очікувати, що зміна інтенсивності шуму при інших фіксованих параметрах може індукувати впорядкування/розупорядкування системи. Проведений аналіз лінійної стійкості дозволяє визначити області основних параметрів системи, в яких можливе формування стійких поверхневих структур.

Розрахована діаграма стійкості в координатах (σ^2, u_E) при різних значеннях α і ε показана на лівій панелі на рис.1.2. Тут, всередині областей A_I та A_{II} показник стійкості приймає від'ємні значення при всіх $\kappa > 0$ (див. типову залежність $\lambda(\kappa)$ у правій панелі вгорі на рис.1.2). В області B , обмеженої кривими однакового типу, показник стійкості $\lambda(\kappa)$ приймає позитивні значення в інтервалі (κ_1, κ_2) . Типова залежність показника стійкості λ від хвильового числа κ всередині області B показана в правій панелі внизу на рис.1.2. З отриманих результатів випливає, що в детермінованій квазірівноважній системі з $\sigma^2 = 0$ та $u_E \rightarrow 0$ (слабке електричне поле поблизу підкладки) просторові нестійкості не можуть бути реалізовані (область A_{II}). У такій системі можливе лише пошарове зростання тонкої плівки без будь-яких розділених структур [51]. Розглянемо спочатку вплив конкуренції регулярної та стохастичної частин зовнішнього потоку u_E та σ^2 на стійкість стаціонарного однорідного стану x_{st} до неоднорідним

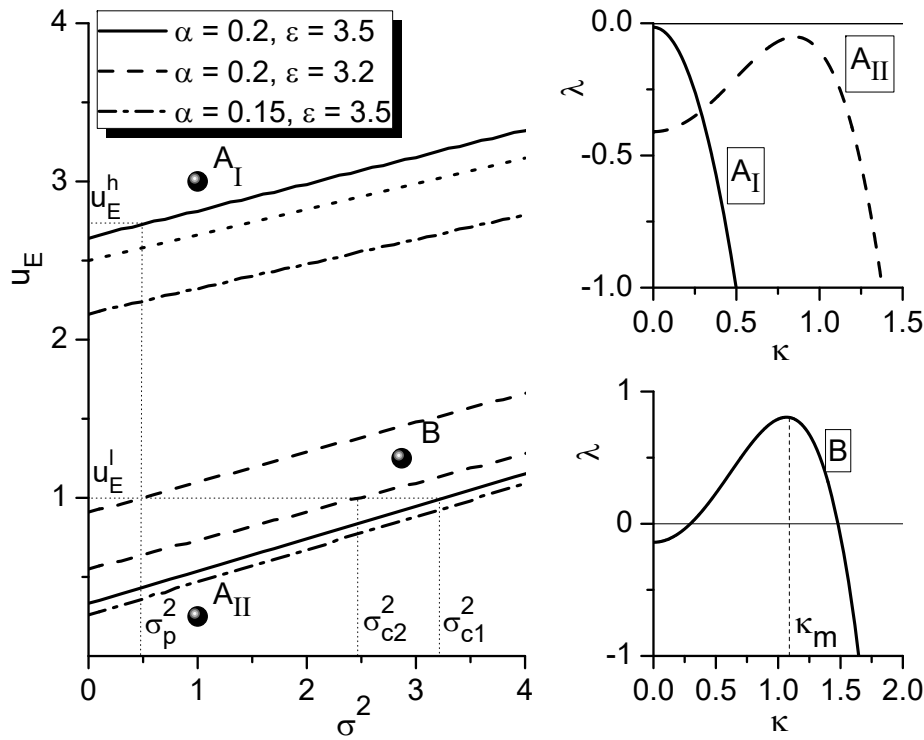


Рисунок 1.2 — Діаграма стійкості $u_E(\sigma^2)$ (ліва панель) та показники стійкості $\lambda(\kappa)$ (права панель) у різних областях діаграми стійкості.

збурень при $\alpha = 0.2$ та $\varepsilon = 3.5$, що представлено суцільними кривими на лівій панелі на рис.1.2. З цього випливає, що в разі сильної анізотропії ($u_E = u_E^h$) у квазідетермінованій системі ($\sigma^2 \rightarrow 0$) швидкий рух адатомів знизу вгору приводить до зниження концентрації адсорбату на шарі і необхідне пересичення концентрації адсорбату, необхідне для формування структур, не досягається. Збільшення інтенсивності шуму індукує формування структур в системі при $\sigma^2 = \sigma_p^2$ (перехід з області A_I в область B). При подальшому зростанні σ^2 зростаюча поверхня залишається структурованою. При проміжних значеннях сили анізотропії $u_E = u_E^l$ навіть у детермінованій системі поверхневі структури будуть стійкими. Тут збільшення інтенсивності шуму σ^2 забезпечує стабілізацію однорідного стану x_{st} при $\sigma^2 = \sigma_{c1}^2$. Аналогічний ефект індукованої шумом стабілізації системи плазма-конденсат був виявлений в роботі [52] шляхом вивчення впливу флуктуацій поверхневого потоку адсорбату на процеси формування поверхневих структур.

Зменшення сили взаємодії ε при фіксованому коефіцієнті адсорбції α приводить до звуження області B , де можливе утворення стійких структур (див.

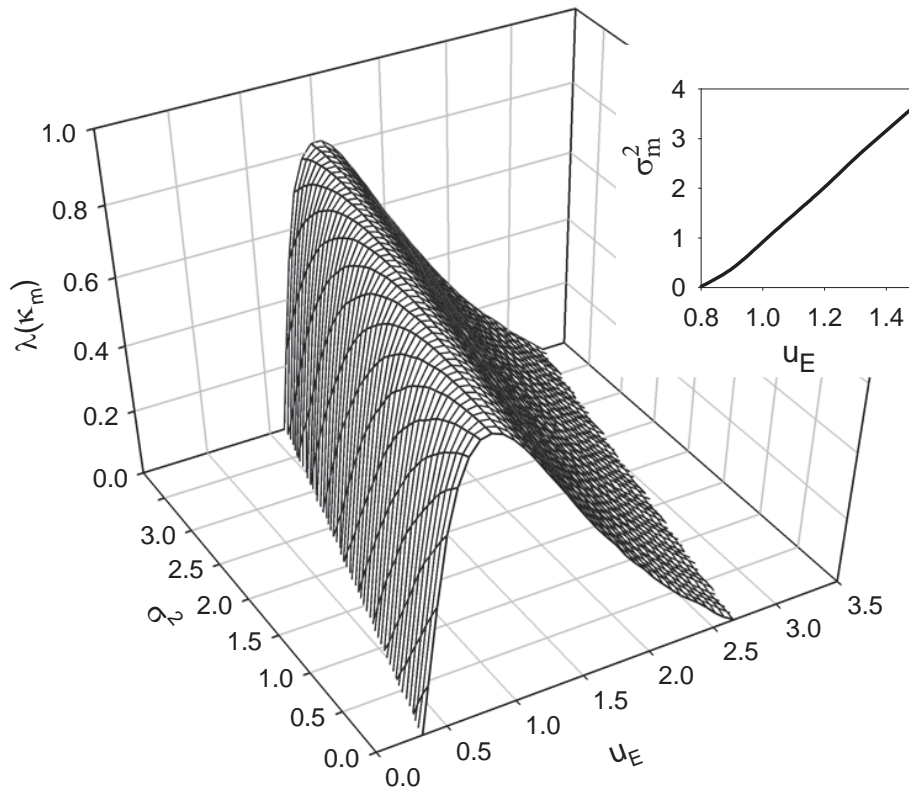


Рисунок 1.3 — Залежність показника стійкості λ , розрахованого для найбільш нестійкої моди κ_m при $\alpha = 0.2$ та $\varepsilon = 3.2$.

штрихові криві на лівій панелі на рис.1.2). Тут при фіксованих значеннях детермінованої частини зовнішнього потоку $u_E = u_E^l$ реалізується індуковані шумом реверсивні процеси структурування поверхні: у випадках, $0 \leq \sigma^2 < \sigma_p^2$ та $\sigma^2 > \sigma_{c2}^2$ адсорбат однорідно розподілятиметься по шару і формування структур є неможливим; $\sigma^2 \in (\sigma_p^2, \sigma_{c2}^2)$ у процесі конденсації будуть реалізовуватися відокремлені поверхневі структури. Зменшення коефіцієнта адсорбції приводить до зменшення критичних значень сили анізотропії u_E , коли можливе формування стійких структур (пор. суцільні та штрих-пунктирні криві на лівій панелі на рис.1.2). Пунктирна крива на лівій панелі на рис.1.2 відповідає співвідношенню $u_E = 2.5 + 0.16188\sigma^2$ при $\alpha = 0.2$, $\varepsilon = 3.5$ і буде обговорюватися далі.

Залежність максимального значення показника стійкості, що відповідає найбільш нестійкій моді k_m (див. праву нижню панель на рис.1.2) від сили анізотропії u_E та інтенсивності шуму Σ^2 при фіксованих $\alpha = 0.2$ та $\varepsilon = 3.5$ (суцільні криві на рис.1.2) показано на рис.1.3. Звідси випливає, що при збільшенні

детермінованої або стохастичної частини зовнішнього потоку значення показника стійкості $\lambda(\kappa_m)$ характеризується максимальним значенням. Це означає, що просторовий порядок системи збільшується, досягає максимального значення і потім зменшується з ростом або u_E , або σ^2 . Значення σ_m^2 , яке відповідає максимально упорядкованій поверхні, збільшується з ростом u_E , що показано на вставці на рис.1.3. Крім того, зі збільшенням сили анізотропії u_E , враховуючи $\sigma^2 = \sigma_m^2(u_E)$ з вставки на рис.1.3, максимальне значення показника стійкості $\lambda(\kappa_m)$ збільшується. Отже, збільшення як стохастичної, так і детермінованої частин зовнішнього потоку сприяє формуванню добре впорядкованої поверхні при осадженні в системі плазма-конденсат. Така немонотонна залежність максимального значення показника стійкості від детермінованої та стохастичної частин зовнішнього потоку означає зміну типу поверхневих структур, що реалізуються при осадженні. Раніше було показано, що збільшення u_E в детермінованій системі приводить до зміни морфології поверхні від розділених отворів всередині матриці адсорбату до розділених багаточисельних структур адсорбату на підкладці [26]. Тому можна очікувати, що введені флуктуації приведуть до морфологічного перетворення структури поверхні зі збільшенням інтенсивності шуму σ^2 .

1.3 Індуковані шумом ефекти самоорганізації адсорбату при конденсації

Для проведення детальних досліджень впливу флуктуацій зовнішнього потоку, викликаного дією електричного поля, підведеного підкладки, на динаміку структурування поверхні при конденсації та можливість контролювати морфологію поверхні та розміром островів адсорбату в досліджуваній стохастичній моделі системи плазма-конденсат будемо використовувати процедуру числового моделювання. Для цього будемо чисельно розв'язувати рівняння Ланжевена (1.7) на двовимірній гексагональній ґратці з лінійним розміром $L = 256\Delta x$ та періодичними граничними умовами. Для розв'язання рівняння Ланжевена

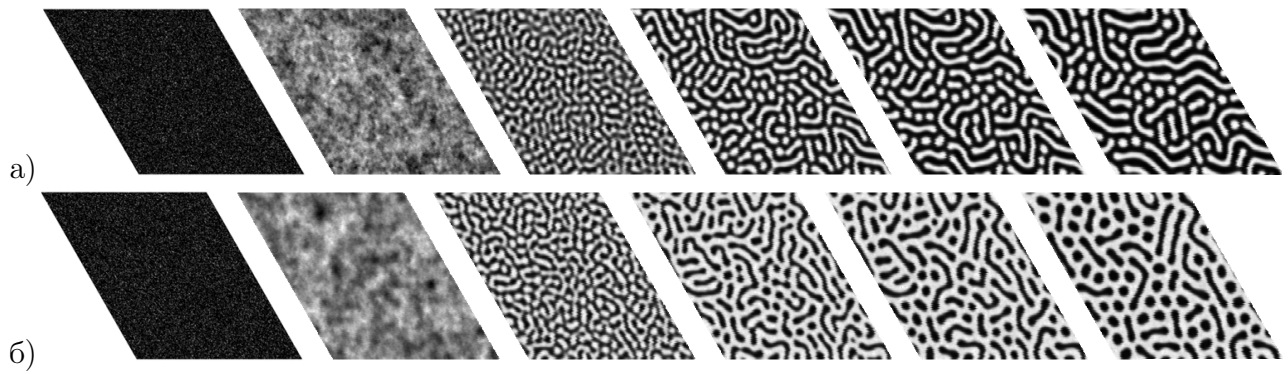


Рисунок 1.4 — Еволюція морфології поверхні (зліва направо) при $\alpha = 0.2$, $\varepsilon = 3.5$, $u_E = 1.0$
та: а) $\sigma^2 = 0.5$; б) $\sigma^2 = 2.5$.

з мультиплікативним шумом будемо використовувати алгоритм Мільштейна [53]; джерело білого шуму будемо генерувати за допомогою алгоритму боксу-Мюллера, що задовольняє генерації випадкових чисел з гауссовським розподілом [54]. Просторові похідні другого і четвертого порядків будемо обчислювати за формулами стандартної кінцево-різницевої схеми для гексагональної ґратки. Крок інтегрування за часом зафіксуємо значенням $\Delta t = 10^{-3}$; крок інтегрування у просторі покладемо $\Delta x = 0.5$. У якості початкових умов будемо використовувати гауссовський розподіл з $\langle x(\mathbf{r}, 0) \rangle = \langle (\delta x(\mathbf{r}, 0))^2 \rangle = 10^{-2}$. В обчислювальній схемі загальний розмір системи дорівнює $L \simeq 40L_d$. У подальшому дослідженні зафіксуємо $\beta = 0.1$ і $D_0 = 1.0$.

Еволюцію морфології поверхні при конденсації в системі плазма-конденсат при фіксованих значеннях основних параметрів системи, $\alpha = 0.2$, $\varepsilon = 3.5$, $u_E = 1.0$, та різних значеннях інтенсивності флуктуацій сили анізотропії вертикальної дифузії адатомів між шарами σ^2 : $\sigma^2 < \sigma_m^2$ та $\sigma^2 > \sigma_m^2$ (див. рис.1.3) представлено зліва направо на рис.1.4а та рис.1.4б, відповідно. Тут за допомогою відтінків сірого кольору показано концентрацію адсорбату в кожній комірці шестикутної ґратки: чорний колір відповідає просторової конфігурації без адсорбату на шарі (розріджена або збіднена на адсорбат фаза); білий колір означає, що дана комірка заповнена адсорбатом (щільна фаза збагачена на адсорбат). З отриманих результатів випливає, що в процесі конденсації після певного інкубаційного періоду внаслідок взаємодії адсорбату реалізуються процеси самоорганізації (структурування) адсорбату: утворення великої

кількості дрібних кластерів адсорбату. Ці кластери взаємодіють між собою і в залежності від умов конденсації утворюють стаціонарну картину морфології поверхні, показаної в останній колонці на рис.1.4. Проаналізуємо детально динаміку структурування поверхні при різних значеннях інтенсивності флуктуацій напруженості підведеного до підкладки зовнішнього електричного поля. При малих значеннях інтенсивності шуму (див. рис.1.4а при $\sigma^2 = 0.5$) сформовані, з початкової гауссовської конфігурації, невеликі кластери адсорбату ростуть у розмірі і при великих часах конденсації формують стаціонарну картину морфології поверхні з фіксованою кількістю островів адсорбату різної форми (сферичні і витягнуті кластери). При підвищених значеннях інтенсивності шуму (див. рис.1.4б при $\sigma^2 = 2.5$) флуктуації напруженості електричного поля біля підкладки приводять до збільшення концентрації адсорбату на шарі, і в процесі конденсації взаємодія сформованих кластерів адсорбату приводить до формування відокремлених отворів різної форми всередині матриці адсорбату. Таким чином, уведені флуктуації впливають на динаміку процесів структурування поверхні та керують типом поверхневих структур; а збільшення інтенсивності флуктуацій зовнішнього поля приводить до морфологічної трансформації зростаючої поверхні з відокремлених острівців адсорбату на підкладці до відокремлених отворів всередині матриці адсорбату.

Для детального аналізу впливу флуктуацій напруженості електричного поля біля підкладки на динаміку структуроутворення далі розглянемо еволюцію середньої концентрації адсорбату на шарі, $\langle x \rangle(t)$, усередненої по всій обчислювальній ґратці, та дисперсії поля концентрації $\langle (\delta x)^2 \rangle(t) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$.

Остання величина відіграє роль ефективного параметра порядку в задачах формування просторових структур. У випадку $\langle (\delta x)^2 \rangle = 0$ суттєвої різниці в концентрації адсорбату x в різних комірках обчислювальної ґратки не існує, а отже адсорбат рівномірно заповнює даний шар. Зростання величини $\langle (\delta x)^2 \rangle(t)$ з часом вказує на проходження процесів упорядкування на поверхні з утворенням щільної (збагаченої на адсорбат) та розбавлені (збіднені на адсорбат) фаз. При цьому чим більше значення параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle$, тим більш структурованою є поверхня: формування більш чіткої межі поділу вказаних

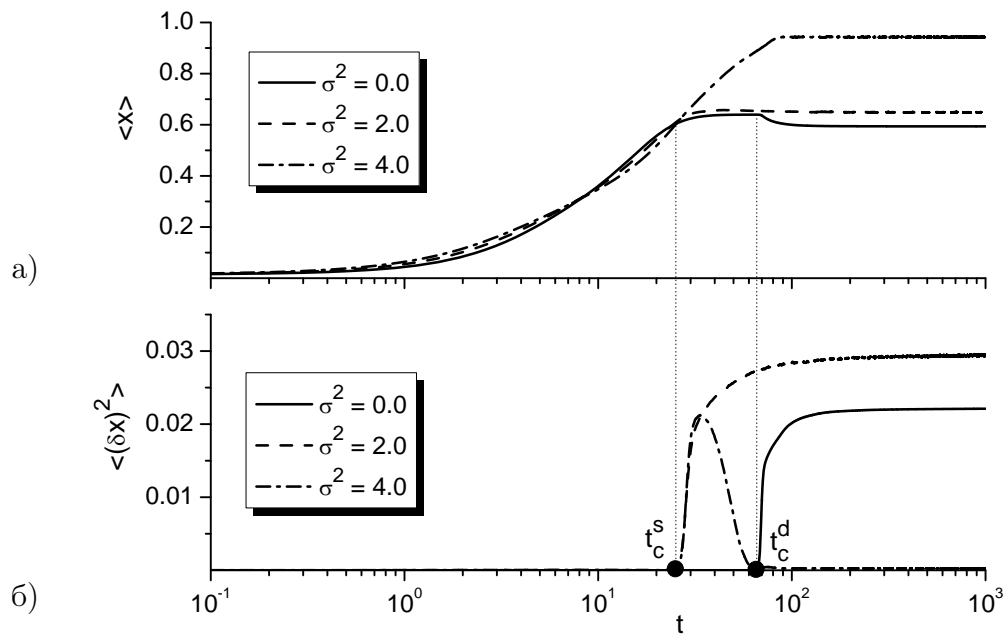


Рисунок 1.5 — Еволюція середньої концентрації адсорбату $\langle x \rangle$ та параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle$ при $\alpha = 0.2$, $\varepsilon = 3.5$, $u_E = 1.0$ та різних значеннях інтенсивності флуктуацій напруженості електричного поля σ^2 .

фаз, а отже, просторовий порядок просторової конфігурації адсорбату в системі є більшим. У випадку, коли параметр порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle$ досягає стаціонарного ненульового значення, просторова конфігурація стає стабільною (процеси перерозподілу адсорбату завершуються) і сформована структурована поверхня є стійкою.

Часові залежності середньої концентрації адсорбату в системі $\langle x \rangle$ та параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle$ наведено на рис.1.5а та рис.1.5б, відповідно, при фіксованих значеннях коефіцієнту адсорбції α , енергії взаємодії адсорбату ε , напруженості електричного поля біля підкладки (сили анізотропії вертикальної дифузії адатомів між сусідніми шарами) u_E . Спочатку розглянемо випадок детерміністичної системи при $\sigma^2 = 0$, показаний суцільними кривими на рис.1.5а та рис.1.5б. З отриманих результатів випливає, що під час конденсації середня концентрація адсорбату на шарі зростає з часом на початкових стадіях, тоді як параметр порядку приймає нульові значення: накопичення адсорбату з однорідним його розподілом на всьому шарі. У момент часу $t = t_c^d$, коли концентрація адсорбату досягає певного критичного пересичення, процеси взаємодії адсорбату починають відігравати домінуючу роль, і внаслідок самоорганізації

адсорбату дисперсія поля концентрації $\langle(\delta x)^2\rangle$ починає зростати з часом (див. суцільну криву на рис.1.5б), індукуючи початок процесів виділення щільної та розбавленої фаз. При цьому, середня концентрація адсорбату починає зменшуватися внаслідок перерозподілу адсорбату. Час $t = t_c^d$ можна ідентифікувати як інкубаційний період у процесах фазового розшарування та структуроутворення. При подальшій конденсації як середня концентрація адсорбату $\langle x \rangle$, так і параметр порядку $\langle(\delta x)^2\rangle$ досягають своїх стаціонарних ненульових значень $\langle x \rangle_{st}^d$ та $\langle(\delta x)^2\rangle_{st}^d$, відповідно, означаючи формування стаціонарної конфігурації просторового розподілу адсорбату на шарі зі стійкими поверхневими структурами.

Далі проаналізуємо вплив уведених флуктуацій зовнішнього потоку на динаміку як середньої концентрації адсорбату, так і дисперсії, а також на їх стаціонарні значення. Еволюцію $\langle x \rangle$ та $\langle(\delta x)^2\rangle$ для стохастичної системи плазмаконденсат при $\sigma^2 = 2$ наведено штриховими кривими на рис.1.5а та рис.1.5б, відповідно. Перш за все, слід зазначити, що під час інкубаційного періоду суттєвої різниці в динаміці обох статистичних моментів не спостерігається. Проте, сам інкубаційний час для стохастичної моделі t_c^s є меншим, порівняно із часом t_c^d для детерміністичної моделі (пор. суцільну та штрихову криві на рис.1.5б). Таким чином, врахування флуктуацій напруженості підведеного до підкладки електричного поля приводить до індукованого шумом прискорення процесів упорядкування. Топологія часової залежності дисперсії поля концентрації $\langle(\delta x)^2\rangle$ у стохастичній моделі з $\sigma^2 = 2$ є подібною до детерміністичної моделі: починаючи з $t = t_c^s$ параметр порядку зростає та досягає свого стаціонарного ненульового значення $\langle(\delta x)^2\rangle_{st}^s$. При цьому, виконання нерівності $\langle(\delta x)^2\rangle_{st}^s > \langle(\delta x)^2\rangle_{st}^d$ свідчить про формування більш впорядкованої просторової конфігурації адсорбату на шарі у стохастичній моделі: поверхневі структури стають більш щільними внаслідок формування більш чіткої границі між щільною та розбавленою фазами. Слід також відмітити, що у стохастичній моделі процеси самоорганізації адсорбату при $t = t_c^s$ не приводять до зменшення концентрації адсорбату, порівняно із детерміністичною системою. При $\sigma^2 = 2$ середня концентрація адсорбату монотонно зростає та, при $t > t_c^s$, досягає ста-

ціонарного значення $\langle x \rangle_{st}^s$ (див. рис.1.5а).

Динаміку обох статистичних моментів при досить великих значеннях інтенсивності шуму $\sigma^2 = 4 > \sigma_{c1}^2$ (див. суцільні криві на рис.1.2) наведено на штрих-пунктирними кривими на рис.1.5а,б. Видно, що середня концентрація адсорбату монотонно зростає з часом та при тривалій конденсації набуває стаціонарного значення. При цьому, порівнюючи результати для $\sigma^2 = 2$ та $\sigma^2 = 4$ видно, що стаціонарне значення $\langle x \rangle_{st}^s$ збільшується з ростом інтенсивності флуктуацій напруженості підведеного до підкладки, зовнішнього електричного поля. Динаміка параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle$ суттєво відрізняється в обох випадках стохастичної моделі. Не зважаючи на те, що інкубаційний час t_c^s майже не залежить від інтенсивності флуктуацій, параметр порядку збільшується з часом, досягає свого максимального значення та зменшується до нуля, приймаючи стаціонарне значення $\langle (\delta x)^2 \rangle_{st}^s = 0$. Останнє свідчить про гомогенізацію розподілу адсорбату на шарі (перехід в область A_{II} на діаграмі стійкості на рис.1.2). Таким чином, при великих значеннях інтенсивності флуктуацій напруженості електричного поля можливі тільки перехідні структури, отже збільшення інтенсивності шуму приводить до розупорядкування системи, тобто стабілізації однорідного стану. З метою проведення детального дослідження впливу флуктуацій напруженості підведеного до підкладки електричного поля на стаціонарну картину розподілу адсорбату на шарі проаналізуємо залежності стаціонарних значень середньої концентрації адсорбату $\langle x \rangle_{st}^s$ та параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle_{st}^s$ від інтенсивності шуму σ^2 . Отримані результати при фіксованих значеннях коефіцієнту адсорбції $\alpha = 0.2$, сили анізотропії $u_E = 1.0$ та енергії взаємодії адсорбату $\varepsilon = 3.5$ наведено на рис.1.6 з типовими ілюстраціями квазі-стаціонарного розподілу адсорбату при різних значеннях інтенсивності флуктуацій. Як було показано на рис.1.2 та рис.1.5 при таких значеннях параметрів системи навіть в детермінованому випадку ($\sigma^2 = 0$) при конденсації внаслідок процесів самоорганізації на поверхні шару формуються стійкі відокремлені структури адсорбату. З рисунку 1.6 видно, що зі збільшенням інтенсивності флуктуацій $\sigma^2 < \sigma_s^2$ обидва стаціонарні значення середньої концентрації $\langle x \rangle_{st}$ та параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle_{st}$ зростають: відбувається упоряд-

кування просторового розподілу адсорбату зі збільшенням його концентрації. При $\sigma^2 = \sigma_s^2$ параметр порядку досягає максимального значення і потім зменшується при $\sigma^2 < \sigma_c^2$ (див. затушовані кружки на рис.1.6). У випадку $\sigma^2 > \sigma_c^2$ маємо $\langle(\delta x)^2\rangle_{st} \simeq 0$, тоді як стаціонарне значення середньої концентрації адсорбату продовжує зростати зі збільшенням інтенсивності флуктуацій (див. пусті кружки на рис.1.6). При великих значеннях інтенсивності шуму його зростання не впливає на величину $\langle x \rangle_{st}$. У верхній панелі на рис.1.6 наведено ілюстрації типової картина стаціонарного просторового розподілу адсорбату по шару. Видно, що збільшення інтенсивності флуктуацій (зліва направо) приводить до зміни морфології поверхні від відокремлених структур адсорбату до відокремлених отворів в матриці адсорбату (див. знімки при $\sigma^2 = 0.2, 1.0, 2.5$ на рис.1.6). При великих значеннях інтенсивності флуктуацій адсорбат

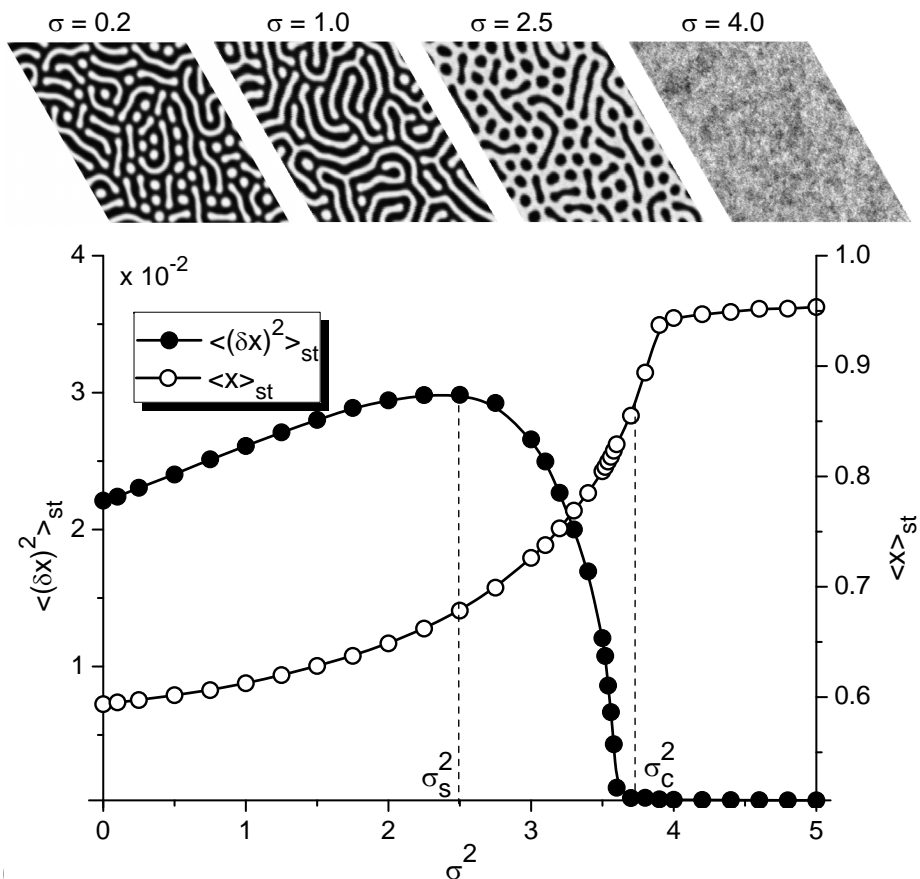


Рисунок 1.6 — Залежності стаціонарних значень середньої концентрації адсорбату $\langle x \rangle_{st}^s$ та параметра порядку $\langle(\delta x)^2\rangle_{st}^s$ від інтенсивності шуму σ^2 при $\alpha = 0.2$, $u_E = 1.0$ та $\varepsilon = 3.5$.

Зверху представлено ілюстрації квазі-стаціонарного розподілу адсорбату при різних значеннях інтенсивності флуктуацій.

з високою концентрацією однорідно розподіляється по шару (див. знімок при $\sigma^2 = 4$ на рис.1.6). Слід відзначити, що отримане в рамках процедури числового моделювання критичне значення інтенсивності флуктуацій σ_c^2 добре узгоджується із результатами лінійного аналізу системи на стійкість (див. діаграму стійкості на рис.1.2). Крім того, порівнюючи результати аналізу на стійкість та чисельного моделювання отримуємо $\sigma_m^2 < \sigma_s^2$ (див.1.3). Це означає, що максимальне значення показника стійкості $\lambda(\kappa_m)$, що відповідає σ_m^2 , пов'язане з критичним значенням інтенсивності шуму, коли реалізується морфологічне перетворення поверхні. Таким чином при $\sigma^2 = \sigma_m^2$ на поверхні шару реалізується лабіринтно-подібна структура з перколяційними кластерами адсорбату. При цьому найбільш упорядкована структурована поверхні реалізується при $\sigma^2 = \sigma_s^2$, коли всередині матриці адсорбату утворюються відокремлені отвори (див. знімок при $\sigma^2 = 2.5$ у верхній панелі на рис.1.6).

Далі розглянемо випадок $\alpha = 0.2$, $u_E = 1.0$ та $\varepsilon = 3.2$. Як було показано при лінійному аналізі (див. штрихові криві на рис.1.2), при такому наборі параметрів системи збільшення інтенсивності флуктуацій σ^2 приводить до переходу з області однорідного розподілу адсорбату з малою концентрацією (область A_I) до області формування стійких просторових структур (область B) при $\sigma^2 = \sigma_p^2$ та до області однорідного розподілу адсорбату з високою концентрацією (область A_{II}) при $\sigma^2 = \sigma_{c2}^2$. Результати числових симуляцій щодо залежності стаціонарної концентрації адсорбату $\langle x \rangle_{st}$ та стаціонарного значення параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle_{st}$ наведено на рис.1.7. З рисунку видно, що стаціонарне значення середньої концентрації адсорбату монотонно зростає зі збільшенням інтенсивності шуму (див. пусті кружки на рис.1.7). Залежність стаціонарного значення параметра порядку від інтенсивності шуму (див. затушовані кружки на рис.1.7) ілюструє, описану в розділі аналізу на стійкість, реверсивну картину упорядкування. У детерміністичній моделі та при малих значеннях інтенсивності шуму, при $\sigma^2 < \sigma_{cs}^2$, для параметра порядку маємо $\langle (\delta x)^2 \rangle_{st} \simeq 0$. Тут адсорбат однорідно розподіляється по шарові без будь-яких стійких просторових структур (див. ілюстрацію просторового розподілу адсорбату на верхній панелі рис.1.7 при $\sigma^2 = 0.2$). При $\sigma_{cs}^2 < \sigma^2 < \sigma_{cl}^2$ стаціонарне значення параметра

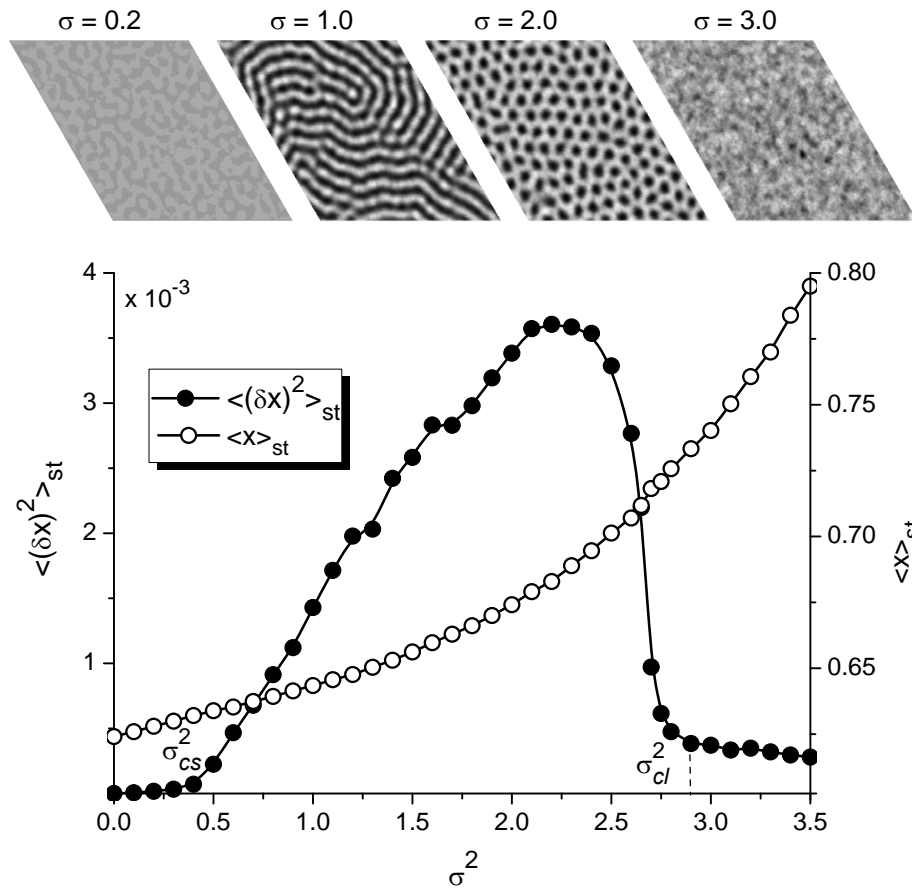


Рисунок 1.7 — Залежності стаціонарних значень середньої концентрації адсорбату $\langle x \rangle_{st}^s$ та параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle_{st}^s$ від інтенсивності шуму σ^2 при $\alpha = 0.2$, $u_E = 1.0$ та $\varepsilon = 3.2$.

Зверху представлено ілюстрації квазі-стаціонарного розподілу адсорбату при різних значеннях інтенсивності флуктуацій.

порядку починає зростати зі збільшенням інтенсивності флуктуацій, досягає максимального значення та спадає (див. затушовані кружки на рис.1.7). При цьому морфологія поверхня змінюється з відокремлених структур адсорбату до відокремлених отворів в матриці адсорбату (див. ілюстрації розподілів адсорбату при $\sigma^2 = 1$ та $\sigma^2 = 2$ на верхній панелі на рис.1.7). При великих значеннях інтенсивності флуктуацій ($\sigma^2 > \sigma_{cl}^2$) шум приводить до гомогенізації розподілу адсорбату (див. ілюстрацію розподілу адсорбату при $\sigma^2 = 3$ на верхній панелі на рис.1.7). Таким чином, проведені числові симуляції процесів формування та росту поверхневих структур узгоджуються з результатами лінійного аналізу на стійкість, проведеного у попередньому розділі, щодо індукованих шумом реверсивних процесів структурування поверхні.

Далі проаналізуємо кореляційні властивості квазістаціонарних розподілів

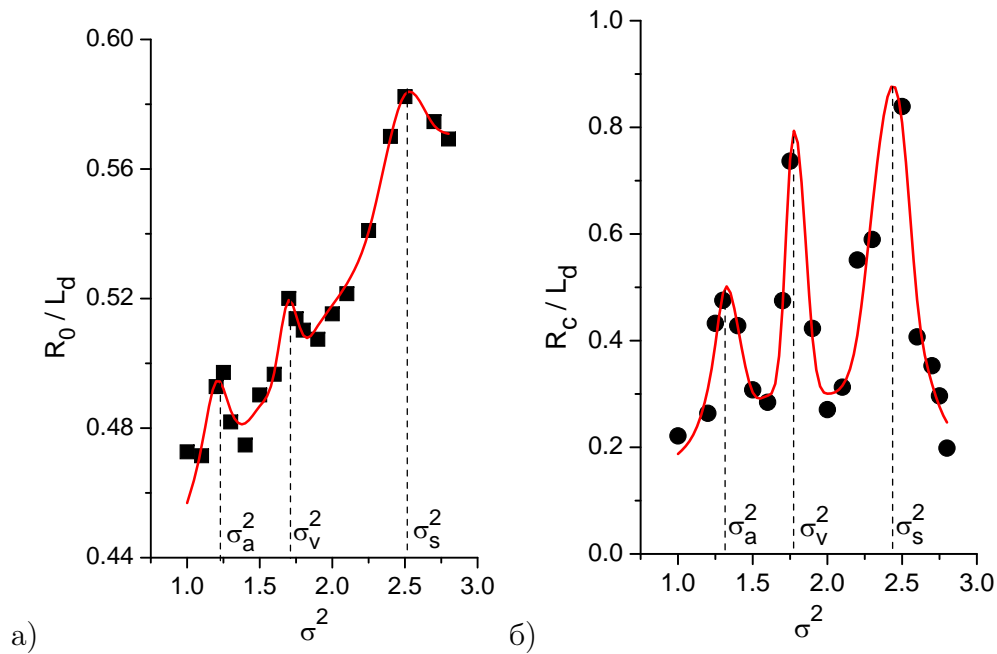


Рисунок 1.8 — Залежності періоду просторових збурень R_0 (а) та кореляційного радіусу R_c (б) від інтенсивності флуктуацій σ^2 при $\alpha = 0.2$, $u_E = 1.0$, $\varepsilon = 3.5$.

адсорбату при різних значеннях флуктуацій напруженості електричного поля, підведеного до підкладки. Для цього будемо розраховувати двоточкову автокореляційну функцію $C(r) = \langle x(r)x(0) \rangle$. Цю функцію можна представити у наступному функціональному вигляді: $C(r) = Ae^{-r/R_c} \cos(2\pi r/R_0 + \phi)$, де R_c та R_0 визначають радіус кореляції та період просторових збурень (середню відстань між поверхневими структурами), відповідно. Як було показано в роботах [26, 41, 52], обидві ці величини є чутливими до морфології поверхні, що аналізується. Розраховані залежності періоду просторових збурень R_0 та кореляційного радіусу R_c від інтенсивності флуктуацій σ^2 представлені на рис.1.8а та рис.1.8б, відповідно. На рис.1.9 наведено типові ілюстрації стаціонарних просторових розподілів адсорбату при різних значеннях інтенсивності флуктуацій та фіксованих $\alpha = 0.2$, $u_E = 1.0$ та $\varepsilon = 3.5$. З отриманих результатів видно, що з ростом інтенсивності флуктуацій період просторових збурень R_0 зростає немонотонним чином. На залежності $R_0(\sigma^2)$ видно три піки, що знаходяться при σ_a^2 , σ_v^2 та σ_s^2 (див. рис.1.8а). Залежність $R_c(\sigma^2)$ на рис.1.8б також характеризується наявністю трьох піків при тих самих значеннях інтенсивності флуктуацій σ^2 . Останній пік при $\sigma^2 = \sigma_s^2$ відповідає максимальному значенню стаціонар-

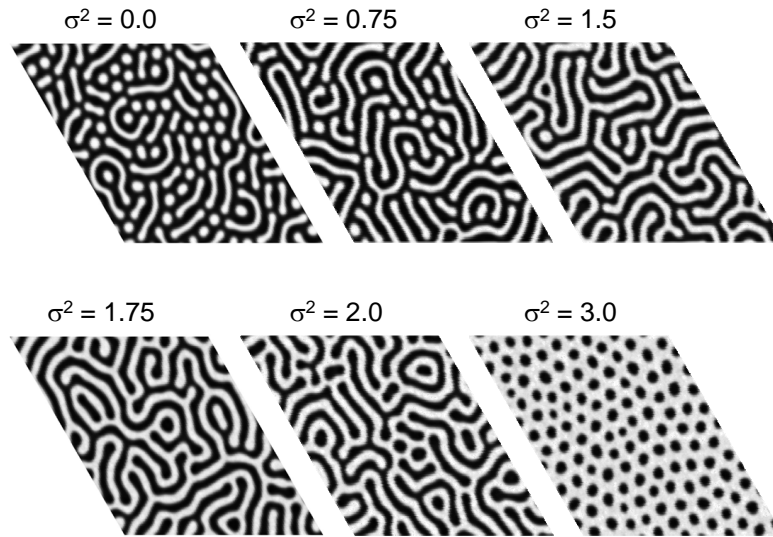


Рисунок 1.9 — Типові ілюстрації стаціонарних просторових розподілів адсорбату при різних значеннях інтенсивності флуктуацій σ^2 при $\alpha = 0.2$, $u_E = 1.0$, $\varepsilon = 3.5$.

ного параметра порядку $\langle(\delta x)^2\rangle_{st}$ (див. рис.1.6). Аналізуючи залежності $R_0(\sigma^2)$ та $R_c(\sigma^2)$ та зміну морфології поверхні при збільшенні інтенсивності флуктуацій, показані на рис.1.9, можна зробити висновок, що при $\sigma^2 = \sigma_a^2$ реалізується морфологічний перехід у просторовому розподілі адсорбату від відокремлених структур адсорбату до лабіринтно-подібної структури з перколюючими кластерами адсорбату (див. знімки при $\sigma^2 = 0.75$ та $\sigma^2 = 1.5$ на рис.1.9). При перебільшенні інтенсивністю флуктуацій значення $\sigma^2 = \sigma_v^2$ адсорбат самоорганізується з формуванням відокремлених отворів в матриці адсорбату (пор. знімки при $\sigma^2 = 1.75$ та $\sigma^2 = 2.0$ на рис.1.9). Варто відзначити, що критичне значення σ_a^2 , яке відповідає за зміну морфології поверхні від відокремлених структур адсорбату через лабіринтно-подібну структуру до відокремлених отворів в матриці адсорбату, добре узгоджується із значенням σ_m^2 , отриманим в рамках лінійного аналізу на стійкість, проведеного у попередньому розділі, коли показник стійкості $\lambda(\kappa_m)$ приймає максимальне значення (див. вставку на рис.1.3).

Далі проаналізуємо зміну кількості поверхневих структур (островів адсорбату та отворів) N та їх розміру при збільшенні інтенсивності флуктуацій. Для розрахунку розміру структур будемо аналізувати середню площу відповідних структур $\langle S \rangle$. Отримані результати наведено на рис.1.10а та рис.1.10б,

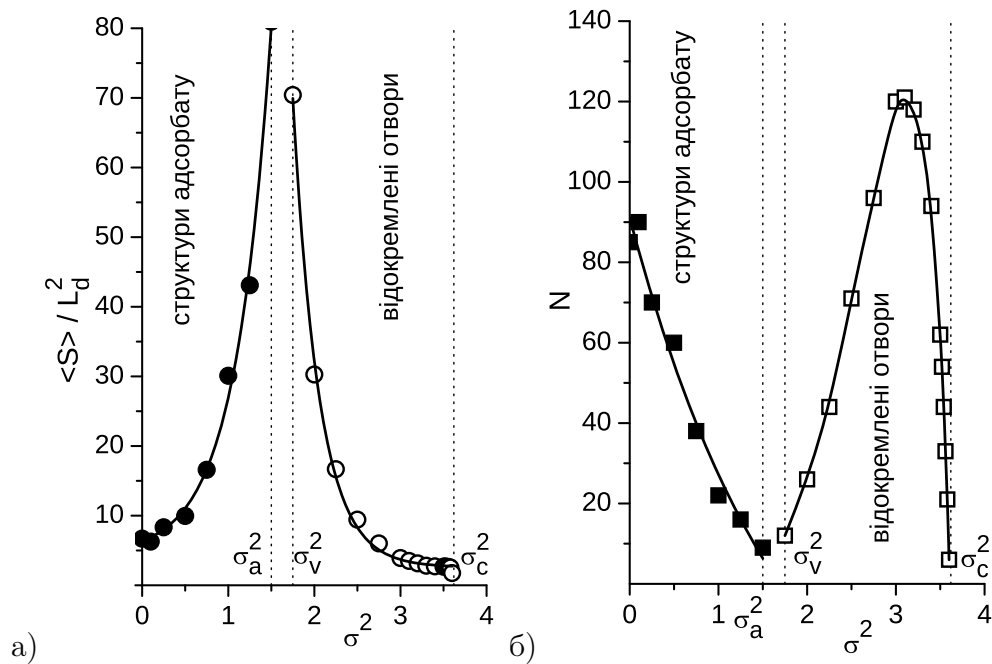


Рисунок 1.10 — Залежності середньої площі поверхневих структур (а) та їх кількості (б) від інтенсивності флуктуацій σ^2 при: $\alpha = 0.2$, $u_E = 1.0$, $\varepsilon = 3.5$.

відповідно. Спочатку розглянемо випадок малих значень інтенсивності шуму $\sigma^2 < \sigma_a^2$, коли у процесі конденсації формуються відокремлені структури адсорбату. Відповідні результати показано кривими із затушованими кружками та затушованими квадратами на рис.1.10а та рис.1.10б, відповідно. З рисунків видно, що зі збільшенням значення інтенсивності флуктуацій середня площа островів адсорбату монотонно зростає, а їх кількість зменшується. Таким чином, індуковані флуктуаціями процеси взаємодії островів адсорбату між собою приводять до формуванням видовжених структур адсорбату з подальшим формуванням перколюючого кластеру адсорбату. Такі кластери можливі, коли інтенсивність флуктуацій σ^2 приймає значення з інтервалу (σ_a^2, σ_v^2) . При $\sigma^2 > \sigma_v^2$ просторова конфігурація адсорбату представляє собою матрицю з відокремленими отворами всередині. При чому, середня площа таких отворів монотонно зменшується з ростом інтенсивності флуктуацій (див. криву з пустими кружками на рис.1.10а), тоді як кількість отворів зростає, набуває максимального значення та згодом зменшується з $\sigma^2 < \sigma_c^2$ (див. криву з пустими квадратами на рис.1.10б). Така немонотонна поведінка кількості отворів свідчить, що при збільшенні інтенсивності флуктуацій від σ_v^2 приводить до організації (виді-

ленню) отворів великого розміру, згодом їх кількість зростає, тоді як середній розмір зменшується. При підвищених значеннях інтенсивності флуктуацій малі отвори, розмір яких не перевищує певне критичне значення, стають нестійкими, і загальна кількість отворів зменшується. Цей результат добре узгоджується із зростаючою залежністю стаціонарного значення середньої концентрації адсорбату $\langle x \rangle_{st}$ від інтенсивності флуктуацій σ^2 (див. рис.1.6).

Досі ми досліджували вплив інтенсивності зовнішніх флуктуацій напруженості електричного поля біля підкладки на динаміку формування поверхневих структур та їх статистичні властивості при фіксованих параметрах системи. У той же час відповідно до побудованої моделі росту нано-структурованих тонких плівок при конденсації у системах плазма-конденсат інтенсивність флуктуацій σ^2 напруженості електричного поля є пропорційною до середнього значення цієї напруженості u_E . Таким чином, в реальному експерименті зростання середньої величини напруженості поля приводить до зростання інтенсивності її флуктуацій. Проведений у попередньому розділі аналіз досліджуваної системи на стійкість та проведені у цьому розділі числові симуляції показують, що одночасне збільшення як u_E так і σ^2 всередині області B на рис.1.2 забезпечить формування стабільних поверхневих структур під час осадження. Виявлене індуковане шумом морфологічне перетворення в структурі шару від відокремлених структур адсорбату на поверхні підкладки до відокремлених отворів в матриці адсорбату вказує на те, що формування відокремлених компактних островів адсорбату при фіксованих інших параметрах системи, буде реалізовуватись при значеннях напруженості електричного поля u_E та інтенсивності його флуктуацій σ^2 поблизу верхньої границі області B (див. зліва на рис.1.2). При подальших розрахунках зафіксуємо $\alpha = 0.2$ й $\varepsilon = 3.5$ (суцільні прямі на рис.1.2 зліва) та сконцентруємо нашу увагу на встановленні впливу відношення інтенсивності флуктуацій напруженості електричного поля до його середнього значення σ^2/u_E (NOSr від noise-over-signal ratio) на зміну статистичних властивостей відокремлених структур адсорбату, враховуючи функціональну залежність $\sigma^2 = au_E - b$ при $u_E \geq 2.5$ (див. пунктирну пряму на рис.1.2 зліва); a та b певні константи.

Спочатку, проаналізуємо вплив NOSr на динаміку формування поверхневих структур та ступінь порядку в просторовому розподілі поля покриття в досліджуваній системі плазма-конденсат. На рис.1.11а наведено типові квазістаціонарні знімки морфології поверхні при різних значеннях NOSr σ^2/u_E . Звідси випливає, що у випадку функціональної залежності інтенсивності флуктуацій зовнішнього потоку σ^2 від його сили u_E морфологія поверхні залишається незмінною: розділені кластери адсорбату сферичної форми. На рис.1.11б

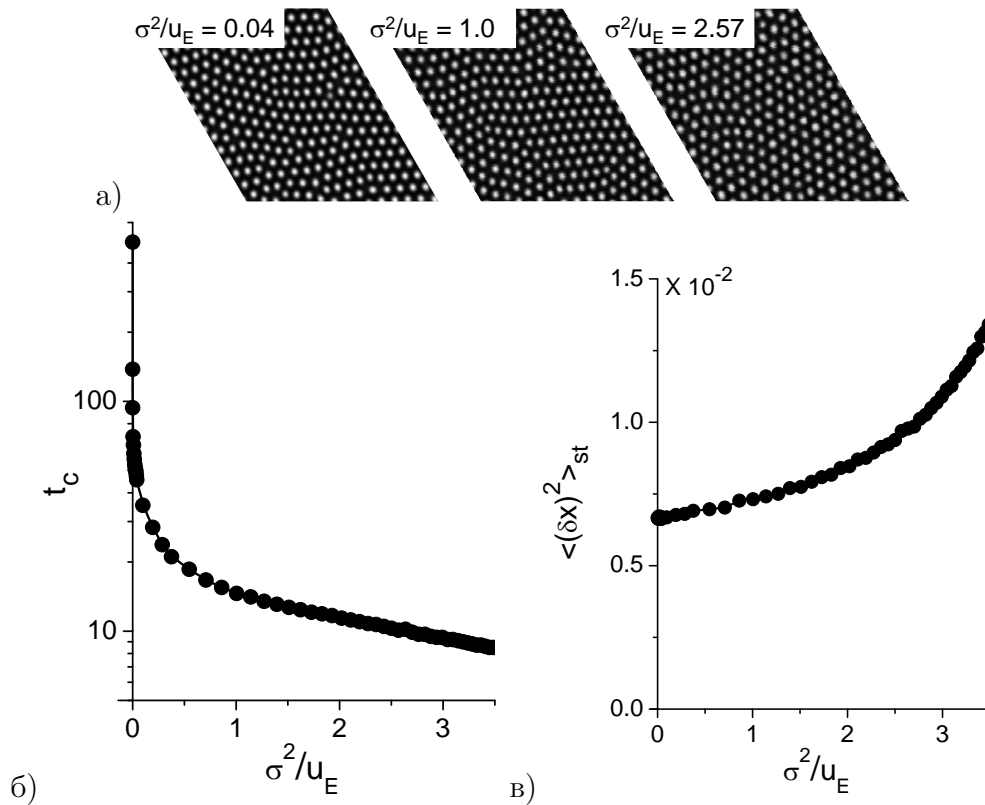


Рисунок 1.11 — Типові ілюстрації морфології поверхні при різних значеннях відношення σ^2/u_E (а). Залежності (б) інкубаційного періоду t_c та (в) стаціонарного значення параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle_{st}$ від співвідношення σ^2/u_E .

наведемо залежність моменту часу t_c , що визначає тривалість інкубаційного періоду та визначає початок процесів формування островів, від співвідношення σ^2/u_E . З рисунку видно, що у порівнянні з детермінованим випадком з $\sigma^2/u_E = 0$ збільшення NOSr приводить до зменшення значення часу t_c , що означає прискорення процесів упорядкування (структурування поверхні). При великих значеннях σ^2/u_E момент часу t_c незначно зменшується з ростом NOSr. Аналогічний результат був знайдений при фіксованому u_E шляхом збільшення

інтенсивності шуму σ^2 (див. рис.1.5). Однак у цьому випадку таке прискорення було пов'язане з флуктуаційно-індукованим перетворенням морфології поверхні від розділених кластерів адсорбату до розділених отворів всередині матриці адсорбату. У даному випадку функціональної залежності інтенсивності шуму σ^2 від середнього значення сили анізотропії u_E морфологія поверхні залишається незмінною (див. рис.1.11а). Отже, прискорення процесів упорядкування, що ілюструє рис.1.11б, пов'язано зі зростаючим впливом як детермінованої, так і стохастичної частин зовнішнього потоку, викликаного наявністю електричного поля поблизу підкладки. На рис.1.11в наведено розраховану залежність стаціонарного значення параметра порядку у квазі-стаціонарному випадку $\langle(\delta x)^2\rangle$ від співвідношення σ^2/u_E . З нього випливає, що параметр порядку монотонно зростає зі збільшенням σ^2/u_E . Останнє свідчить про формування більш впорядкованої (добре структурованої) поверхні при більших значеннях σ^2/u_E . Цей ефект також пов'язаний із одночасним впливом як сили анізотропії в переходах адатомів між шарами, так і її флуктуаціями, а не з морфологічними трансформаціями поверхні, як це було у випадку постійного значення u_E (див. рис.1.6 та рис.1.7).

Однією з цікавих задач при дослідженні процесів формування та росту відокремлених структур (поверхневі структури адсорбату, процеси зародження, зростання зерен й пор та ін.) є встановлення закону зростання середнього розміру таких об'єктів. Для розрахунку лінійного розміру R кожного кластера адсорбату будемо, як і у попередньому випадку, розраховувати його площу S . Після цього, оскільки острови адсорбату, представлені на рис.1.11а, мають сферичну форму, то лінійний розмір будемо знаходити зі співвідношення $S = \sqrt{S/\pi}$. Динаміку усередненого лінійного розміру $\langle R \rangle$ по всіх структурах адсорбату для детермінованої (порожні квадрати) та стохастичної (заповнені квадрати) систем показано на рис.1.12. Тут час відраховується від відповідного значення t_c (після закінчення інкубаційного періоду), яке падає з ростом відношенням σ^2/u_E (див. рис.1.11б). На залежності $\langle R \rangle(t)$ можна виділити чотири різних етапи еволюції середнього радіусу (див. криву з заповненими квадратами на рис.1.12). Перша стадія I відповідає утворенню островів адсорбату.

На цьому етапі концентрація адсорбату зростає з часом, і взаємодіючі адатоми самоорганізуються з утворенням окремих кластерів адсорбату. На стадії *II* сформовані невеликі відокремлені кластери адсорбату починають зростати (стадія росту). По завершенні стадії росту починається стадія огрублення (стадія *III*). На останній стадії *IV* реалізується квазістаціонарний режим еволюції середнього розміру островів адсорбату. З отриманих результатів випливає, що стадія росту характеризується степеневою асимптотикою $\langle R \rangle(t) \propto t^\delta$ з показником росту δ . Для детермінованої системи з $\sigma^2 = 0$ показник росту приймає значення 1, що свідчить про реалізацію лінійного закону росту середнього розміру островів адсорбату (див. криву з пустими квадратами на рис.1.12). У стохастичній системі зміна значення співвідношення σ^2/u_E приводить до зміни в значенні показника росту середнього розміру структур δ , як це показано на вставці на рис.1.12. Збільшення відношення σ^2/u_E забезпечує збільшення показника росту до $\delta \simeq 1.4$, що означає прискорення процесів росту лінійного розміру структур адсорбату за рахунок сумісного впливу як

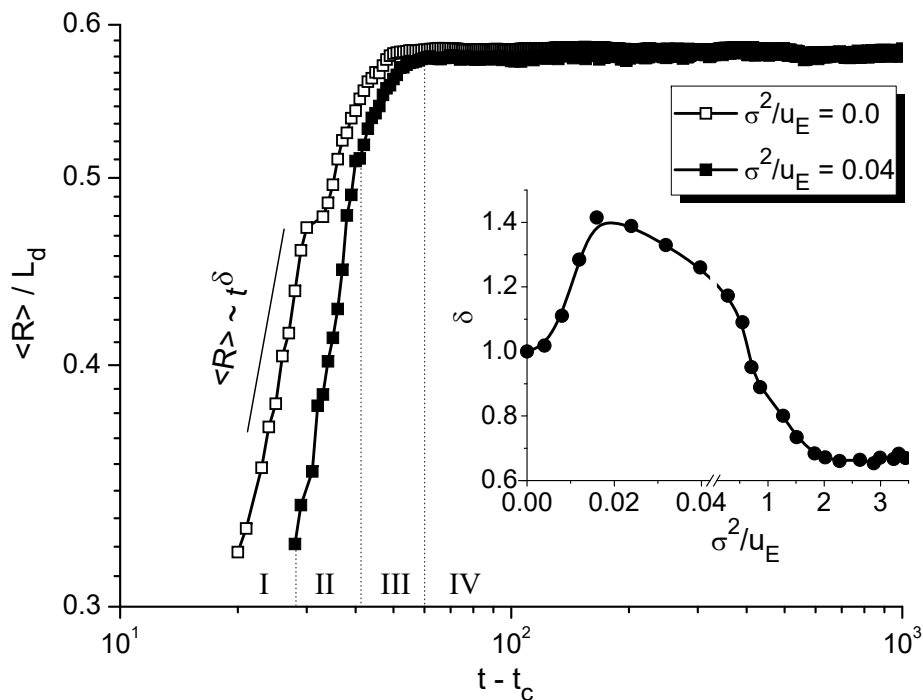


Рисунок 1.12 — Еволюція середнього лінійного розміру островів адсорбату $\langle R \rangle$ в одиницях дифузійної довжини, розрахованого після закінчення інкубаційного періоду t_c при різних значеннях співвідношення σ^2/u_E . На вставці наведено залежність показника росту середнього розміру δ від σ^2/u_E .

сили анізотропії, так і інтенсивності її флуктуацій. З подальшим зростанням співвідношенням значення σ^2/u_E показник росту δ приймає менші значення та при великих $\sigma^2/u_E > 2$ залишається не змінним, приймаючи значення $\delta \simeq 0.65$ (див. вставку на рис.1.12). Таким чином, відношення σ^2/u_E визначає динаміку росту середнього розміру структур адсорбату лише при невеликих значеннях інтенсивності флуктуацій $\sigma^2 < 2u_E$.

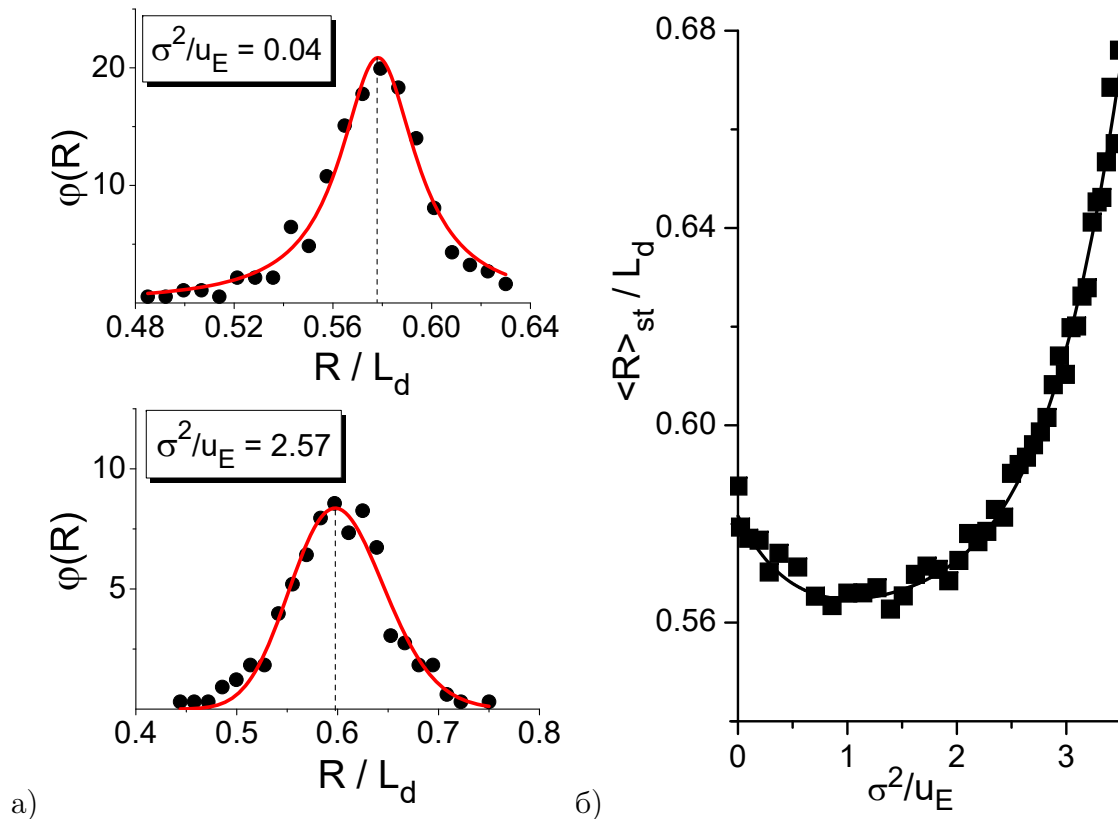


Рисунок 1.13 — Розподіли структур адсорбату за розмірами у квазі-стаціонарному режимі при різних значеннях співвідношення σ^2/u_E (а) та залежність середнього стаціонарного значення лінійного розміру структур адсорбату $\langle R \rangle_{st}$ в одиницях дифузійної довжини L_d від σ^2/u_E .

Далі розглянемо сумісний вплив зовнішнього потоку, викликаного електричним полем, та його флуктуацій на середній розмір відокремлених островів адсорбату у квазістаціонарному режимі. Відповідні результати показані на рис.1.13. Тут на рис.1.13а показано розподіл островів адсорбату за розмірами при малих ($\sigma^2/u_E = 0.04$) та великих ($\sigma^2/u_E = 2.57$) значеннях NOSr: символи відповідають числовим даним, які добре узгоджуються з розподілом Лоренца, показаним кривими. Видно, що збільшення відношення σ^2/u_E приводить до

збільшення ширини розподілу (дисперсії) $\varphi(R)$. Останнє свідчить про те, що острови адсорбату характеризуються різними розмірами. Крім того, найбільш ймовірне значення розміру острову адсорбату, що відповідає максимальному значенню $\varphi(R)$ (показано пунктирними лініями на рис.1.13а) збільшується зі зростанням співвідношення σ^2/u_E . Детальний аналіз впливу співвідношення σ^2/u_E на середній розмір островів адсорбату дозволяє отримати залежність $\langle R \rangle_{st}(\sigma^2/u_E)$, показану на рис.1.13б. Видно, що з ростом σ^2/u_E величина $\langle R \rangle_{st}$ зменшується, досягає мінімального значення при $\sigma^2/u_E \simeq 1$ і потім монотонно збільшується. Таким чином, спільне вплив детермінованої і стохастичної частин зовнішнього потоку при формуванні відокремлених островів адсорбату керує динамікою формування структур, впорядкованістю зростаючої поверхні, законом зростання середнього розміру островів адсорбату то його стаціонарним значенням.

1.4 Статистичні властивості зростаючого шару адсорбату на підкладці з багато-компонентного сплаву

Як було показано у попередньому розділі, динаміка процесів формування поверхневих структур може бути ефективно досліджена в рамках одно-шарової системи для концентрації адсорбату на певному шарі. У даному розділі ми будемо досліджувати динаміку еволюції адсорбату на першому шарі з урахуванням наявності другого шару. У такому разі, позначаючи концентрацію адсорбату на першому шарі як x , для концентрації адсорбату на другому шарі $y(x)$ маємо:

$$y(x) = (\sqrt{x} - \beta/2)^2, \quad (1.12)$$

де $\beta < 1$ визначається як відношення ширини тераси пірамідальної структури до лінійного розміру підкладки (див. рис.1). Будемо розглядати процеси конденсації в системі газ-конденсат, поклавши $u_E = 0$, з урахуванням переходів адатомів між першими двома шарами, рахуючи від підкладки. У такому

разі рівняння еволюції концентрації адсорбату на першому шарі в системі газ-конденсат набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \partial_t x = & \alpha(1-x)(1-y(x)) - x(1-y(x))e^{-2\epsilon x} \\ & + [u_\downarrow y(x)(1-x) - u_\uparrow x(1-y(x))] \\ & + \nabla \cdot [\nabla x - 2\epsilon\mu(x)\nabla \{x + \rho^2 \nabla^2 x\}] + \xi(t), \end{aligned} \quad (1.13)$$

де $\rho \equiv r_0/L_D \ll 1$ та використано $\rho^4 \rightarrow 0$. Величини u_\uparrow та u_\downarrow визначають ефективності (швидкості) переходів адсорбату від нижніх шарів до верхніх та від верхніх шарів до нижніх, відповідно. Останній доданок в рівнянні (1.13) представляє адитивний дельта-корельований Гаусовий шум із нульовим середнім та інтенсивністю, пропорційною до температури теплової бані.

Спочатку розглянемо діаграму стійкості, побудовану для досліджуваної тут системи (1.13) за рецептом, описаним у розділі 1.2. Рівняння на показник стійкості $\lambda(\kappa)$ має вигляд

$$\lambda(\kappa) = \left. \frac{dR(x, y(x))}{dx} \right|_{x=x_0} - \kappa^2 [1 - 2\epsilon\mu(x_0)(1 - \rho_0^2 \kappa^2)],$$

Діаграму стійкості $\varepsilon(\alpha)$ при різних співвідношеннях між u_\uparrow та u_\downarrow наведено на рис.1.14. При значеннях параметрів із середини відповідного клину на поверхні субстрату будуть формуватися просторві стійкі просторові структури. З рисунка випливає, що у випадку ізотропної системи з $u_\uparrow = u_\downarrow$ збільшення швидкості вертикального руху адатомів розширює область формування структур (див. суцільну та штрихову криві). При $u_\downarrow > u_\uparrow$, що характерно для індукованого тиском руху адатомів згори-вниз (див. [40]) область формування структур стає меншою, у порівнянні з ізотропним випадком. У протилежному випадку з $u_\uparrow > u_\downarrow$, характерним для дослідженого у попередньому розділі випадку систем плазма-конденсат з індукованим електричним полем рухом адатомів знизу вгору (див. [26, 50]) область формування структур стає більше (див. пунктирну криву).

Для проведення числового моделювання процесів формування та росту структур адсорбату на розупорядкованій підкладці (багато-компонентному сплаві) будемо вважати, що коефіцієнт поверхневої дифузії адсорбату D_{\leftrightarrow} є різним для різних елементів сплаву. Враховуючи, що кількість різних елемен-

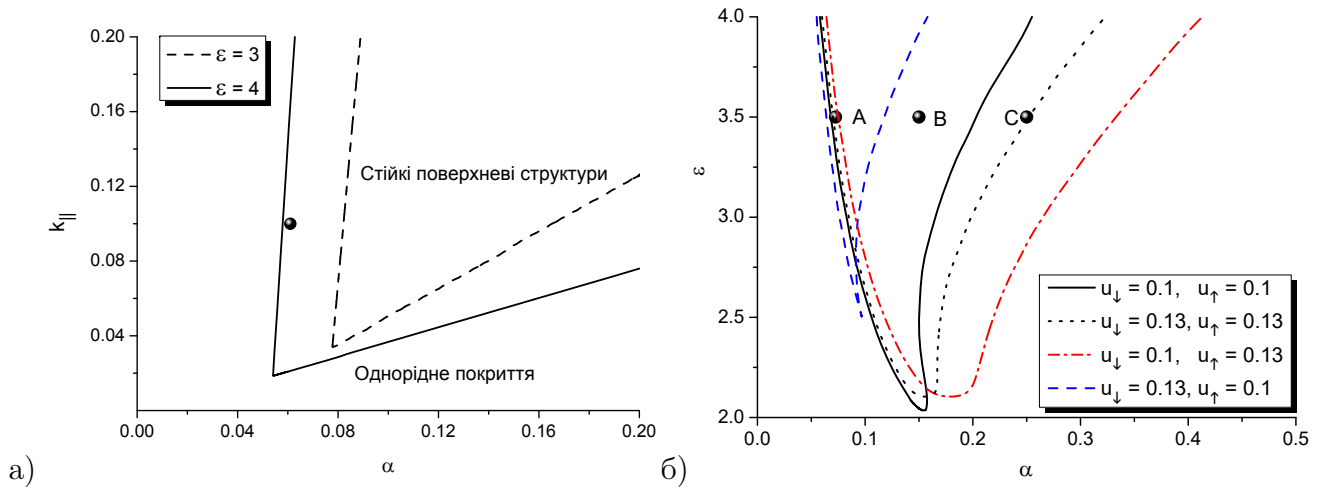


Рисунок 1.14 — Діаграми стійкості однорідного стану x_0 до неоднорідних збурень а) однакових швидкостях переходів адатомів між найближчими шарами ($k_{\parallel} = u_{\uparrow} = u_{\downarrow}$); та б) різних співвідношеннях між швидкостями переходу адатомів з нижніх шарів до верхніх (u_{\uparrow}) та з верхніх до нижніх (u_{\downarrow}). В середині відповідного клину можливим є формування стійких просторових структур.

тів у багато-компонентному сплаві зазвичай дорівнює 5, покладемо: $D_{\leftrightarrow}^m = D_{\leftrightarrow}^0 + z(m)\Delta$, де $m = 1 \dots 5$ визначає тип атомів у сплаві та $z(m) = -2 \dots 2$. У випадку представлення на дво-вимірній ґратці для коефіцієнта дифузії маємо $D_{\leftrightarrow}^m = D_{\leftrightarrow}^m(\mathbf{r})$ з випадково розподіленими значеннями $z(m) = z(\mathbf{r})$, що дається δ -корельованим замороженим просторовим безладом з $\langle D_{\leftrightarrow}^m(\mathbf{r}) \rangle = D_{\leftrightarrow}^0$; Δ означає ступінь розупорядкованості. У такому випадку для просторової похідної $\nabla^2 x(\mathbf{r})$ будемо використовувати стандартне представлення:

$$\nabla^2 x_{i,j} = \sum_{l=-1}^1 \sum_{k=-1}^1 D_{\leftrightarrow}^m (x_{i+l,j+k} - x_{i,j}) \Big|_{k \neq l}. \quad (1.14)$$

При проведенні числових симуляцій формулу (1.14) будемо використовувати для розрахунку дифузійного потоку адсорбату на підкладці.

При подальшому аналізі будемо досліджувати випадок $u_{\uparrow} = u_{\downarrow} = 0.1$ (суцільна крива на рис.1.14). Відомо, що збільшення коефіцієнту адсорбції приводить до трансформації в морфології поверхні від відокремлених структур адсорбату до відокремлених отворів в матриці адсорбату (див., наприклад, [42]). У подальшому зафіксуємо $\varepsilon = 3.5$ та розглянемо три різні значення коефіцієнту адсорбції α : біля лівої межі області реалізації структур (точка А на рис.1.14),

всередині області (точка В) та за її межами (точка С).

Спочатку проаналізуємо вплив розупорядкованості підкладки на динаміку структуроутворення в рамках числового експерименту. При проведенні числових симуляцій процесу формування поверхневих структур при конденсації на розупорядковану підкладку будемо будемо чисельно розв'язувати динамічне рівняння (1.13) на дво-вимірній трикутній ґратці лінійного розміру $L = N\ell$ з $N = 512$ комірок, крок інтегрування за простором $\ell = 0.5$ та крок інтегрування за часом $\Delta t = 10^{-4}$. При інтегруванні будуть використовуватися періодичні граничні умови; у якості початкових умов для поля концентрації адсорбату $x(\mathbf{r}, 0)$ будемо використовувати гаусів розподіл з $\langle x(\mathbf{r}, 0) \rangle = \langle (\delta x(\mathbf{r}, 0))^2 \rangle = 10^{-2}$, враховуючи умову $x(\mathbf{r}, 0) > 0$.

На рис.1.15 наведено типові ілюстрації квазістаціонарного розподілу адсорбату на поверхні субстрату (багато-компонентного сплаву), отримані при різних значеннях ступеню розупорядкування поверхні Δ (зліва направо) для різних значень коефіцієнту адсорбції α . На ілюстраціях просторовий розподіл адсорбату представлено у відтінках сірого кольору у наступний спосіб: білий колір відповідає областям підкладки з щільним покриттям адсорбату (щільна фаза з $x(\mathbf{r}) \rightarrow 1$, що визначає структури адсорбату); чорний колір визначає області підкладки з малою концентрацією адсорбату (розбавлена фаза). Залежності величини покриття підкладки адсорбатом від ступеня розупорядкованості підкладки Δ для різних значень коефіцієнту адсорбції α наведено на рис.1.16.

Спочатку проаналізуємо випадок малих значень коефіцієнту адсорбції α , що відповідає точці А на рис.1.14, показаний на рис.1.15а. З рисунка видно, що у випадку $\Delta = 0$, що відповідає конденсації на підкладку з одного типу атомів (чистий матеріал), у процесі осадження адатоми самоорганізуються у відокремлені кластери адсорбату, формуючи відокремлені структури на поверхні підкладки. Така двовимірна картина означає формування багато-шарових пірамідально-подібних структур адсорбату при тривалій конденсації. Врахування ненульового ступеня розупорядкованості підкладки приводить до формування більшої кількості відокремлених структур адсорбату, що характери-

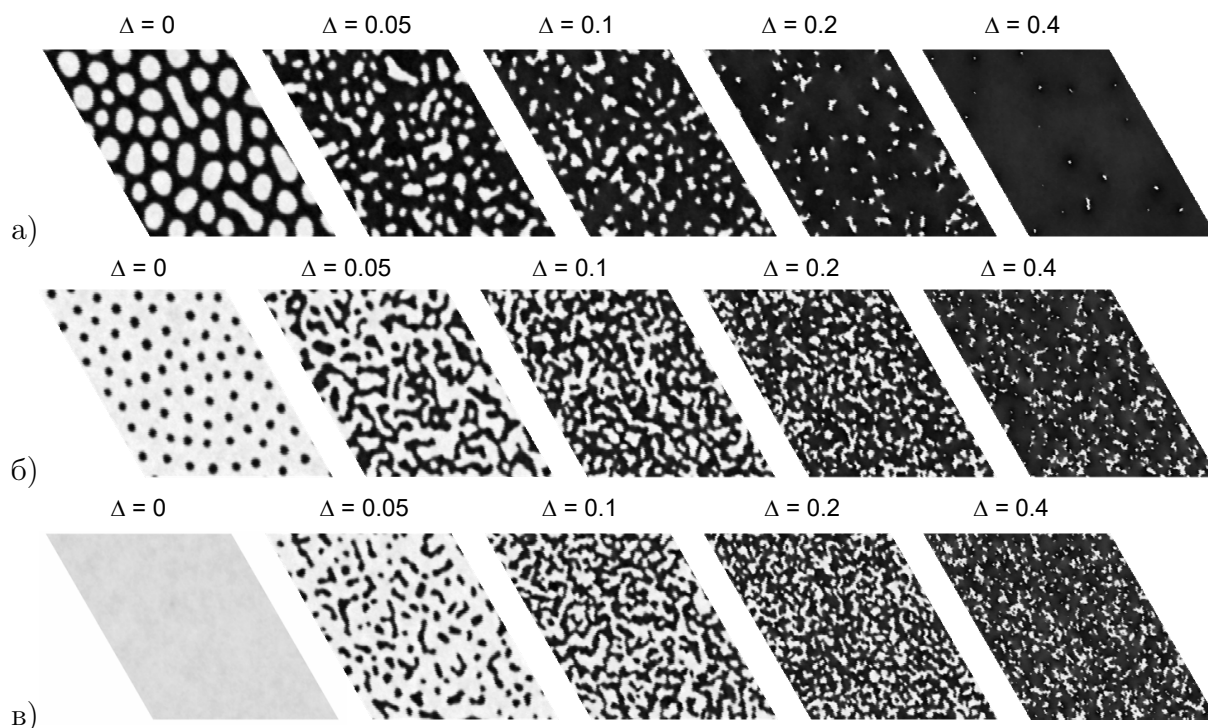


Рисунок 1.15 — Квазістаціонарні просторові розподіли адсорбату на підкладці з різним ступенем розупорядкованості Δ при: а) $\alpha = 0.07$; б) $\alpha = 0.15$; в) $\alpha = 0.25$.

зуються меншим середнім розміром (пор. знімки при $\Delta = 0$ та $\Delta = 0.05$ на рис.1.15а). Така ситуація відповідає конденсації на розупорядкований субстрат (багато-компонентний сплав) з атомами п'яти різних сортів, що характеризуються близькими за значеннями коефіцієнтами дифузії осаджуваного матеріалу. Збільшення ступеню розупорядкованості Δ приводить до подальшого зменшення лінійного розміру структур адсорбату та збільшення їх кількості. При досить великій різниці у коефіцієнтах дифузії осаджуваного матеріалу на комірках підкладки з різними атомами (див. розподіл адсорбату при $\Delta = 0.4$ на рис.1.15а) при малому тискові всередині камери адсорбція адатомів стає мало ймовірною і кількість малих структур суттєво зменшується. Відповідна залежність покриття спадає зі збільшення ступеня розупорядкованості підкладки Δ до нуля, приймаючи максимальне значення ~ 0.45 при $\Delta = 0$ (див. криву з трикутниками на рис.1.16).

При підвищених значення тиску всередині камери, що відповідає більшим значенням коефіцієнту адсорбції α (точка В на рис.1.14), на однорідному субстраті, що відповідає підкладці, яка складається з атомів одного сорту, адатоми

будуть самоорганізовуватися у у перколюючу матрицю з відокремленими отворами (див. рис.1.15б для випадку $\Delta = 0$. Врахування ненульового ступеня розупорядкованості підкладки $\Delta \neq 0$ приводить до реалізації розгалуженої структури кластерів адсорбату на поверхні (див. рис.1.15б для випадку $\Delta = 0.05$). Тут формуються як і відокремлені структури адсорбату, так і структури вакансій (отвори) неправильної форми. Збільшення ступеня розупорядкованості підкладки приводить до морфологічного переходу в структурі поверхні від конфігурації з відокремленими отворами в матриці адсорбату до конфігурації з відокремленими структурами адсорбату на підкладці (перехід від $\Delta = 0$ до $\Delta = 0.1$ на рис.1.15б). Критичне значення ступеня розупорядкованості Δ_t , яке визначає тип поверхневих структур (нано-острови чи нано-отвори) відповідає перетинанню покриттям значення $1/2$ (див. криву з пустими квадратами на рис.1.16): коли покриття підкладки адсорбатом більше за $1/2$ будуть формуватися відокремлені структури вакансій в матриці адсорбату (нано-отвори); у протилежному випадку будуть реалізовуватись відокремлені структури адсорбату на поверхні субстрату. Подальше збільшення ступеню розупорядкованості підкладки приводить до ефектів, аналогічних для випадку малих α (див. рис.1.15а).

Найбільш цікавий випадок з точки зору теорії самоорганізації реалізується при підвищених значеннях коефіцієнту адсорбції α , а саме, поза областю параметрів системи, коли при конденсації на однорідну підкладку (чистий матеріал з одним сортом атомів) формування структур є неможливим (точка С на рис.1.14). Типовий приклад просторового розподілу адсорбату на однорідній підкладці у квазі-стаціонарному режимі наведено на рис.1.15в при $\alpha = 0.25$ та $\Delta = 0$. Тут в ізотропній системі адсорбат рівномірно покриває підкладку, що приводить до формування майже гладкої поверхні першого шару з покриттям рівним 1 (див. криву з кружками на рис.1.16). Такий сценарій при багато-шаровій конденсації приведе до монотонного пошарового росту товщини покриття. При цьому Врахування неоднорідності підкладки при фіксованих значеннях інших параметрів системи приводить до реалізації стійких структур отворів в матриці адсорбату (див. рис.1.15в при $\Delta = 0.05$). Таким чином, нео-

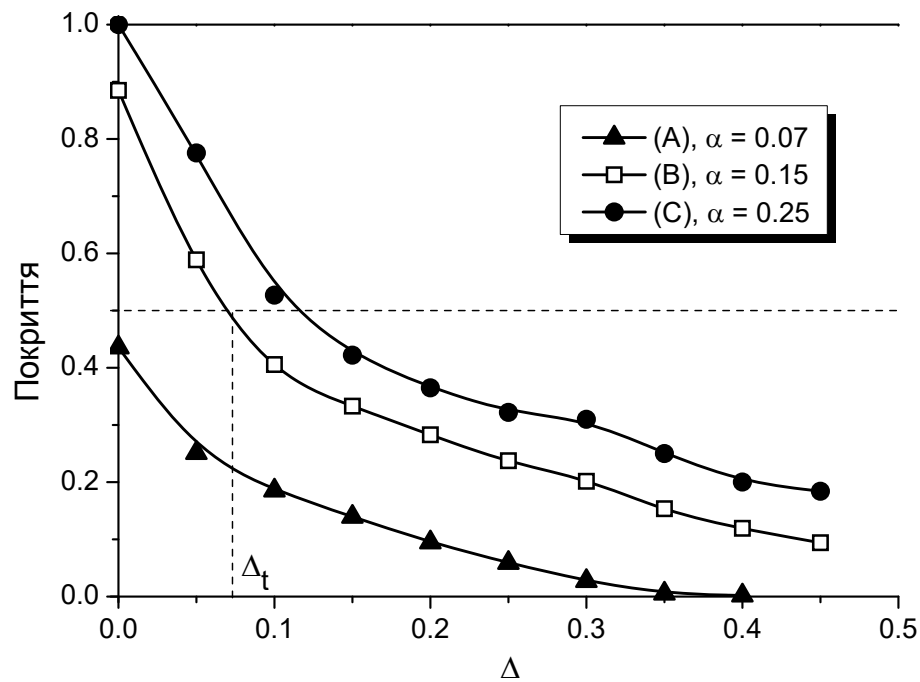


Рисунок 1.16 — Залежності покриття адсорбатом підкладки від ступеня розупорядкованості підкладки Δ при різних значеннях коефіцієнта адсорбції α .

днорідність підкладки (наявність декількох типів атомів в структурі поверхні субстрату) індукує процеси структуроутворення при конденсації. Із подальшим збільшенням ступеня розупорядкованості підкладки Δ реалізується сценарій подібний до випадку $\alpha = 0.15$, що представлено на рис.1.15б. Проте критичне значення ступеня розупорядкованості підкладки Δ_t , що відповідає за морфологічний перехід в структурі поверхні, та значення покриття підкладки адсорбатом збільшуються з ростом коефіцієнта адсорбції α (пор. криві з квадратами та кружками на рис.1.16).

Більш детально динаміку процесів упорядкування та структуроутворення можна проаналізувати, досліджуючи еволюцію двох перших статистичних моментів поля просторового розподілу концентрації адсорбату, а саме, середньої концентрації адсорбату на підкладці, визначеної у стандартний спосіб, $\langle x \rangle(t)$ та дисперсію поля концентрації адсорбату $\langle (\delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$. Величина $\langle (\delta x)^2 \rangle$ відіграє роль параметра порядку у задачах фазового розшарування та структуроутворення. Як і у попередньому розділі динаміка параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle$ визначає динаміку просторового упорядкування адсорбату на підкладці.

Розглянемо найбільш цікавий випадок зміни морфології поверхні при ва-

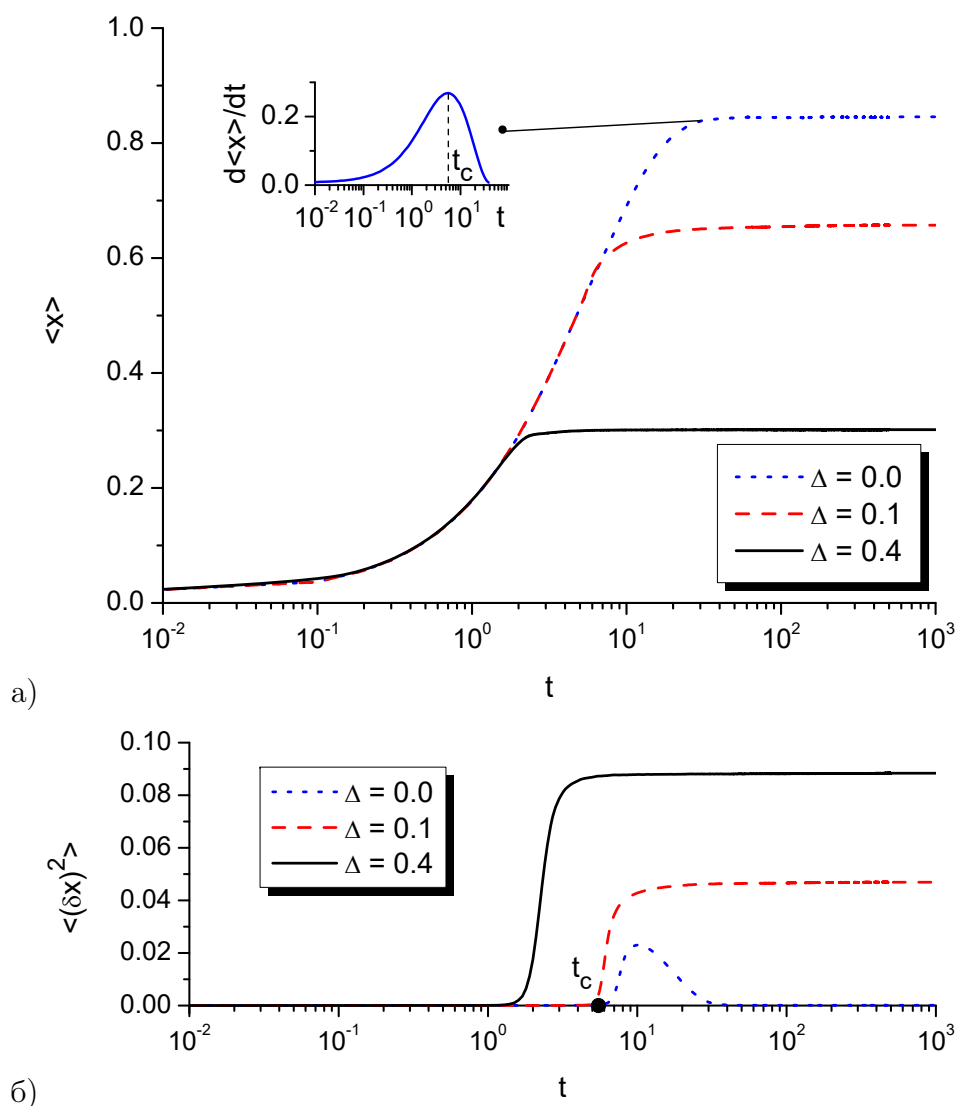


Рисунок 1.17 — Еволюція (а) середньої концентрації адсорбату та (б) дисперсії поля концентрації адсорбату при різних значеннях ступеня розупорядкованості підкладки Δ та: $\alpha = 0.25$, $\varepsilon = 3.5$.

ріюванні ступеню розупорядкованості підкладки за підвищених значень коефіцієнту адсорбції $\alpha = 0.25$ (див. рис.1.15в). Часові залежності середньої концентрації адсорбату $\langle x \rangle$ та параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle$ наведено на рис.1.18а та рис.1.18б, відповідно. Спочатку розглянемо випадок конденсації на однорідну підкладку, що представляє матеріал з одним типом атомів зі ступенем розупорядкованості $\Delta = 0$. Відповідні залежності середньої концентрації адсорбату та параметра порядку наведено пунктирними кривими на рис.1.18а та рис.1.18б, відповідно. З рисунків видно, що на початкових стадіях конденсації середня концентрація адсорбату зростає з часом. При цьому швидкість росту концен-

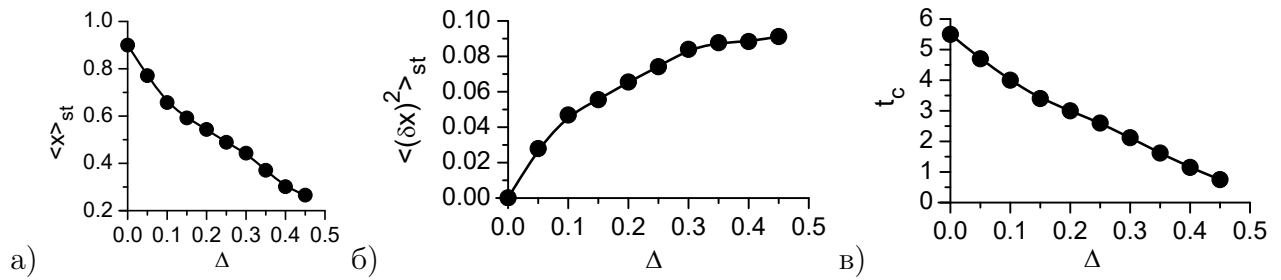


Рисунок 1.18 — Залежності (а) стаціонарного значення середньої концентрації адсорбату $\langle x \rangle_{st}$, (б) стаціонарного значення параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle_{st}$ та (в) тривалості інкубаційного періоду t_c , необхідного для початку реалізації структуроутворення, від Δ та:

$$\alpha = 0.25, \varepsilon = 3.5.$$

трації адсорбату, визначеної у стандартний спосіб: $d_t \langle x \rangle$, зростає (див. вставку на рис.1.18а). Параметр порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle$ приймає нульові значення упродовж інкубаційного періоду t_c (див. пунктирну криву на рис.1.18б). Останнє є свідченням однорідного розподілу адсорбату на підкладці. При подальшому осадженні середня концентрація адсорбату продовжує зростати з часом, тоді як швидкість росту набуває свого максимального значення у момент часу $t = t_c$. При цьому параметр порядку починає зростати з моменту часу $t = t_c$ (див. пунктирну криву на рис.1.18б). Зростання параметра порядку свідчить про реалізацію процесів структуроутворення адсорбату з формуванням областей щільної та розбавленої (збідненої на адсорбат) фаз. При тривалому осадженні ($t > t_c$) середня концентрація адсорбату поступово досягає свого стаціонарного значення $\langle x \rangle_{st} \simeq 0.9$ (див. пунктирну криву на рис.1.18а), а швидкість росту концентрації адсорбату спадає до нуля. При цьому параметр порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle$ при $t > t_c$ зростає з часом, набуває максимального значення та спадає до нуля (див. пунктирну криву на рис.1.18б). Така часова поведінка параметра порядку означає формування лише тимчасових (перехідних) структур з підвищенням концентрації адсорбату у наступний спосіб: 1) формування відокремлених областей фази збагаченої на адсорбат в розбавленій матриці; 2) формування відокремлених областей фази, збідненої на адсорбат, у щільній матриці; 3) однорідний розподіл адсорбату з високою концентрацією на всій підкладці у стаціонарному режимі.

Порівнюючи часові залежності середньої концентрації адсорбату при рі-

зних значеннях ступеня розупорядкованості підкладки Δ можна бачити, що збільшення Δ приводить до прискорення переходу системи в стаціонарний режим та зменшення значення стаціонарної концентрації адсорбату $\langle x \rangle_{st}$. При цьому, стаціонарне значення параметра порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle_{st}$ зростає з часом (див. рис.1.18в посередині), означаючи формування більш впорядкованої структури адсорбату при підвищених значеннях ступеня розупорядкованості підкладки: концентрація адсорбату в областях щільної фази прямує до одиниці, тоді як в областях розбавленої фази — до нуля. Крім того, збільшення ступеня розупорядкованості підкладки Δ приводить до зменшення інкубаційного часу t_c (див. рис.1.18в справа), а отже, до прискорення процесів структурування адсорбату на поверхні.

Далі, проаналізуємо вплив ступеня розупорядкованості підкладки на статистичні властивості стаціонарної просторової конфігурації адсорбату. Отримані поверхневі структури адсорбату при підвищених значеннях коефіцієнту адсорбції α та ступеня розупорядкованості Δ мають негладку структуру (див. рис.1.15б та рис.1.15в при $\Delta > 0.1$). Такі покриття є типовим прикладом фрактальних об'єктів, що характеризуються фрактальною розмірністю, відмінною від топологічної (у даному випадку для моношару топологічна розмірність простору 2). Для дослідження впливу ступеня розупорядкованості підкладки на фрактальну розмірність поверхні будемо аналізувати геометричну розмірність (або розмірність Хаусдорфа D_0) та кореляційну розмірність D_2 отриманих структур при $\alpha = 0.15$ та $\alpha = 0.25$ та різних значеннях Δ .

Для розрахунку розмірності Хаусдорфа D_0 будемо використовувати стандартний алгоритм покриття поверхні квадратами різною довжиною сторони l та підраховувати кількість таких квадратів $N(l)$, необхідних для покриття всього адсорбату на поверхні підкладки. У такому разі геометрична розмірність Хаусдорфа знаходиться як кут нахилу залежності $\log N(l)$ від $\log(1/l)$ при зміні довжини сторони квадратів l , що математично виражається формулою:

$$D_0 = \lim_{l \rightarrow 0} \log N(l) / \log(1/l).$$

Кореляційна фрактальна розмірність D_2 може бути розрахована досліджуючи

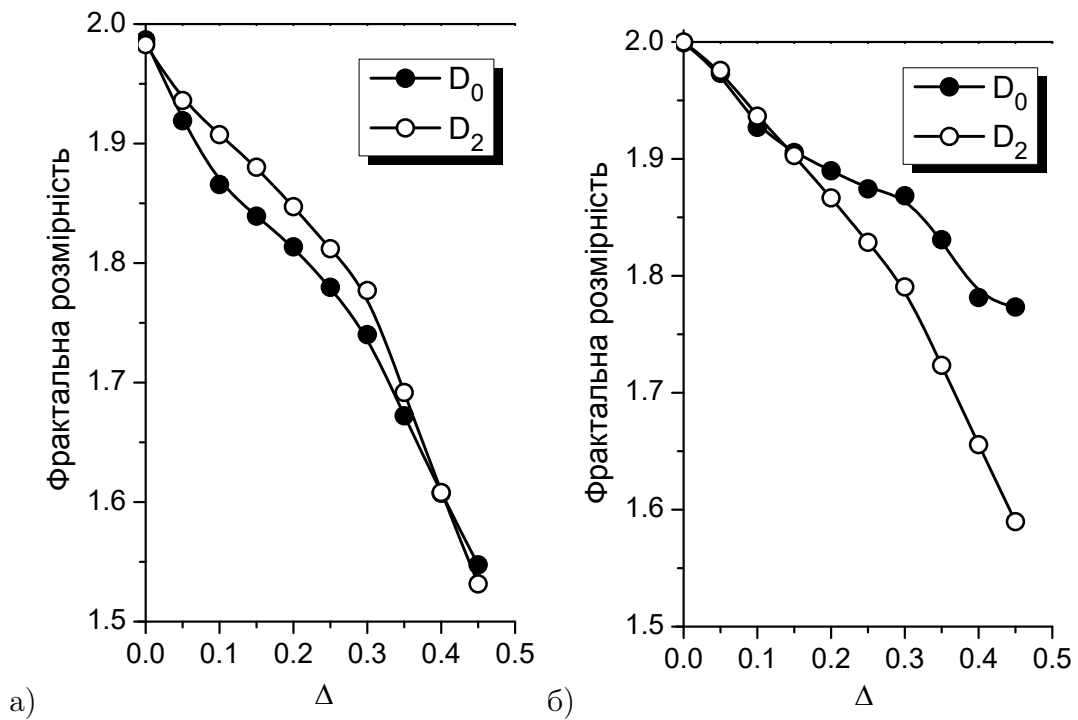


Рисунок 1.19 — Геометрична фрактальна розмірність (розмірність Хаусдорфа) D_0 та кореляційна фрактальна розмірність D_2 отриманих поверхонь при зміні ступеня розупорядкованості підкладки Δ при $\varepsilon = 3.5$ та: а) $\alpha = 0.15$, б) $\alpha = 0.25$.

парну просторову ϵ кореляційну функцію C_p , визначену у наступний спосіб:

$$C_p(\mathbf{r}, t) = \langle x(\mathbf{r} + \mathbf{r}', t)x(\mathbf{r}, t) \rangle.$$

За умови відсутності характерного просторового масштабу, кореляційна функція $C_p(r)$ має поводити себе алгебраїчним чином, тобто, $C_p(r) \propto 1/r^\beta$, де степеневий показник β пов'язаний із кореляційною фрактальною розмірністю D_2 та топологічною розмірністю поверхні $d = 2$ наступним чином: $\beta = d - D_2$. Таким чином, величини $D_0 < d$ та $D_2 < d$ характеризують фрактальність поверхні, що аналізується. Розраховані значення геометричної та кореляційної фрактальних розмірностей отриманих поверхонь при зміні ступеня розупорядкованості підкладки Δ наведено на рис.1.19а та рис.1.19б при $\alpha = 0.15$ та $\alpha = 0.25$, відповідно.

Розглянемо спочатку випадок помірних значень коефіцієнту адсорбції, $\alpha = 0.15$, коли при адсорбції на однорідну підкладку $\Delta = 0$ формуються відокремлені отвори в матриці адсорбату (див. рис.1.15б). З рис.1.19а видно, що за умови однорідного складу підкладки (при $\Delta = 0$) фрактальна розмірність поверхні

$D_0 \simeq D_2$ збігається з топологічною розмірністю простору $d = 2$. Останнє свідчить про формування добре структурованої поверхні зі структурами, що мають регулярну (гладку) структуру. При цьому малі відхилення значень кожної розрахованої фрактальної розмірності від топологічної $d = 2$ у випадку $\Delta = 0$ спостерігаються завдяки наявності адитивних флуктуацій у досліджуваній системі, та знаходяться в рамках похибки обчислень. При збільшенні ступеня розупорядкованості поверхні Δ значення як геометричної фрактальної розмірності D_0 , так і кореляційної фрактальної розмірності D_2 зменшується. Це є свідченням формування негладкої структури покриття підкладки — реалізації фрактальної структури просторового розподілу адсорбату під час конденсації. Варто відзначити, що у випадку помірних значень коефіцієнту адсорбції, $\alpha = 0.15$, незалежно від значення ступеня розупорядкованості значення геометричної фрактальної розмірності D_0 збігається зі значенням кореляційної фрактальної розмірності D_2 (див. рис.1.19а). У випадку $D_0 \simeq D_2$ досліджуваний об'єкт є типовим прикладом монофракталів, які характеризуються єдиним значенням фрактальної розмірності [55].

Далі проаналізуємо зміну фрактальних властивостей поля адсорбату при підвищених значеннях коефіцієнту адсорбції $\alpha = 0.25$. Тут в системі з ізотропною поверхневою дифузією (при $\Delta = 0$) адсорбат однорідно покриває всю підкладку (див. рис.1.15в при $\Delta = 0$), і для сформованого, в результаті конденсації, моношару адсорбату маємо $D_0 = D_2 = 2$ (див. рис.1.19б). Збільшення ступеня розупорядкованості підкладки Δ приводить до структурування поля адсорбату на підкладці з формуванням структур з негладкою межею. Такі структури характеризуються фрактальними властивостями, оскільки як D_0 так і D_2 мають значення менші за топологічну розмірність простору $d = 2$. При цьому для не досить великих значень ступеня розупорядкованості поверхні $\Delta < 0.2$ реалізується ситуація, аналогічна до випадку помірних значень коефіцієнту адсорбції $\alpha = 0.15$, коли $D_0 \simeq D_2$. При досить сильній анізотропії поверхневої дифузії адсорбату, викликаної підвищеним значенням ступеня розупорядкованості підкладки $\Delta \geq 0.2$, реалізується ситуація, коли кореляційна фрактальна розмірність досліджуваної поверхні приймає значення менші

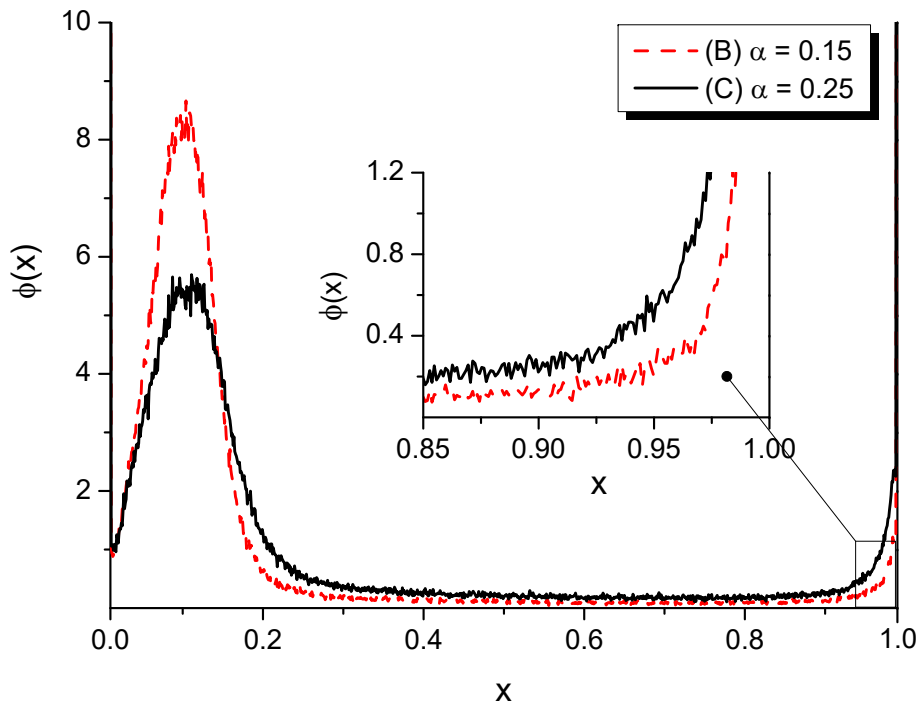


Рисунок 1.20 — Розподіли концентрації адсорбату за значеннями для квазі-стаціонарної просторової конфігурації структурованого моношару при $\Delta = 0.45$ та різних значеннях коефіцієнту адсорбції α .

ніж геометрична фрактальна розмірність ($2 > D_0 > D_2$ на рис.1.19б). Останнє свідчить про наявність спектру фрактальних розмірностей для такої поверхні, що є типовим прикладом мультифракталів [55].

Для детального аналізу фрактальних властивостей просторового розподілу адсорбату на підкладці з високим ступенем розупорядкованості $\Delta > 0.2$ розглянемо залежності розподілу концентрації адсорбату на підкладці при фіксованому $\Delta = 0.45$ за різних значеннях коефіцієнту адсорбції α за значеннями, показані на рис.1.20. Тут перший пік, який знаходиться при $x \simeq 0.1$, відповідає за формування розбавленої фази, збідненої на адсорбат (темні ділянки на рис.1.15б,в). Другий пік в розподілі $\phi(x)$ при $x \rightarrow 1$ відповідає щільній фазі з високою концентрацією адсорбату, що представляється відокремленими структурами адсорбату. При аналізі фрактальних властивостей просторового розподілу адсорбату важливу роль відіграє розподіл $\phi(x)$ в околі $x \rightarrow 1$ (див. вставку на рис.1.20). Порівнюючи результати для $\alpha = 0.15$ (штрихова крива) та $\alpha = 0.25$ (суцільна крива) видно, що дисперсія розподілу $\phi(x)$ у границі великих значень концентрації адсорбату x збільшується зі збільшенням значе-

ння коефіцієнту адсорбції α . Останнє свідчить про те, що поверхня структур адсорбату при підвищених $\alpha = 0.25$ стає більш негладкою (фрактальною), що дає додатковий внесок до кореляційної розмірності D_2 . Таким чином, при підвищених значеннях коефіцієнту адсорбції збільшення ступеня розупорядкованості підкладки приводить до морфологічного переходу в структурі поверхні від монофракталу при $\Delta < 0.2$ до мультифракталу при $\Delta \geq 0.2$.

Далі проаналізуємо статистичні властивості просторового розподілу адсорбату на підкладках з різним ступенем розупорядкованості Δ , досліджуючи кількість відокремлених островів адсорбату та їх середній розмір у квазі-стаціонарному режимі. Аналогічно до попереднього розділу для розрахунку кількості структур N та розміру R кожної структури будемо використовувати алгоритм перколюючого кластера, визначаючи R як радіус кола з площею S , що відповідає площі, зайнятої відповідним кластером адсорбату. Розраховані залежності $N(\Delta)$ та $\langle R \rangle(\Delta) = N^{-1} \sum_i^N R(\Delta)$ при різних значеннях коефіцієнту адсорбції α наведено на рис.1.21а та рис.1.21б, відповідно. Тут розрахунки проводились при $\Delta \geq 0.15$, коли для обох випадків поверхня характеризується наявністю відокремлених структур адсорбату (див. рис.1.15а,б).

Проаналізуємо спочатку вплив сили анізотропії поверхневої дифузії адсорбату на зміну кількості структур (див. рис.1.21а). Видно, що при невеликому ступені розупорядкованості підкладки $\Delta < 0.25$ збільшення коефіцієнту адсорбції α приводить до зменшення кількості структур. Цей ефект пояснюється тим, що при підвищених значеннях коефіцієнту адсорбції $\alpha = 0.25$ структурування поверхні реалізується лише за наявності анізотропії поверхневої дифузії адсорбату ($\Delta > 0$), порівняно із випадком $\alpha = 0.15$. При збільшенні ступеня розупорядкованості поверхні кількість структур адсорбату монотонно зростає. При цьому, для підкладок із сильною анізотропією поверхневої дифузії (з $\Delta > 0.25$) більші значення коефіцієнту адсорбції індукують формування більшої кількості відокремлених структур адсорбату на підкладці (див. рис.1.21а).

Далі розглянемо залежності середнього лінійного розміру структур адсорбату $\langle R \rangle$ в одиницях дифузійної довжини L_D від ступеня розупорядкованості підкладки Δ при різних значеннях коефіцієнту адсорбції α , наведе-

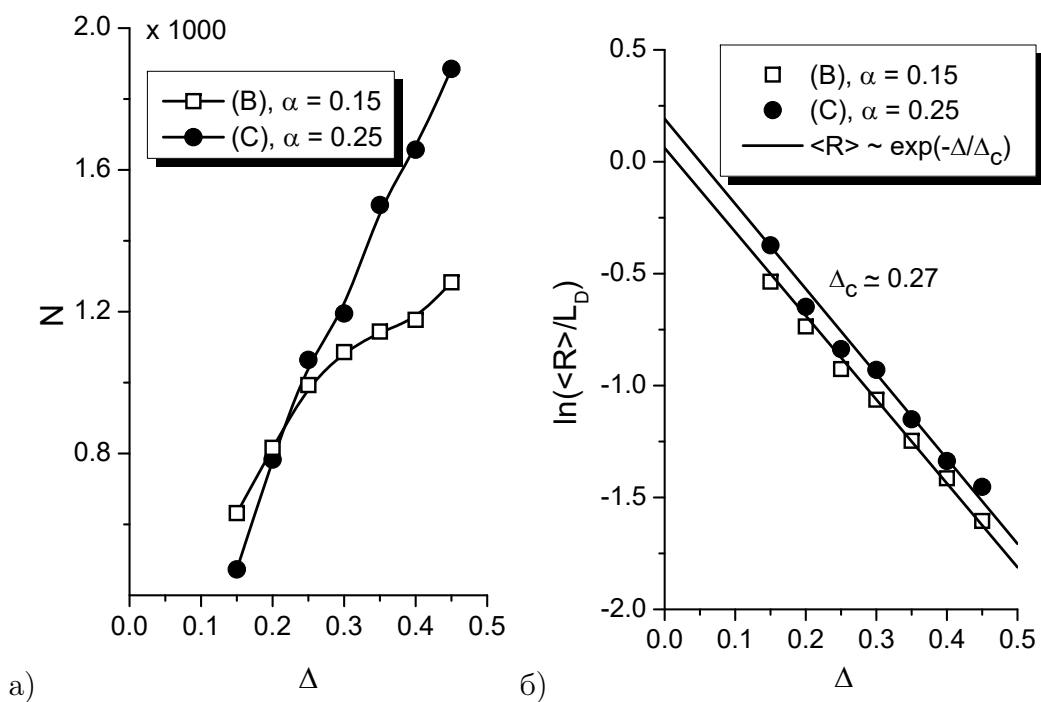


Рисунок 1.21 — Залежності кількості N відокремлених структур адсорбату (а) та середнього лінійного розміру $\langle R \rangle$ структур адсорбату (б) від ступеня розупорядкованості підкладки Δ при $\varepsilon = 3.5$ та різних значеннях коефіцієнту адсорбції α .

ні на рис.1.21б. При цьому для ілюстрації певної універсальності залежності $\langle R(\Delta) \rangle$ на рисунку по осі ординат відкладено $\ln(\langle R(\Delta) \rangle)$. Таке представлення надає змогу провести апроксимацію числових даних (представлених символами) аналітичними кривими, що відповідають експоненціальним залежностям $\langle R \rangle \propto \exp(-\Delta/\Delta_c)$ (суцільні прямі). З отриманих результатів видно, що незалежно від коефіцієнту адсорбції α обидві залежності добре узгоджуються з апроксимаційними кривими. Більш того, параметр апроксимації $\Delta_c \approx 0.27$ не залежить від коефіцієнту адсорбції.

Використовуючи інформацію про лінійний розмір кожної із структур адсорбату у квазі-стаціонарному режимі при фіксованих значеннях параметрів системи можна встановити розподіл структур адсорбату за розмірами. Типовий розподіл структур за розмірами наведено на рис.1.22 у подвійному логарифмічному масштабі. З рисунка видно, що з отриманого чисельного розподілу (показаного символами) можна виділити інтервал розмірів, де розподіл є універсальним і характеризується степеневою асимптотикою $\sim R^{-\delta}$. При цьому, збільшення ступеня розупорядкованості підкладки (сили анізотропії поверхне-

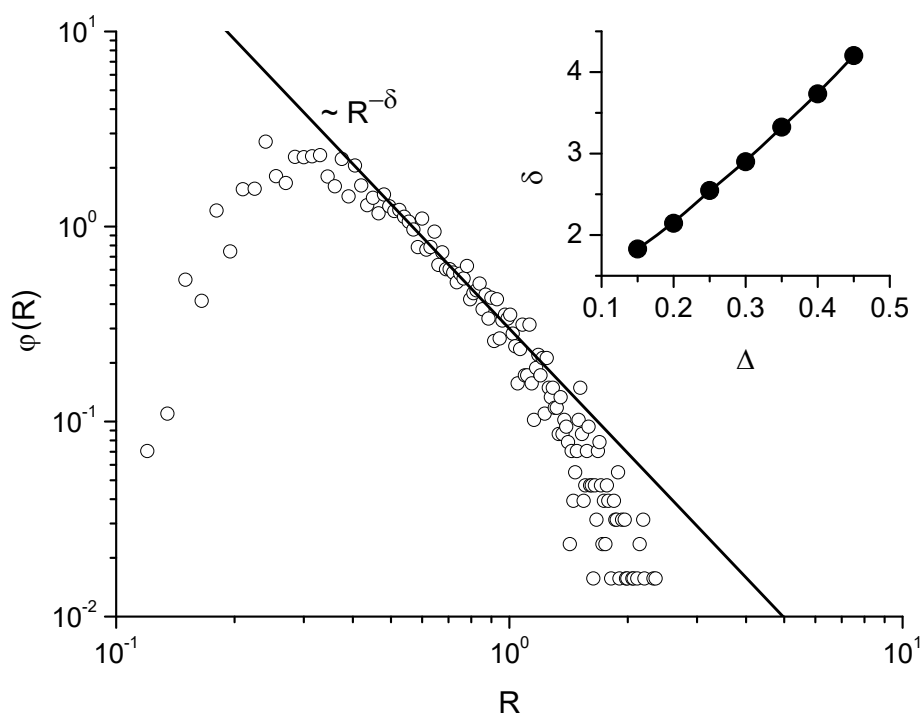


Рисунок 1.22 — Типовий розподіл структур адсорбату за розмірами та залежність показника δ від ступеня розупорядкованості підкладки Δ (на вставці) при $\varepsilon = 3.5$ та $\alpha = 0.25$.

вої дифузії адсорбату) приводить до квазі-лінійного збільшення значення показника ступеня δ , як це показано на вставці до рис.1.22.

1.5 Формування перколюючих кластерів адсорбату в системі з анізотропною дифузією, викликаною ефектами електроміграції

У цьому розділі нами буде проаналізовано процеси формування видовжених кластерів адсорбату досліджуючи конденсацію моношару на підкладку, до якої підведене електричне поле. У випадку, коли до підкладки прикладене зовнішнє електричне поле у горизонтальному напрямку, то результуючі зміни у внутрішньому локальному електричному полі приводять до виникнення направленої індукованої сили $\mathbf{F}_{e1} = eZ\mathbf{E}$. Тут e це заряд електрона, а напруженість прикладено до матеріалу електричного поля \mathbf{E} визначається різницею

потенціалів $\phi = \Phi_1 - \Phi_2$ у вигляді $E = -\phi/L$, де L це відстань між анодом і катодом (у даному випадку, лінійний розмір підкладки). Величина і напрям сили виражається ефективною валентністю Z , яка є негативною для більшості металів, так що атоми рухаються у напрямку, протилежному електричному полю, тобто, в напрямку потоку електронів.

Таким чином, із наведеного випливає, що наявність різниці потенціалів на протилежних сторонах підкладки буде індукувати додатковий направлений рух адатомів вздовж підкладки. Цей ефект може приводити до зміни морфології покриття у порівнянні із ізотропним випадком осадження без наявності зовнішнього поля. Для проведення числового моделювання процесів формування та росту поверхневих структур при конденсації з урахуванням ефектів електроміграції скористаємося моделлю одношарового осадження з урахуванням наявності другого шару, наведеною у попередньому розділі. Будемо вважати, що підкладка складається з атомів одного сорту виключаючи анізотропію підкладки. При моделюванні на квадратній ґратці ефекти електроміграції врахуємо у такий спосіб, що поверхнева дифузія адатомів визначається ізотропною дифузією з коефіцієнтом D_{\leftrightarrow}^0 та індукованим електричним полем направленим рухом адатомів в одному з напрямків з коефіцієнтом дифузії D_{em} . Враховуючи, що такий рух адатомів можливий лише на вільні від адсорбату місця, то для дискретного представлення потоку невзаємодіючих адатомів покладемо: $\mathbf{J}_0 = -D_{\leftrightarrow} \nabla x(\mathbf{r}) \pm D_{em} \nabla_x x(\mathbf{r})$, враховуючи що електричне поле направлене вздовж напрямку x ; знак \pm визначається напрямком електричного поля (взаємним розташуванням катоду та аноду).

Для проведення числового моделювання процесів формування відокремлених структур адсорбату при наявності додаткового, індукованого електричним полем, направленого поверхневого потоку адсорбату зафіксуємо основні параметри системи: $\varepsilon = 4$, $\alpha = 0.06$, $k_{\parallel} = 0.1$ (див. рис.1.14а та позначену на ньому точку). Типові знімки просторового розподілу адсорбату у квазі-стаціонарному режимі при різних значеннях коефіцієнту індукованої направленої дифузії D_{em} наведено на рис.1.23. Тут електричне поле направлене зліва направо. З рисунка видно, що у випадку $D_{em} = 0$ при фіксованих інших параметрах системи, у ква-

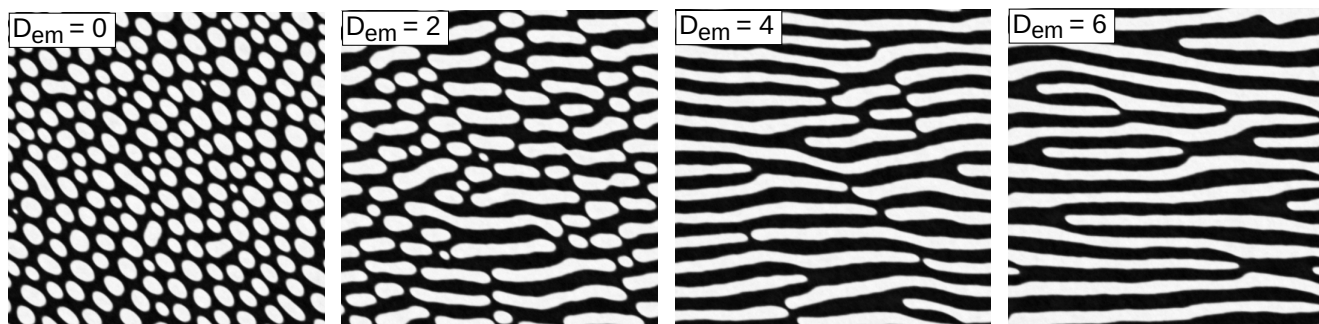


Рисунок 1.23 — Типові знімки просторового розподілу адсорбату у квазі-стаціонарному режимі при різних значеннях коефіцієнту індукованої направленої дифузії D_{em} та $\varepsilon = 4$, $\alpha = 0.06$, $k_{||} = 0.1$ (див. рис.1.14а та позначену на ньому точку).

зістаціонарному випадку на поверхні підкладки при конденсації формуються відокремлені структури адсорбату, переважно симетричної круглої форми. При цьому переважна більшість структур адсорбату характеризується певним розміром (площею, яку займає структура на поверхні підкладки S), який визначається основними параметрами системи (див. розподіл структур адсорбату за площею $S/\langle S \rangle$ на рис.1.24а). Збільшення коефіцієнту індукованої направленої дифузії D_{em} (рис.1.23 при $D_{em} = 2$), який є пропорційним до напруженості підведеного до підкладки електричного поля, приводить до реалізації ефектів електроміграції, і, як наслідок, до формування видовжених структур адсорбату у напрямку, паралельному до напрямку електричного поля. При цьому, варто відзначити, що лінійний розмір видовжених структур адсорбату у напрямку, перпендикулярному до прикладеного електричного поля, залишається незмінним порівняно із випадком D_{em} . Відповідний розподіл структур адсорбату за площею $S/\langle S \rangle$ при $D_{em} = 2$ наведено на рис.1.24б. Тут реалізується дво-піковий розподіл, який свідчить про два найбільш імовірних розміри структур адсорбату: рівновісні (ізотропні) та видовжені структури. Для невеликих значень коефіцієнта направленої дифузії пік при $S < \langle S \rangle$ є більшим за інший. З подальшим збільшенням напруженості підведеного до підкладки електричного поля ймовірність реалізації рівновісних структур стає малою і всі структури адсорбату характеризуються двома різними лінійними розмірами R_x та R_y , у напрямку паралельному та перпендикулярному до напрямку підведеного електричного поля, відповідно (див. рис.1.23 при $D_{em} = 4$); відповідний розподіл структур за

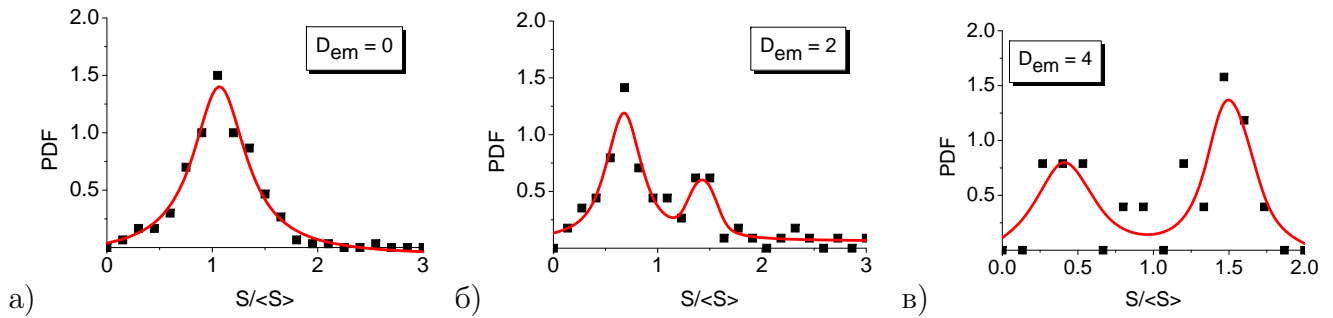


Рисунок 1.24 — Розподіли структур адсорбату за площею $S/\langle S \rangle$ для структур, наведених на рис.1.23 при $D_{em} = 0, 2, 4$.

площею має один пік (див. рис.1.24в). Тут реалізується ситуація, коли у двописовому розподіл пік при $S > \langle S \rangle$ є вищим за інший. З рисунка 1.23 при $D_{em} = 4$ видно, що тут формуються як відокремлені структури адсорбату на підкладці, так і перколюючий кластер адсорбату, який з'єднує лівий та правий край підкладки. Варто відзначити, що перколюючі кластери адсорбату також можуть реалізовуватись і в ізотропній моделі конденсації без зовнішнього поля, наприклад при підвищенні коефіцієнту адсорбції α [42]; а також в моделі конденсації з флуктуаціями поверхневого потоку адсорбату [52]. Проте, в таких моделях збільшення відповідного параметру приводить до формування одного перколюючого кластеру адсорбату з подальшим формуванням матриці адсорбату з відокремленими структурами отворів у ній. У даній моделі направленої дифузії відокремлені перколюючі кластери адсорбату не об'єднуються, а залишаються стійкими зі збільшенням значення керуючого параметра, коефіцієнту направленої дифузії, що зводиться до напруженості підведеного електричного поля (див. рис.1.23 при $D_{em} = 6$ та відповідний розподіл структур адсорбату за площею $S/\langle S \rangle$ на рис.1.24г). Варто також відмітити, що збільшення напруженості електричного поля, що індукує формування перколюючих кластерів, не приводить до зменшення концентрації адсорбату на поверхні підкладки (пор. знімки на рис.1.23). Залежність стаціонарного значення середньої концентрації адсорбату на першому шарі $\langle x \rangle_{st}$ від коефіцієнту направленої дифузії D_{em} наведено на рис.1.25а кружками. Крім того, збільшення анізотропії у поверхневому потоці адсорбату не впливає на значення дисперсії поля концентрації $\langle (\delta x)^2 \rangle_{st}$ у стаціонарному режимі (див. квадрати на рис.1.25а), що вказує на

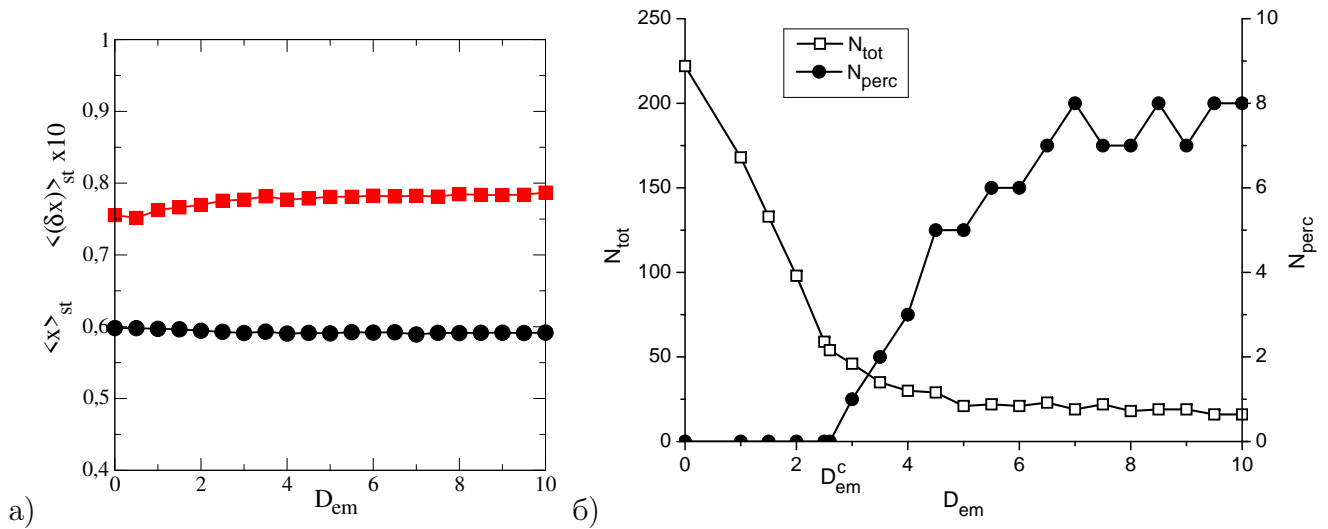


Рисунок 1.25 — Залежність загальної кількості структур адсорбату на поверхні підкладки N_{tot} (ліва вісь) та кількості перколюючих кластерів адсорбату N_{perc} (права вісь) від коефіцієнту індукованої електричним полем направленої поверхневої дифузії адсорбату D_{em} при $\varepsilon = 4$, $\alpha = 0.06$, $k_{||} = 0.1$.

незмінність порядку у розподілі адсорбату, тобто межа між островом адсорбату та підкладкою залишається чіткою, аналогічно до ізотропного випадку з $D_{em} = 0$. Така ситуація суттєво відрізняється від дослідженого у попередньому розділі випадку анізотропної поверхневої дифузії адсорбату на розупорядкованій підкладці, де ступінь розупорядкованості суттєво визначав як морфологію поверхні, так і стаціонарні значення середньої концентрації адсорбату та параметра порядку. У даній моделі, середня концентрація адсорбату, значення параметра порядку (дисперсії поля концентрації), кількість перколюючих кластерів та їх середній розмір у напрямку, перпендикулярному до електричного поля, визначається коефіцієнтом адсорбції α , енергією взаємодії адсорбату ε та коефіцієнтом ізотропної дифузії між шарами $k_{||}$. Залежність загальної кількості структур адсорбату на поверхні підкладки N_{tot} від коефіцієнту індукованої електричним полем направленої поверхневої дифузії адсорбату D_{em} наведено на рис.1.25б пустими кружками (ліва вісь).

З рисунка видно, що зі збільшенням коефіцієнту дифузії D_{em} загальна кількість островів адсорбату N_{tot} у стаціонарному режимі швидко зменшується від 225 до 50 при $D_{em} < 3$ внаслідок реалізації все більшої кількості видовжених, у напрямку підведеного поля, структур (див. пусті квадрати та значення

N_{tot} на лівій вісі). При $D_{em} = D_{em}^c$ починають формуватися перколюючі кластери адсорбату, кількість яких, N_{perc} , наведено затушованими кружками на рис.1.25б; відповідні значення відкладено на правій вісі. Поява перколюючих кластерів суттєво уповільнює зменшення загальної кількості структур адсорбату зі збільшенням D_{em} . Кількість перколюючих кластерів адсорбату квазі-лінійно зростає з ростом коефіцієнту індукованої дифузії при $D_{em} < 6$ з 1 до 6. Подальше збільшення напруженості підведеного електричного поля не має суттєвого впливу ні на загальну кількість островів адсорбату ($N_{tot} \simeq 20$), ні на кількість перколюючих кластерів (N_{perc}).

Критичне значення коефіцієнту індукованої електричним полем направленої поверхневої дифузії адсорбату D_{em}^c , яке визначає певний поріг перколяції, залежить від основних параметрів системи. При цьому, існують критичні значення параметрів, коли взагалі можливим є формування структур на поверхні, що було визначено у розділі 1.4 в рамках аналізу стійкості однорідного стану до просторових збурень (див. рис.1.14а). Розраховану залежність критичного значення порогового значення D_{em}^c від коефіцієнту адсорбції α , відрахованого від критичного значення α_i^c , $i = 1, 2$, що визначає мінімальне значення коефіцієнту адсорбції при фіксованих інших параметрах системи, коли можливим є структурування, наведено на рис.1.26 при різних значеннях коефіцієнту ізотропної вертикальної дифузії $k_{||}$. Перколяційні кластери реалізуються при значеннях D_{em} та α вище відповідної кривої. Так, при більших значеннях коефіцієнту адсорбції перколюючі кластери починають формуватися при менших значеннях коефіцієнту направленої дифузії. Цей ефект пов'язаний зі збільшенням концентрації адсорбату на підкладці зі збільшенням коефіцієнту адсорбції α . При досить великих α навіть при D_{em} існує перколюючий кластер адсорбату, проте цей ефект пов'язаний з морфологічним перетворенням в структурі покриття: від відокремлених структур адсорбату до відокремлених отворів в матриці адсорбату через лабіринтно-подібну структуру перколюючого кластера адсорбату. Збільшення коефіцієнту вертикальної дифузії $k_{||}$ потребує більших значень коефіцієнту направленої поверхневої дифузії D_{em} для виникнення перколюючих кластерів адсорбату при фіксованому коефіцієнті адсорбції α . Цей ефект

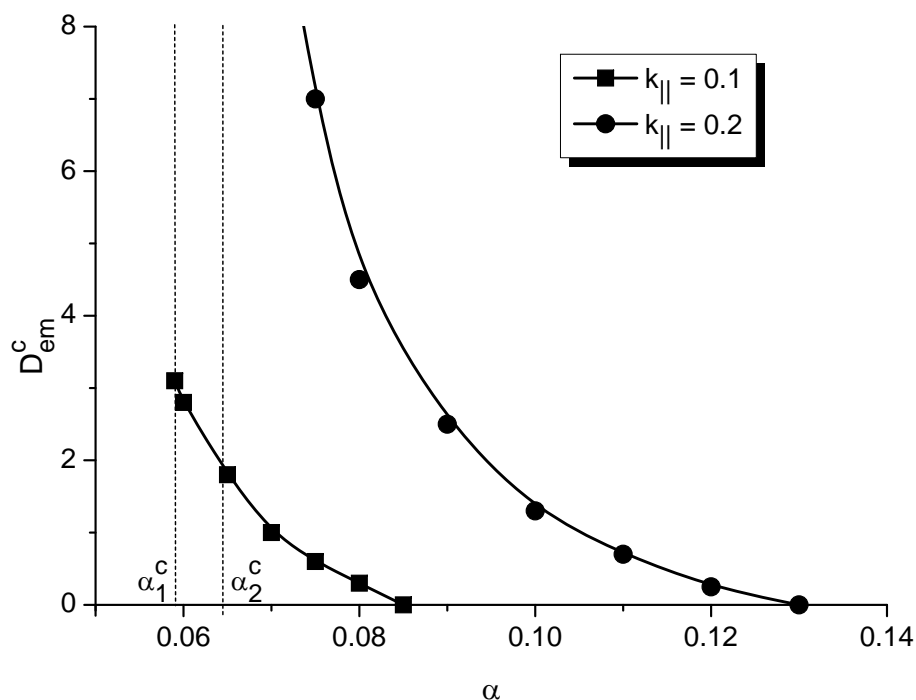


Рисунок 1.26 — Залежність критичного значення порогового значення D_{em}^c від коефіцієнту адсорбції α , відрахованого від критичного значення α_i^c , $i = 1, 2$, при $\varepsilon = 4$ та різних значеннях коефіцієнту ізотропної вертикальної дифузії $k_{||}$.

пов'язаний зі зменшенням концентрації адсорбату на першому шарі зі збільшенням коефіцієнту вертикальної дифузії, оскільки з другого шару, де концентрація адсорбату менша ніж на першому шарі, на перший шар приходить адсорбату менше, ніж з першого шару іде на другий. Таким чином, варіюючи напруженість підведеного до підкладки електричного поля у напрямку вздовж підкладки, можна контролювати формою поверхневих структур адсорбату, їх розміром та можливістю формування перколюючих кластерів адсорбату, що з'єднують протилежні краї підкладки, у напрямку, паралельному, до прикладеного електричного поля.

1.6 Багат шарове подання результатів одношарового наближення

Представлені результати відповідають процесам формування структур на проміжному n -му шарі системи з N шарів. Згідно з побудованою моделлю ширина тераси багат шарової пірамідальної структури, побудованої з усіх відокремлених структур, визначається параметром Δ , який для фактичного випадку обчислювальної сітки лінійного розміру $L_0 = 256$ і фіксованого $\beta = 0.1$ дає $\Delta = 13$ в одиницях сітки. Для визначення значення ширини тераси d для кожної пірамідальної багат шарової структури (див. рис.1.1) в одиницях обчислювальної сітки будемо діяти у наступний спосіб. Згідно з визначенням загальної площі, займаної адсорбатом на n -му шарі $S_n = \pi r_n^2$, для відповідної загальної площі на попередньому $(n-1)$ -му шарі маємо $S_{n-1} = \pi r_{n-1}^2$, причому $r_{n-1} = r_n + \Delta$. Це дає:

$$S_{n-1} = S_n + 2\Delta\sqrt{\pi S_n} + \pi\Delta^2. \quad (1.15)$$

З іншого боку, лінійний розмір кожної i -ої пірамідальної структури r_{ni} зменшується з ростом номеру шару n на величину ширини тераси d наступним чином: $r_{n-1,i} = r_{n,i} + d$ (див. рис.1.1). Таким чином, площа, яку займає кожна i -та структура на $(n-1)$ -ому рівні визначається з рівняння: $s_{n-1,i} = s_{n,i} + 2d\sqrt{\pi s_{n,i}} + \pi d^2$. Беручи суму за всіма M структурами отримуємо:

$$S_{n-1} = S_n + 2d \sum_i^M \sqrt{\pi s_{ni}} + M\pi d^2. \quad (1.16)$$

Розв'язуючи рівняння (1.15,1.16) можна встановити ширину тераси кожної пірамідальної структури d як розв'язок квадратного рівняння:

$$d = \frac{1}{\pi M} \left\{ \left[\left(\sum_{i=1}^M \sqrt{\pi s_{ni}} \right)^2 + \pi M \left(2\Delta\sqrt{\pi S_n} + \pi\Delta^2 \right) \right]^{1/2} - \sum_{i=1}^M \sqrt{\pi s_{ni}} \right\}. \quad (1.17)$$

Таким чином, використовуючи обчислені значення площ кожної структури s_{ni} та загальне число структур M , можна встановити значення ширини тераси

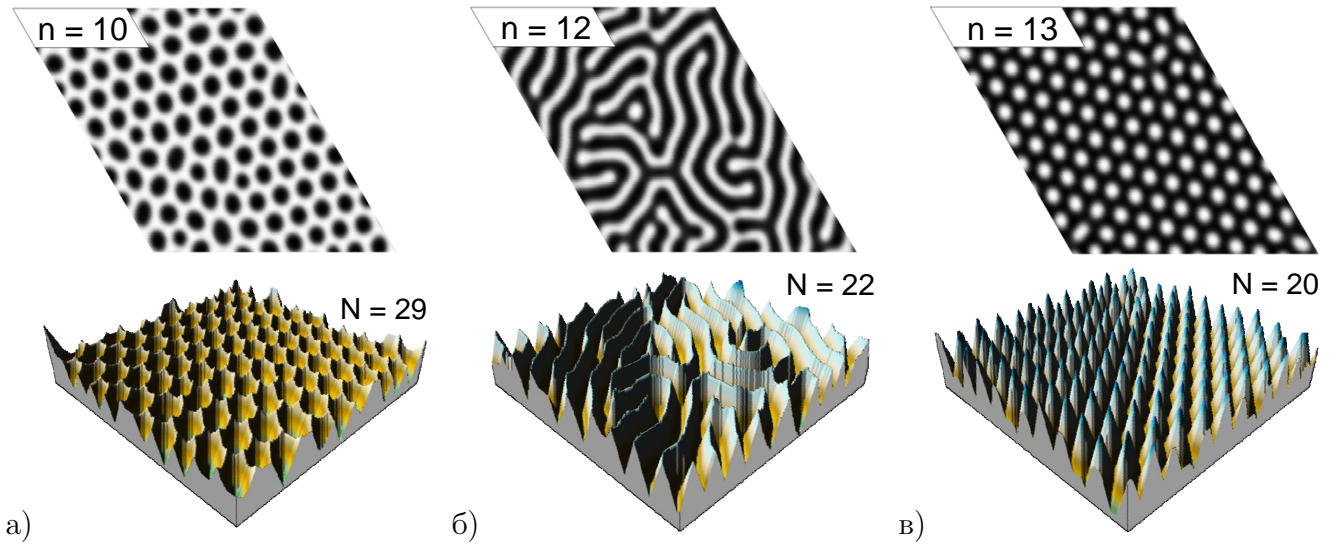


Рисунок 1.27 — Типові ілюстрації поверхневих структур при $L_0 = 226$, $\beta = 0.1$, $\alpha = 0.15$, $\epsilon = 3.2$, $\sigma^2 = 0$ та: а) $u_E = 0.4$, б) $u_E = 0.5$ та в) $u_E = 0.6$. Верхній рядок — двовимірні структури на n -тому шарі багатошарової системи; нижній рядок — сконструйовані багатошарові структури в системі з загальною кількістю N шарів.

d в одиницях розміру обчислювальної сітки L_0 і побудувати багатошарову систему N шарів, де лінійний розмір кожної i -й структури зменшується на d зі зростанням номеру шару n . Для досліджуваного випадку $L_0 = 256$ і $\beta = 0.1$ з рівняння (1.17) отримуємо $d = 1$. При відтворенні багатошарової структури будемо враховувати, що перший шар повністю зайнятий адсорбатом, а найвищий шар характеризується структурами адсорбату з лінійним розміром, рівним ширині тераси d . Типові результати для двовимірних структур на проміжному n -му шарі та відповідних побудованих N -шарових структур з шириною тераси $d = 1$ при різних значеннях сили анізотропії u_E наведено на рис.1.27. Таким чином, варіюючи параметри моделі можна отримати багатошарові отвори в матриці адсорбату (рис.1.27а), лабіринтно-подібні структури (рис.1.27б) та відокремлені конусо-подібні структури адсорбату (рис.1.27в).

Для проведення оцінки отриманих даних щодо лінійного розміру поверхневих структур використаємо формулу для визначення дифузійної довжини $L_D = \sqrt{k_{\leftrightarrow}/k_d^0} = a^2 \exp([E_d - E_D]/T)$ та відомі експериментальні дані [56]: $E_D = 0.24$ еВ та $E_d = 0.44$ еВ. Для реальних значень температури всередині камери $T = 773$ К отримуємо $L_D \simeq 50$ нм. Таким чином, для результатів

щодо лінійного розміру структур адсорбату/отворів на рис.1.10а маємо $\langle R_a \rangle \in (63 \div 90)$ нм (для відокремлених кластерів адсорбату) та $\langle R_v \rangle \in (40 \div 90)$ нм (для відокремлених отворів всередині матриці адсорбату) на приблизно половині висоти зростаючої поверхні. Для результатів щодо лінійного розміру структур з рис.1.13б маємо $R \in (28 \div 35)$ нм. Отримані дані добре узгоджуються з експериментально спостережуваними величинами щодо розмірів поверхневих структур при конденсації [24, 56–58].

ВИСНОВКИ

Проведено вивчення впливу флуктуацій напруженості підведеного до підкладки електричного поля на динаміку упорядкування адсорбату на поверхні та статистичні властивості поверхневих структур у системах при конденсації, та виявлено вплив анізотропії поверхневої дифузії адатомів на підкладці, що являє собою високоентропійний сплав, на просторовий розподіл адсорбату на першому шарі системи газ-конденсат.

В рамках дослідження впливу флуктуацій на динаміку структуроутворення та статистичні властивості структур адсорбату можна зробити наступні висновки. При фіксованих значеннях середньої інтенсивності напруженості електричного поля поблизу підкладки флуктуації індукують упорядкування адсорбату на підкладці, приводячи до утворення окремих нанорозмірних островів адсорбату. Збільшення інтенсивності флуктуацій призводить до морфологічного перетворення поверхні з розділених островів адсорбату через перколяційну структуру адсорбату до відокремлених наноотворів всередині матриці адсорбату; прискорення процесів упорядкування; (iii) збільшення просторового порядку зростаючої поверхні. Сильні флуктуації стабілізують систему, приводячи до гомогенізації поля покриття. У разі кореляцій між середнім значенням напруженості електричного поля та інтенсивністю її флуктуацій при формуванні відокремлених структур адсорбату збільшення відношення інтенсивності шуму до середнього значення напруженості електричного поля приводить до прискорення процесів структуроутворення; забезпечує формування добре впорядкованих структур; приводить до аномальної динаміки середнього розміру острівців адсорбату.

При аналізі процесів самоорганізації адсорбату на поверхні підкладки, що представляє модель високоентропійного сплаву, отримано наступні результати. Показано, що анізотропія поверхневої дифузії адатомів індукує формування відокремлених отворів на першому шарі. Збільшення міри розупорядкованості підкладки приводить до зниження концентрації адсорбату на шарі; морфологічного перетворення поверхні з реалізацією відокремлених структур адсорбату;

прискорення процесів формування структури; реалізації добре структурованої поверхні. При підвищених значеннях міри розупорядкованості підкладки виділяються нанорозмірні острови адсорбату, які характеризуються дробовою фрактальною розмірністю та степеневим розподілом за розмірами.

Проводячи дослідження процесів росту структур адсорбату на поверхні підкладки в умовах коли до неї підведене електричне поле вздовж підкладки встановлено, що збільшення напруженості поля приводить до формування видовжених у напрямку поля структур адсорбату; при перевищенні напруженості порогового значення, яке залежить від основних параметрів системи, формуються перколюючі кластери адсорбату, які поєднують протилежні краї підкладки. Такі перколюючі кластери є стійкими, а їх кількість визначається напруженістю поля. Встановлено, що збільшення коефіцієнту адсорбції приводить до зменшення порогового значення напруженості поля для виникнення перколюючого кластера, тоді як збільшення коефіцієнту вертикальної дифузії адатомів між шарами навпаки збільшує його.

Проводячи оцінку результатів щодо лінійного розміру поверхневих структур показано, що для ізотропної дифузії (осадження на підкладку з одного сорту атомів) відокремлені кластери адсорбату у квазі-стаціонарному режимі характеризуються розмірами від 60 до 90 нм; тоді як відокремлені отвори всередині матриці адсорбату мають розміри від 30 до 90 нм (на приблизно половині висоти зростаючої поверхні). У випадку анізотропної поверхневої дифузії адсорбату на підкладці збільшення міри розупорядкованості приводить до зменшенні розміру структур адсорбату на першому шарі від 45 до 16 нм. Отримані дані добре узгоджуються з експериментально спостережуваними величинами щодо розмірів поверхневих структур при конденсації.

Побудовані моделі дозволяють проводити якісний аналіз динаміки формування поверхневих структур при конденсації, а отримані у роботі результати надають можливість прогнозувати морфологію поверхні та виробити рекомендації щодо її керуванням за рахунок додаткових чинників.

Роботу виконано в строк та в повному обсязі.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ

- 1 Dvornichenko A.V. Islands growth control in adsorptive multilayer plasma-condensate systems. / A.V.Dvornichenko, D.O.Kharchenko, I.O.Lysenko, V.O.Kharchenko // Journal of Crystal Growth. – 2019. – V.514. – P.1.
- 2 Kharchenko V.O. Nano-structured thin films growth in stochastic plasma-condensate systems. / V.O.Kharchenko, A.V.Dvornichenko // Eur. Phys. J. B – 2019. – V.92 – P. 57.
- 3 Kharchenko V.O. Nano-sized islands growth control in plasma-condensate devices. / V.O.Kharchenko, A.V.Dvornichenko, T.I.Zhylenko // Appl. Nanosci. – 2019. – <https://doi.org/10.1007/s13204-019-01091-5>
- 4 Kharchenko V.O. Nano-sized adsorbate island formation in adsorptive anisotropic multilayer systems. / V.O.Kharchenko, A.V.Dvornichenko, D.O.Kharchenko // In: Nanocomposites, Nanostructures, and Their Applications. Springer Proceedings in Physics. Springer. – 2019. – V.221. – P.135.
- 5 Dvornichenko A.V. Local variations in the temperature of the growing layer at condensation from gaseous phase / A.V.Dvornichenko, V.O.Kharchenko, O.M.Shchokotova, N.N.Manko // IEEE 9th International Conference on “Nanomaterials: Applications & Properties”. – 2019. – **P.01SPN43**.
- 6 Dvornichenko A.V. A role of fluctuations of the adsorbate flux in nanostructured thin films growth during deposition. / A.V.Dvornichenko, O.M.Shchokotova, N.N.Manko // “Nanotechnology and nanomaterials”. – 2019. – **P.451**.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. M.C.Cross, P.C.Hohenberg, Rev. Mod. Phys. **65**, 851 (1993)
2. V.I.Perekrestov, Yu.O.Kosminska, A.S.Kornyushchenko, et al, Physica B, **411**, 140 (2013)
3. D.Leonhardt, S.M.Han, Surf. Sci, **603**, 2624 (2009)
4. R.Gomer, Rep. Prog. Phys., **53**, 917 (1990)
5. P.Jung, G.Mayer-Kress, Phys. Rev. Lett., **74**, 2130 (1995)
6. J.Wang, S.Kadar, P.Jung, K.Showalter, Phys. Rev. Lett., **82**, 855 (1999)
7. Z.Hou, H.Xin, Phys. Rev. Lett., **89**, 280601 (2002)
8. H.Hempel, L.Schimansky-Geier, J.García-Ojalvo, Phys. Rev. Lett., **82**, 3713 (1999)
9. T.Biancalani, L.Dyson, A.J.Mckane, Phys. Rev. Lett., **112**, 038101 (2014)
10. T.Weiss, A.Kronwald, F.Marquardt, New J. Phys. **18**, 1 (2015)
11. D.O.Kharchenko, V.O.Kharchenko, I.O.Lysenko, Physica Scripta **83**, 045802 (2011)
12. W.Horsthemke, R.Lefever, Noise-Induced Transitions (Springer-Verlag, Berlin, 1984).
13. J.Garcia-Ojalvo, J.M.Sancho, Noise in Spatially Extended System (Springer-Verlag, New York, 1999).
14. C.Van der Broeck, Phys. Rev. Lett., **73**, 3395 (1994)
15. C.Van der Broeck et al. Phys. Rev. E, **55**, 4084 (1997)
16. J.Garcia-Ojalvo, A.Hernandez-Machado, J.M.Sancho, Phys. Rev. Lett., **71**, 1542 (1993)

17. A.Becker, L.Kramer, Phys. Rev. Lett., **73**, 955 (1994)
18. J.M.R.Parrondo, C.Van den Broeck, J.Buceta, F.J. de la Rubia, Physica A, **224**, 153 (1996)
19. A.A.Zaikin, L.Schimansky-Geier, Phys. Rev. E, **58**, 4355 (1998)
20. D.Walgraef, Physica E **15**, 33 (2002)
21. M.Heldebrand, A.S.Mikhailov, G.Ertl, Phys. Rev. Lett. **81**, 2602 (1998)
22. V.O.Kharchenko, D.O.Kharchenko, S.V.Kokhan, et.al., Physica Scripta **86**, 055401 (2012)
23. V.I.Perekrestov, A.I.Olemskoi, Yu.O.Kosminska, A.A.Mokrenko, Physics Letters A **373**, 3386 (2009)
24. A.S.Kornyushchenko, V.V.Natalich, V.I.Perekrestov, Journal of Crystal Growth **442**, 68 (2016)
25. A.V.Dvornichenko, D.O.Kharchenko, I.O.Lysenko, V.O.Kharchenko, Journal of Crystal Growth, **514**, 1 (2019)
26. V.O.Kharchenko, D.O.Kharchenko, V.V.Yanovsky, Nanoscale Research Letters, **12**, 337 (2017)
27. A.Makeev, M.Hinz, R.Imbihl, J. Chem. Phys. **114**, 9083 (2001)
28. O.Steinbock, P.Kettunen, K.Showalter, Science **269**, 1857 (1995)
29. A.V.Panfilov, R.H.Keldermann, M.P.Nash, Phys. Rev. Lett. **95**,
30. L.Kramer, W.Pesch, Annu. Rev. Fluid Mech. **27**, 515 (1995)
31. R.Imbihl, G.Ertl, Chem. Rev. **95**, 697 (1995)
32. M.Scheuring, L.Kramer, J.Peinke, Phys. Rev. E **58**, 2018 (1998)
33. R.Faller, L.Kramer, Phys. Rev. E **57**, 6249 (1998)
34. F.Mertens, R.Imbihl, Nature **370**, 124 (1994)

35. A.S.Mikhailov, Phys. Rev. E **49**, 5875 (1994)
36. N.Gottschalk, F.Mertens, M.Bar, et. al., Phys. Rev. Lett. **73**, 3483 (1994)
37. M.Bar, Chaos, **12**, 204 (2002)
38. Z.Z.He, J.Liu, Phys. Rev. E **79**, 026105 (2009)
39. S.B.Casal, H.S.Wio, S.Mangioni, Physica A, **311**, 443 (2002)
40. V.O.Kharchenko, D.O.Kharchenko, Surface Science **637-638** 90 (2015)
41. V.O.Kharchenko, D.O.Kharchenko, Phys. Rev. E **86**, 041143 (2012)
42. V.O.Kharchenko, D.O.Kharchenko, A.V.Dvornichenko, Surface Science **630**, 158 (2014)
43. D.Walgraef, Physica E **18**, 393 (2003)
44. D.Walgraef, Int. J. Quantum Chemistry **98**, 248 (2004)
45. Y.Mishin, D.Farkas, M.J.Mehl, D.A.Papaconstantopoulos, Phys. Rev. B **59**, 3393 (1999)
46. S.Wei, H.C.Ma, J.Q.Chen, J.D.Guo, Journal of Alloys and Compounds, **687**, 999 (2016)
47. Y.-H.Oh, S.-I.Kim, M.Kim, S.-Y.Lee, Y.-W.Kim, Ultramicroscopy, **181**, 160 (2017)
48. V.I.Perekrestov, A.I.Olemskoi, Yu.O.Kosminska, A.A.Mokrenko, Physics Letters A **373**, 3386 (2009)
49. Y.A.Kosminska, A.A.Mokrenko, V.I.Perekrestov, Tech. Phys. Lett. **37**, 538 (2011)
50. A.V.Dvornichenko, D.O.Kharchenko, I.O.Lysenko, V.O.Kharchenko, Journal of Crystal Growth, **514**, 1 (2019).
51. V.O.Kharchenko, A.V.Dvornichenko, V.N.Borysiuk, Eur. Phys. J. B **91**, 93 (2018)

52. V.O.Kharchenko, A.V.Dvornichenko, Eur. Phys. J. B **92**, 57 (2019)
53. J.M.Sancho, M.San Miguel, S.L Katz, and J.D.Gunton, Phys. Rev. A **26**, 1589 (1982)
54. G.E.P.Box and M.E.Muller, Ann. Math. Stat. **29**, 610 (1958)
55. J.Feder. Fractals (Plenum Press, New York, 1988)
56. D.Leonhardt, S.M.Han, Surface Science **603**, 2624 (2009)
57. K.I.Hunter, J.T.Held, K.A.Mkhoyan, U.R.Kortshagen, ACS Appl. Mater. Interfaces **9**, 8263 (2017)
58. V.I.Perekrestov, Yu.O.Kosminska, A.S.Kornyushchenko, V.M.Latyshev, Physica B **411**, 140 (2013)