

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  
епітаксiальному рості**

**ВСТАНОВЛЕННЯ ВПЛИВУ АНІЗОТРОПІЇ ПОВЕРХНЕВОГО  
ПОТОКУ АДАТОМІВ ТА ЙОГО ФЛУКТУАЦІЙ НА ПРОЦЕСИ  
СТРУКТУРУВАННЯ ПРИ ЕПІТАКСІЇ**

(остаточний)

Керівний НДР

канд. фіз.-мат. наук

А.В.Дворниченко

2020

Рукопис закінчено 30 вересня 2020 р.

Результати цієї роботи розглянуто на засіданні наукової ради СумДУ, протокол  
від 24.09.2020 № 2

## СПИСОК АВТОРІВ

Керівник НДР канд. фіз.-мат наук (30.09.2020)	А.В. Дворниченко (реферат, вступ, розд.1, висновки)
Відповідальний виконавець доктор фіз.-мат. наук, пров.н.с. (30.09.2020)	В.О. Харченко (реферат, вступ, розд.1, висновки)
Виконавці:	
Ст. наук. співр. канд. фіз.-мат. наук (30.09.2020)	І.О. Лисенко (розд.1)
Ст. наук. співр. канд. фіз.-мат. наук (30.09.2020)	О.М. Щокотова (розд.1)
Ст. викладач канд. фіз.-мат. наук (30.09.2020)	А.М. Заскока (розд.1)
Ст. викладач канд. фіз.-мат. наук (30.09.2020)	Т.І. Жиленко (розд.1)
Асистент мол. наук. співр. (30.09.2020)	Я.О. Кравченко (розд.1)
Асистент канд. фіз.-мат. наук (30.09.2020)	Н.М. Манько (розд.1)
Асистент канд. фіз.-мат. наук (30.09.2020)	А.Ю. Бадалян (розд.1)
Студент лаборант (30.09.2020)	М.О. Яценко (розд.1)
Студент лаборант (30.09.2020)	М.Д. Харченко (розд.1)
Студент лаборант (30.09.2020)	Я.О. Чернишова (розд.1)
Студент лаборант (30.09.2020)	О.М. Нікітін (розд.1)
Студент лаборант (30.09.2020)	М.А. Могильних (розд.1)

## РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 44 с., 26 рис., 40 джерел.

АДСОРБАТ, ЕЛЕКТРОМІГРАЦІЯ, ЕПІТАКСІЯ, ПОВЕРХНЕВІ СТРУКТУРИ, САМООРГАНІЗАЦІЯ, ФЛУКТУАЦІЇ.

Об'єкт дослідження — процеси формування та росту поверхневих структур адсорбату при епітаксії з урахуванням ефектів електроміграції.

Метою роботи є встановлення впливу анізотропії поверхневого потоку атомів, викликаній ефектами електроміграції, що спричинені дією підведеного до підкладки електричного поля на процеси формування та росту анізотропних багат шарових пірамідальних структур при епітаксії. До мети також відноситься дослідження впливу корельованих у часі флуктуацій напруженості електричного поля на динаміку росту товщини плівки та висоти поверхневих структур, морфологію зростаючої поверхні, статистичні властивості поверхневих багат шарових структур адсорбату та розподіл поля висоти поверхні за значеннями.

Методи дослідження — в роботі використовувались метод фазового поля для побудови моделі еволюції висоти поверхні, методи числового інтегрування стохастичних диференціальних рівнянь у часткових похідних та методи статистичного аналізу.

## ЗМІСТ

ВСТУП	5
1 ВСТАНОВЛЕННЯ ВПЛИВУ АНІЗОТРОПІЇ ПОВЕРХНЕВОГО ПОТОКУ АДАТОМІВ ТА ЙОГО ФЛУКТУАЦІЙ НА ПРОЦЕСИ СТРУКТУРУВАННЯ ПРИ ЕПІТАКСІЇ	8
1.1 Математична модель . . . . .	8
1.2 Деталі процедури моделювання та статистичного аналізу . . .	12
1.3 Ефекти електроміграції при епітаксіальному рості тонких плівок	15
1.4 Керування морфологією поверхні за рахунок флуктуацій напруженості електричного поля . . . . .	26
ВИСНОВКИ	40
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ	42

## ВСТУП

Ріст тонких плівок за допомогою молекулярно-променевої епітаксії являє собою сучасну технологію вирощування монокристалів, які успадковують атомні структури від субстратів. Ця технологія є технологічно важливою, вона добре вивчена експериментально. Крім того епітаксія представляє дуже активну область теоретичних досліджень. Моделювання епітаксійного росту є складною багатомасштабною проблемою. Враховуючи той факт, що макроскопічна еволюція зростаючої плівки безпосередньо пов'язана з рухами адатомів на поверхнях та їх різними конфігураціями зв'язку, то для теоретичного опису епітаксійного росту часто використовують моделювання на атомних масштабах. Однак такі методики використовуються на невеликих часових інтервалах. Для моделювання довготривалого процесу епітаксiального росту плівки, що є цікавим з точки зору прикладних досліджень експериментальних розробок, слід використовувати континуальні методи та підходи. На сьогодні досліджено ієрархію моделей для опису епітаксійного росту: від повністю атомістичних моделей, через напівдискретні моделі крокового потоку до континуальних моделей для динаміки еволюції висоти зростаючої плівки. Основною проблемою моделювання епітаксійного росту є подолання розриву між цими різними моделями та опис процесу росту в безперервному масштабі шляхом включення атомістичних ефектів.

Процеси формування поверхневих структур при підвищених температурах є результатом самоорганізації адсорбованих атомів. Вони, зазвичай, керуються кінетичними факторами, тобто швидкостями процесів, які протікають на зростаючій поверхні. Одним з цікавих явищ, що впливають на формування морфології поверхні при високих температурах, є електроміграція, яка виникає, коли до підкладки підведено електричний струм [1, 2]. Електроміграція – викликане електричним полем перенесення речовини. Вона являє собою важливу технологічну проблему особливо в областях надійності електронних схем, що широко використовуються у сучасній мікро- та нано-електроніці. Атоми в твердому тілі рухаються за рахунок дифузійних процесів та внаслідок дії сили електронного

вітру, що виникає при передачі імпульсу електронами провідності, які 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.

Переважна більшість досліджень з електроміграції почалась з 1970-х років. Такі дослідження здебільшого проводились експериментально. Було показано, що вплив підведеного до підкладки електричного струму приводить до ефективного нагріву поверхні і, як наслідок, індукований просторово направлений дрейф адатомів починає відігравати значну роль у процесах формування поверхневих структур при осадженні [3–6]. Реорганізація сходинкової структури островів адсорбату спостерігалась на кремнієвих підкладках [7, 8]. Сильні ефекти електроміграції проявлялися у процесах еволюції морфології поверхні ванадію [9], та при епітаксіальному рості гетероструктур напівпровідників [10]. Було виявлено, що при невисоких температурах осадження зростання поверхневих структур відбувається за режимом росту Странського-Крастанова [11–14], тоді як при підвищених температурах такі процеси пов'язані з твердим розчиненням шарів осаджуваного матеріалу [15, 16]. Таким чином, ефекти електроміграції, індуковані наявністю різниці потенціалів на протилежних сторонах підкладки, можуть суттєво впливати на динаміку еволюції морфології поверхні при підвищених температурах. Цей ефект може приводити до зміни морфології покриття у порівнянні з ізотропним випадком осадження без наявності зовнішнього поля.

Процеси формування та росту багат шарових поверхневих структур адсорбату при епітаксіальному рості тонких плівок також досліджуються теоретично з використанням декількох методів у рамках схеми багатомасштабного моделювання (див., наприклад, роботу [17]). Використання такого підходу дозволяє якісно описати процеси, що протікають на атомарному рівні [18], на дифузійних часових масштабах [19], процеси формування структур зі сходинками [20] та вивчити динаміку зміни морфології поверхні [21, 22]. На мезоскопічному рівні опису динаміки зміни морфології поверхні широко викори-

стовуються підходи, що ґрунтуються на теорії фазового поля. Цю методику було вперше запропоновано для авторами [23] для моделювання динаміки росту островів адсорбату при епітаксії та розвинуто у роботі [24]. Подальше узагальнення цього підходу дозволило дослідити вплив флуктуацій поверхневого потоку адсорбату та локальних змін температури поверхні, індукованих процесами адсорбції/десорбції, на динаміку росту поверхні та її морфологію. У роботі [27] було вивчено вплив потоку осадження, енергії взаємодії адсорбату та часу релаксації температури поверхні на статистичні характеристики зростаючої поверхні та поверхневих структур. Проте, ці дослідження проводились з урахуванням ізотропної поверхневою дифузії адсорбату. Теоретичні дослідження ефектів електроміграції при осадженні проводилися здебільшого шляхом вивчення взаємодії між прикладеним електричним полем та ефективним зарядом поверхневих атомів [28–31].

У даній роботі буде розвинено метод фазового поля для опису процесів формування та росту багат шарових поверхневих структур адсорбату при епітаксiальному рості з урахуванням ефектів електроміграції. При проведенні числового моделювання ефекти направленої дрейфу адатомів буде враховано шляхом уведення анізотропної поверхневої дифузії адсорбату. Буде вивчено вплив коефіцієнту індукованої дифузії на динаміку росту поверхні, її морфологію та статистичні властивості. Також буде досліджено випадок корельованих у часі флуктуацій напруженості електричного поля та буде встановлено вплив інтенсивності флуктуацій та часу їх кореляцій на динаміку структурування поверхні та статистичні властивості поверхневих структур.

# 1 ВСТАНОВЛЕННЯ ВПЛИВУ АНІЗОТРОПІЇ ПОВЕРХНЕВОГО ПОТОКУ АДАТОМІВ ТА ЙОГО ФЛУКТУАЦІЙ НА ПРОЦЕСИ СТРУКТУРУВАННЯ ПРИ ЕПІТАКСІЇ

## 1.1 Математична модель

У рамках теорії фазового поля будемо досліджувати еволюцію безрозмірної концентрації адсорбату  $x$  на підкладці, визначену через відношення кількості адсорбованих атомів (адатомів)  $N_a$  до загальної кількості місць для адсорбції  $N_s$  у кожній елементарній комірці розміру  $\ell$ :  $x = N_a/N_s$ ;  $x \in [0, 1]$ . Будемо розглядати процеси гомоепітаксії, коли осаджувана речовина не відрізняється за хімічним складом від речовини підкладки. Просторово-часова еволюція концентрації адсорбату при епітаксіальному рості задається рівнянням реакційно-дифузійного типу у стандартному вигляді:

$$\partial_t x = R(x) - \nabla \cdot \mathbf{J}. \quad (1.1)$$

Тут, перший доданок у правій частині задає реакційну складову та визначається процесами, які протікають на поверхні при осадженні; другий доданок відповідає за поверхневий потік адсорбату. Серед основних реакційних процесів зазвичай виділяють адсорбцію та десорбцію. При епітаксіальному рості адатоми осаджуються з певною швидкістю  $k_a$ , пропорційною до потоку осадження. Адсорбовані атоми можуть десорбувати назад до газової фази зі швидкістю  $k_{d0}$ , яка визначається ефективним часом життя адатому  $\tau_d$  та енергією активації десорбції  $E_{des}$  у вигляді:  $k_{d0} = [\tau_d]^{-1} \exp(-E_{des}/T)$ , де  $T$  задає температуру осадження в енергетичних одиницях. Оскільки адатоми є мобільними взаємодіючими частинками, то взаємодія адатом-адатом може привести до корекції швидкості десорбції за рахунок потенціалу взаємодії адсорбату  $U(\mathbf{r})$  у наступному вигляді:  $k_d = k_{d0} \exp(U/T)$ .

Загальний поверхневий потік адсорбату  $\mathbf{J}$  містить звичайний дифузійний потік  $(-D\nabla x)$  та потік, пов'язаний із потенціалом взаємодії  $U(\mathbf{r})$ , який визначає термодинамічну силу  $\mathbf{f} = -\nabla(U/T)$ , що діє на адсорбовані частинки та індукує потік адатомів  $\mathbf{v}x$ . Швидкість  $\mathbf{v}$  визначається відповідно до співвідношення Айнштейна стандартним чином:  $\mathbf{v} = D\mathbf{f}$ . Такий індукований взаємодією



адсорбату потік можливий лише на  $(1 - x)$  вільних місць. Коефіцієнт поверхневої дифузії  $D$  визначається у стандартний спосіб,  $D = a^2\nu \exp(-E_{diff}/T)$ , де  $a$  – параметр ґратки субстрату,  $\nu$  – частотний фактор,  $E_{diff}$  – енергія активації дифузії,  $E_{diff} > E_{des}$ .

З метою визначення вигляду потенціалу взаємодії адатомів  $U(\mathbf{r})$  скористаємося самоузгодженим підходом, виражаючи  $U(\mathbf{r})$  через бінарний притягуючий потенціал для двох адсорбованих частинок  $u(r)$  у вигляді:  $U(x(\mathbf{r})) = -\int u(\mathbf{r} - \mathbf{r}')x(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$ . Аналогічний підхід широко використовувався у теоретичних дослідженнях процесів епітаксiального росту [25–27], просторового упорядкування при структуруванні поверхні при конденсації [32–34], радіаційно-стимульованому структуруванні дефектів [35, 36], та ін. У рамках такого підходу енергія взаємодії адсорбату  $\epsilon$  визначається інтегралом  $\epsilon = \int u(r)dr$ , що для потенціалу взаємодії  $U$  у першому наближенні дає  $U(x(r)) \simeq -\epsilon x(r)$ . Таким чином, використовуючи отриманий вираз для потенціалу взаємодії адсорбату та комбiнуючи реакційну й дифузійну складові, рівняння просторово-часової еволюції концентрації адсорбату (1.1) набуває вигляду:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = F - xe^{-\epsilon x} + D_0 [\nabla^2 x - \epsilon \nabla M(x) \nabla x], \quad (1.2)$$

де безрозмірний час вимірюється в одиницях  $k_{d0}$ , уведено безрозмірні параметри  $F = k_a/k_{d0}$ ,  $D_0 = D/k_{d0}$ ,  $\epsilon = \epsilon/T$  та використано позначення  $M(x) = x(1 - x)$ . З рівняння (1.2) видно, що потік, індукований взаємодією адсорбату, є протилежним до звичайного дифузійного потоку.

При дослідженні процесів росту поверхні у рамках теорії фазового поля висота поверхні у певній точці субстрату у кожен момент часу визначається значенням фазового поля (ефективного параметра порядку)  $\phi(\mathbf{r}, t)$  [24] в одиницях параметра ґратки  $a$  та задає кількість моношарів. Слідуючи роботам [23, 24] рівняння просторово-часової еволюції фазового поля  $\phi$  записується у наступному вигляді:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi}, \quad \mathcal{H} = \int d\mathbf{r} [\varpi^2 (\nabla \phi)^2 / 2 + H(\phi, x)]. \quad (1.3)$$

Тут вільна енергія  $\mathcal{H}$  визначається густиною  $H$ ; параметр  $\varpi$  задає безрозмірну константу зв'язку. З метою опису процесів росту багат шарових структур

адсорбату з терасами, відповідно до роботи [23], будемо вважати, що локальні стійкі мінімуми параметра порядку відповідають терасам пірамідальних структур, тоді як швидка просторова зміна параметра порядку визначає положення сходинки такої структури. Для моделювання процесу формування великої кількості терас у структурах адсорбату для густини вільної енергії приймемо наступний вираз [25]:

$$H(\phi, x) = \frac{1}{2\pi} \cos(2\pi[\phi - \phi_s]) - \lambda x \left( \phi + \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi[\phi - \phi_s]) \right), \quad (1.4)$$

де параметр  $\lambda$  визначає ширину тераси,  $\phi_s$  задає початкове значення висоти поверхні. Таким чином, динаміка формування структур адсорбату при епітаксимальному рості задається системою рівнянь (1.2), (1.3) з урахуванням рівняння (1.4).

Основною метою даної роботи є встановлення впливу ефектів електроміграції, що виникають при підведенні до підкладки зовнішнього електричного поля, на динаміку росту поверхні при осадженні, її морфологію та статистичні характеристики. Підведення електричного поля до підкладки з напрямком, паралельним до підкладки, індукує результуючі зміни у внутрішньому локальному електричному полі, які можуть приводити до появи направленої сили  $\mathbf{F}_{e1} = eZ\mathbf{E}$ . Напруженість цього поля  $|\mathbf{E}| = -\Phi/L$  визначається різницею потенціалів  $\Phi$  та лінійним розміром підкладки  $L$  (відстанню між анодом і катодом);  $e$  — заряд електрона. Напрямок сили  $\mathbf{F}_{e1}$  задається ефективною валентністю  $Z$ , яка є негативною для більшості металів. Таким чином, адсорбовані атоми рухаються у напрямку, протилежному електричному полю. Для урахування ефектів електроміграції при проведенні числового моделювання будемо вважати, що поверхнева дифузія адатомів узагальнюється урахуванням направленого руху адатомів в одному з напрямків, індукованим електричним полем, з коефіцієнтом дифузії  $D_{em}$ . Така анізотропна дифузія у найпростішому випадку задається виразом:  $\pm D_{em} \nabla_x x(\mathbf{r})$ , де враховано, що електричне поле направлене вздовж напрямку  $x$ , а знак  $\pm$  визначається взаємним розташуванням катоду та аноду.

Розглядаючи процеси, які відбуваються в умовах, наближених до реальних, слід враховувати той факт, що напруженість підведеного до підкладки електричного поля  $|\mathbf{E}|$ , може змінюватись у часі. При цьому, такі зміни відбуваються випадковим чином. Це приводить до узагальнення коефіцієнту індукованої дифузії  $D_{em}$  у наступний спосіб:  $D_{em}[1 + \zeta(t)]$ , де  $D_{em}$  задає середнє значення напруженості електричного поля, тоді як  $\zeta(t)$  – залежні від часу її випадкові зміни (флуктуації) відносно середнього значення  $D_{em}$ . У найпростішому випадку ми будемо розглядати флуктуації  $\zeta(t)$  як гаусовий процес із такими властивостями:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = C(t - t'),$$

де  $C(t - t')$  визначає кореляційну функцію процесу  $\zeta(t)$ . У найпростішому випадку нескорельованого (білого) шуму ця кореляційна функція задається  $\delta$ -функцією Дірака. Відомо, що будь-який фізичний випадковий процес характеризується ненульовим значенням часу кореляції  $\tau$ . З метою врахування ефектів пам'яті (кореляцій) у подальших розрахунках приймемо кореляційну функцію  $C(t - t')$  у вигляді  $C(t) = \exp(-t/\tau)$ .

Таким чином, загальна система динамічних рівнянь на концентрацію адсорбату  $x(\mathbf{r}, t)$ , фазове поле  $\phi(\mathbf{r}, t)$ , що описує процеси епітаксiального росту пірамідальних структур адсорбату з ефектами електроміграції, та еволюцію стохастичної величини  $\zeta$ , що задає часову зміну напруженості електричного поля, приймає наступний вигляд:

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t} = F - xe^{-\varepsilon x} + D_0 \nabla \cdot \mathcal{M}(x) \nabla x + D_{em}[1 + \zeta] \nabla_x x - \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} = \varpi^2 \Delta \phi + \sin(\pi \phi) + \lambda x (1 + \cos(\pi \phi)), \\ \frac{\partial \zeta}{\partial t} = -\zeta/\tau + \sqrt{\sigma^2} \xi(t) \end{cases} \quad (1.5)$$

де використано позначення  $\mathcal{M}(x) = 1 - \varepsilon M(x)$  та для простоти покладено  $\phi_s = 0$ . У першому рівнянні системи (1.5) остання складова уведена для опису динаміки концентрації адсорбату на зростаючому шарі. У другому рівнянні системи (1.5) складова  $1 + \cos(\pi \phi)$  означає, що мінімуми вільної енергії  $\mathcal{H}$  реалізуються при  $\phi = 2n + 1$ , незалежно від концентрації адатомів [24]. Величина

$\xi(t)$  є білим гаусовим шумом із наступними властивостями:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t').$$

Система рівнянь (1.5) являє собою узагальнену модель фазового поля для числового моделювання процесів формування та росту багат шарових структур адсорбату на поверхнях тонких плівок з урахуванням ефектів електроміграції, індукованих підведеним до підкладки, зовнішнім електричним полем.

## 1.2 Деталі процедури моделювання та статистичного аналізу

Дослідження процесів росту поверхні при гомоепітаксії проводилось в рамках використання процедури числового моделювання. Для цього система рівнянь (1.5) чисельно розв'язувалась на двовимірній квадратній ґратці розміру  $L \times L$  з лінійним розміром  $L = 512\ell$  та періодичними граничними умовами. Розрахунок просторових похідних проводився у  $r$ -просторі з використанням стандартної кінцево-різницевої схеми. Для розрахунку похідної  $\nabla M(x)\nabla x$  використовувалась наступна математична конструкція [37]:

$$\begin{aligned} \nabla_{i,j} M_{i,j} \nabla_{i,j} x_{i,j} = & \frac{M_{i+1,j} + M_{i,j}}{2} \frac{x_{i+1,j} - x_{i,j}}{(\Delta x)^2} \\ & - \frac{M_{i,j} + M_{i-1,j}}{2} \frac{x_{i,j} - x_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} \\ & + \frac{M_{i,j+1} + M_{i,j}}{2} \frac{x_{i,j+1} - x_{i,j}}{(\Delta x)^2} \\ & - \frac{M_{i,j} + M_{i,j-1}}{2} \frac{x_{i,j} - x_{i,j-1}}{(\Delta x)^2}, \end{aligned} \quad (1.6)$$

де використано позначення  $M_{i,j} = M(x_{i,j})$ . Інтегрування системи (1.5) проводилось з використанням методу Верле з подвійною точністю [37]. Кроки інтегрування за простором та часом оберемо  $\Delta x = 1.0$  та  $\Delta t = 10^{-3}$ , відповідно, які забезпечують стійкість обраного методу [38]. Моделювання проводилось до значення безрозмірного часу  $t = 10^3$ . Таким чином, при проведенні числового моделювання розв'язувалось 524 288 рівнянь  $10^6$  разів.

Варто зазначити, що за різних початкових умов (початковий розподіл фазового поля) в процесі епітаксiального росту будуть формуватися різні типи поверхневих структур, які успадковують структуру початкової поверхні. Так,

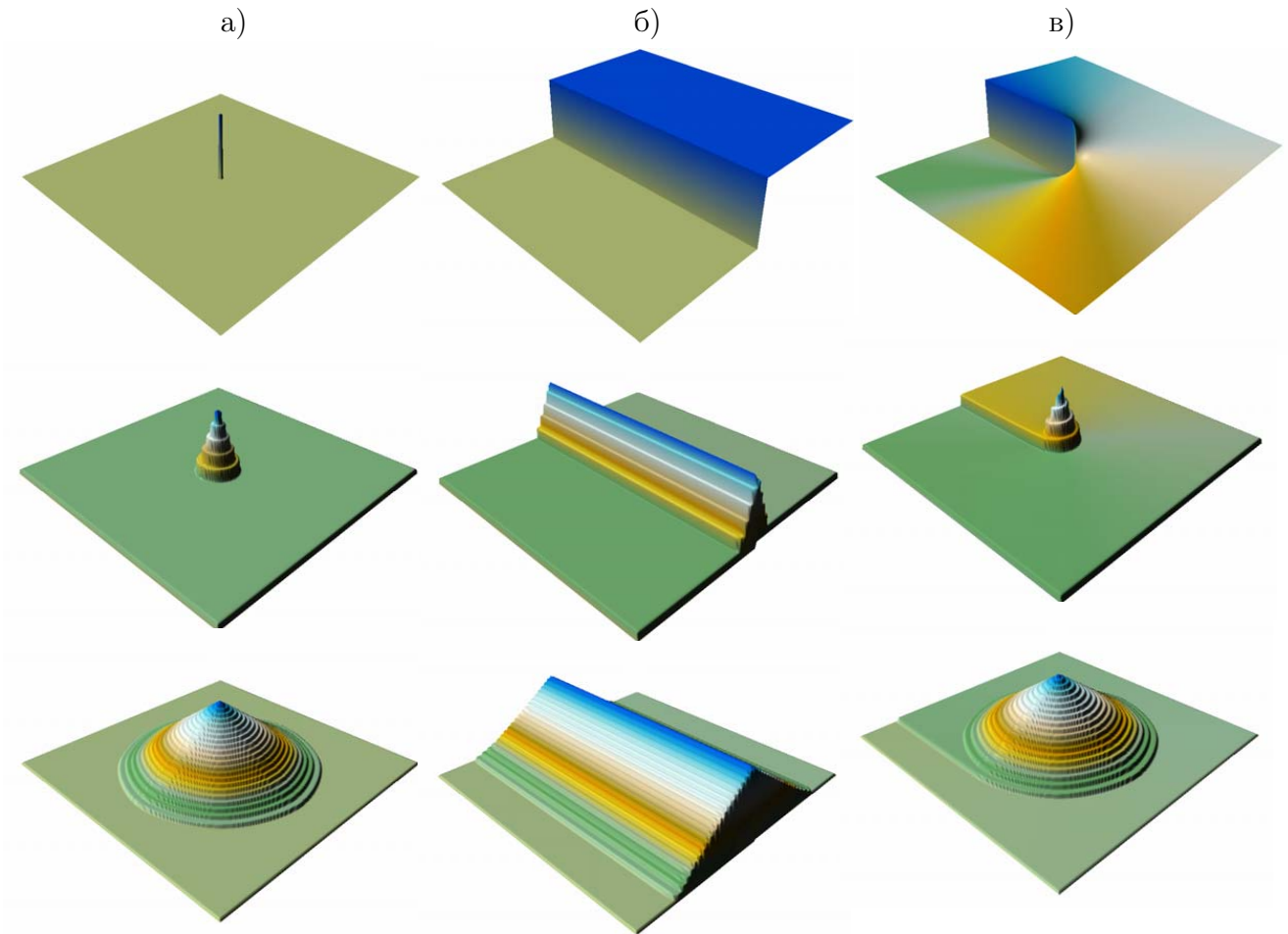


Рисунок 1.1 — Ілюстрації еволюції (згори вниз) параметру порядку  $\phi$  при  $t = 0, 20$  та  $70$  (зверху вниз) при різних початкових умовах: а) один адатом; б) крайова дислокація; в) гвинтова дислокація.

за умови абсолютно гладкої поверхні (без дефектів), що відповідає значенню  $\phi_s(\mathbf{r}, 0) = 0$ , з часом поверхня буде рости шар за шаром без будь-яких структур. За умови наявності точкового дефекту на поверхні (адатома) з часом буде утворюватися “дитяча” піраміда, що зростатиме вгору на адатомі ( $\phi_s = 0$  при всіх значеннях  $i, j$  крім  $i = j = L/2$ , де  $\phi_s = \pm 1$ ). На лінійних дефектах (одна крайова дислокація з початковими умовами  $\phi_s = 1$  для  $i, j > L/2$ , в інших випадках  $\phi_s = 0$ ) тераси піраміди утворюватимуться у паралельних до лінійних дефектів напрямках. Наявність гвинтової дислокації ( $\pi\phi_s = \arctan(j/i)$ ) приведе до формування пірамідальної структури (гвинтової піраміди). Еволюцію типових структур при різних початкових умовах представлено на рис.1.1.

За реальних умов поверхня характеризується ненульовою шорсткістю, а отже, і великою кількістю різних поверхневих дефектів. Для дослідження ро-

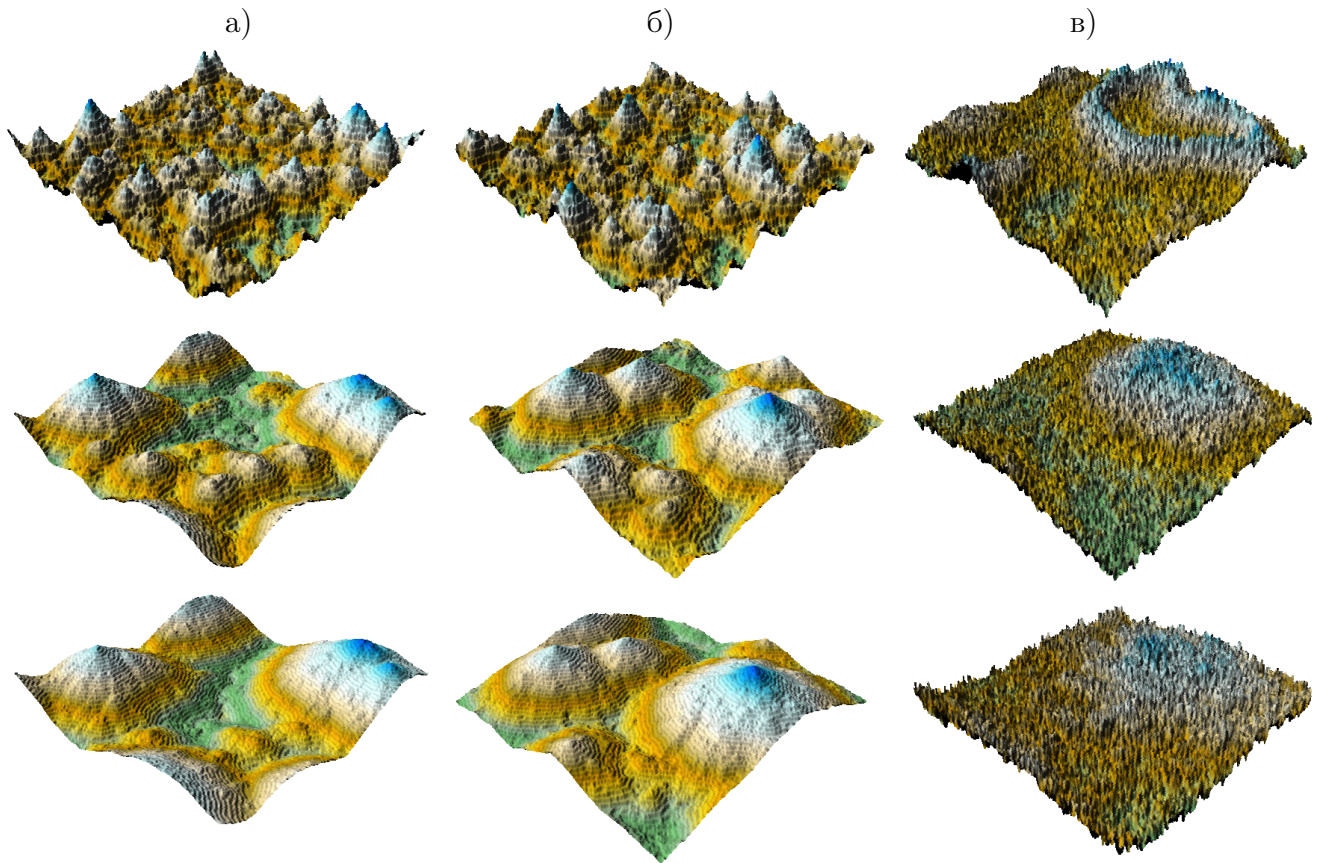


Рисунок 1.2 — Ілюстрації еволюції (згори вниз) параметру порядку  $\phi$  при: а)  $\varepsilon = 4$ ,  $F = 2$ ; б)  $\varepsilon = 4$ ,  $F = 4$ ; в)  $\varepsilon = 2$ ,  $F = 2$ .

сту такої поверхні розглянемо систему з наступними початковими умовами:  $x(\mathbf{r}, t = 0) = 0$  і  $\langle \phi(\mathbf{r}, t = 0) \rangle \equiv \langle \phi_s \rangle = 0$  з малою дисперсією  $\langle (\delta\phi(\mathbf{r}, t = 0))^2 \rangle = 0.1$  (Гаусів розподіл параметру порядку). Типова картина еволюції системи при різних значеннях енергії взаємодії адсорбату  $\varepsilon$  та потоку осадження  $F$  для детерміністичної системи зображена на рис.1.2. З нього видно, що під час еволюції системи на поверхні при підвищеній енергії взаємодії адсорбату (див. рис.1.2а та рис.1.2б) утворюються пірамідальні структури. З часом ці структури ростуть та збільшуються: на великих проміжках часу залишаються лише великі піраміди. У випадку малих  $\varepsilon$  (див. рис.1.2в) структури починають утворюватися вже на ранніх стадіях, однак з часом, в зв'язку з малою енергією взаємодії адсорбату, укрупнення не відбувається. Тут процеси десорбції переважають процеси поєднання кластерів адатомів.

З метою дослідження впливу анізотропної дифузії з коефіцієнтом  $D_{em}$  на динаміку росту поверхні та її статистичні властивості зафіксуємо параметри

$\varpi^2 = 2$  та  $\lambda = 10$ , що керують динамікою фазового поля, оберемо  $F = 2$ ,  $\varepsilon = 4$  та покладемо  $D_0 = 1$ , коли в ізотропному випадку при епітаксіальному рості формуються добре виражені пірамідальні структури адсорбату; у якості початкових умов для фазового поля оберемо гаусовий розподіл з  $\langle \phi(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0$  та  $\langle (\delta\phi)^2 \rangle = 0.1$ , враховуючи ненульову шорсткість підкладки; для поля концентрації адсорбату покладемо  $x(\mathbf{r}, 0) = 0$ .

З метою проведення статистичного аналізу процесу росту поверхні при осадженні далі проаналізуємо динаміку дисперсії  $W^2$  фазового поля  $\phi$  (середньоквадратичного відхилення  $\phi$ ), асиметрії  $m_3$  та ексцесу  $m_4$ , які визначаються наступним чином [39]:

$$W^2(t) = \langle [\phi(\mathbf{r}, t) - \langle \phi(\mathbf{r}, t) \rangle]^2 \rangle$$

$$m_3 = \frac{\langle (\phi(\mathbf{r}) - \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle)^3 \rangle}{(W^2)^{3/2}}, \quad m_4 = \frac{\langle (\phi(\mathbf{r}) - \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle)^4 \rangle}{(W^2)^2},$$

де  $\langle \phi(\mathbf{r}, t) \rangle$  задає середнє значення висоти поверхні, визначене у кожен момент часу  $t$  стандартним чином:  $\langle \phi(\mathbf{r}, t) \rangle \equiv L^{-2} \sum_{\mathbf{r}} \phi(\mathbf{r}, t)$ . Дисперсія  $W^2$  відіграє роль параметра порядку для процесу структурування. Її зростання з часом свідчить про проходження процесів упорядкування – росту поверхневих структур. Асиметрія  $m_3$  характеризує симетрію розподілу висоти поверхні (фазового поля  $\phi(\mathbf{r})$ ) відносно середнього рівня. Так, позитивне значення величини  $m_3$  визначає, що більшість точок поверхні розташовані над середнім рівнем; при  $m_3 < 0$  більшість значень поля висоти поверхні мають значення менші за середнє  $\langle \phi(\mathbf{r}) \rangle$ . Ексцес  $m_4$  характеризує хаотичність розподілу висоти і описує випадковість (стохастичність) поверхні відносно гаусової поверхні. Для поверхні, що характеризується гаусовим розподілом висот, маємо:  $m_3 = 0$  та  $m_4 = 3$ .

### 1.3 Ефекти електроміграції при епітаксіальному рості тонких плівок

У даному розділі нами буде проведено дослідження впливу ефектів електроміграції на динаміку росту тонкої плівки, структурування поверхні та статистичні характеристики поверхні у детерміністичній моделі шляхом варіюва-

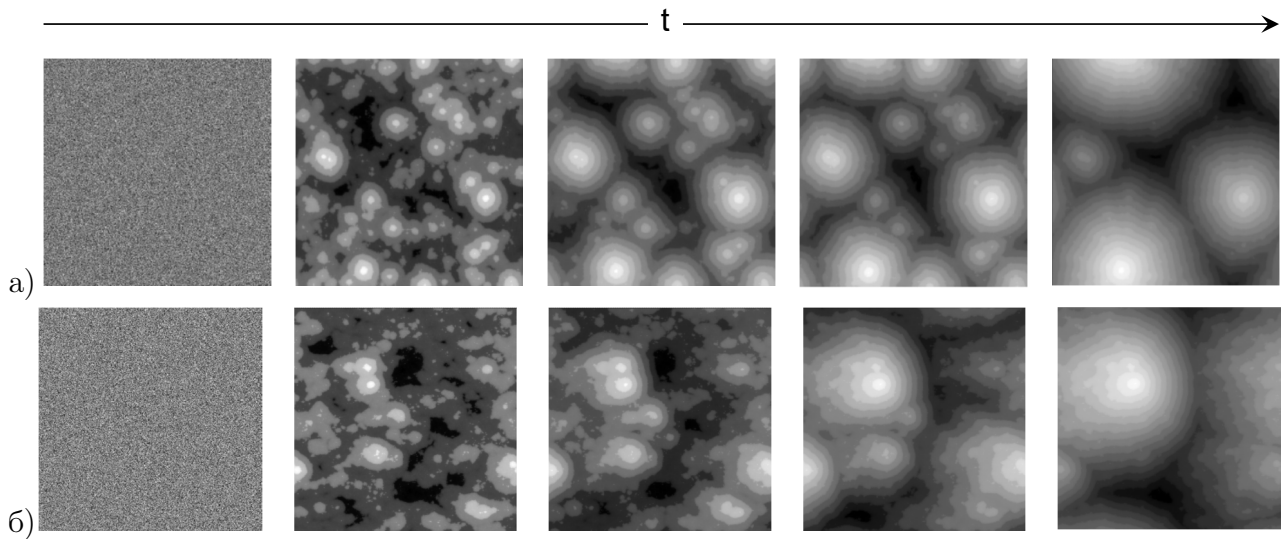


Рисунок 1.3 — Типова еволюція морфології поверхні при епітаксiальному рості: а) за умови відсутності ефектів електроміграції; б) з урахуванням ефектів електроміграції при  $D_{em} = 0.5$

ння напруженості підведеного до підкладки електричного поля, що задає силу в анізотропії поверхневої дифузії адатомів.

Знімки типової еволюції морфології поверхні (поля  $\phi(\mathbf{r})$ ) у фіксовані моменти часу  $t$  при моделюванні процесів росту плівки при гомоепітаксії за відсутності електричного поля біля підкладки (в моделі з ізотропною поверхневою дифузією) та з урахуванням індукованої поверхневої дифузії наведено на Рис. 1.3а,б, відповідно. Тут у відтінках сірого кольору наведено значення висоти зростаючої поверхні від мінімального  $\phi_{min}$  (чорний колір) до максимального  $\phi_{max}$  (білий колір). Розглянемо спочатку випадок ізотропної поверхневої дифузії адатомів (без урахування ефектів електроміграції), що представлено на рис.1.3а. З рисунка видно, що упродовж еволюції системи (1.5) з початкового гаусового розподілу поля висоти поверхні (параметра порядку  $\phi$ ) процеси самоорганізації адсорбату приводять до формування відокремлених островів адсорбату. На початкових етапах росту структур адсорбату формуються чітко виражені тераси пірамідальних структур. Ці структури збільшуються з часом: їх висота та лінійний розмір стають більшими. При тривалому осадженні структури адсорбату починають взаємодіяти так, що більші піраміди поглинають менші. Скінченність ґратки та використання періодичних граничних умов приводить до реалізації однієї пірамідальної структури у границі великого часу



осадження. Слід зазначити, що відповідно до побудованої моделі, мінімальне значення фазового поля  $\phi_{min}$  зростає з часом. Останнє свідчить про те, що упродовж осадження зростає як товщина плівки, так і висота поверхневих багато-шарових структур.

На рис.1.3б представлено еволюцію морфології поверхні з урахуванням ефектів електроміграції, викликаних дією підведеного до підкладки зовнішнього електричного поля, при  $D_{em} = 0.5$ . Тут, на відміну від випадку епітаксіального росту в умовах ізотропної поверхневої дифузії адсорбату, вже на початкових стадіях структури адсорбату, що мають де-кілька шарів, є анізотропними і ширина терас цих пірамідально-подібних структур у напрямку підведеного поля є більшою, ніж у напрямку, перпендикулярному до напрямку поля. З плином часу ці анізотропні структури збільшуються у розмірах, а також збільшується кількість шарів адсорбату, з яких вони складаються.

Далі проаналізуємо статистичні властивості процесу росту поверхневих структур, розглядаючи часову еволюцію параметра порядку  $W^2$ , асиметрії  $m_3$  та ексцесу  $m_4$ . Отримані залежності  $W^2(t)$  при різних значеннях коефіцієнту індукованої електроміграцією дифузії  $D_{em}$  наведено на Рис. 1.4. З рисунку 1.4 видно, що на початковій стадії епітаксіального росту (стадія I), незалежно від значення коефіцієнту індукованої дифузії  $D_{em}$ , дисперсія  $W^2$  не змінюється з часом, набуваючи значень  $\sim 10^{-3}$ . На цій стадії відбувається накопичення адсорбату на першому шарі. Початок процесів зростання плівки супроводжується осциляторною динамікою  $W^2(t)$ , доки  $W^2 < 1$  (стадія II). При цьому, частота цих осциляцій є інваріантною до зміни коефіцієнту індукованої дифузії. Зі збільшенням коефіцієнту індукованої дифузії осциляторна динаміка  $W^2(t)$  реалізується упродовж довшого часу осадження. На наступній стадії (стадія III) величина  $W^2$  зростає з часом, при чому динаміка її росту суттєво визначається силою анізотропії поверхневої дифузії адсорбату, що задається параметром  $D_{em}$ . Порівнюючи криві для ізотропного (крива 1 при  $D_{em} = 0$ ) та анізотропного (крива 2 при  $D_{em} = 0.5$ ) випадків маємо, що анізотропія у поверхневій дифузії, спричинена ефектами електроміграції, приводить до уповільнення процесів росту поверхневих структур у процесі осадження. Збільшення кое-

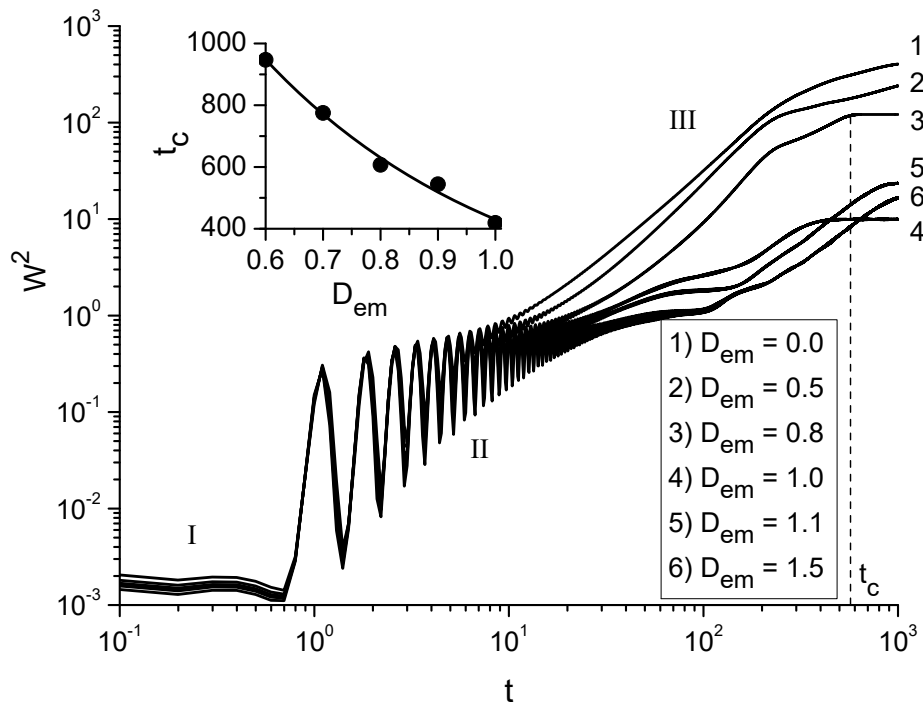


Рисунок 1.4 — Еволюція дисперсії  $W^2$  при різних значеннях коефіцієнту дифузії  $D_{em}$ . На вставці на наведено залежність моменту часу  $t_c$  настання стаціонарного режиму від коефіцієнту дифузії  $D_{em}$

фіцієнту анізотропної поверхневої дифузії адсорбату, спричиненої підведеним до підкладки електричним полем, приводить, разом із подальшим уповільненням процесів структуризації поверхні, до реалізації стаціонарного режиму в динаміці  $W^2(t)$  за умови тривалого осадження при  $t = t_c$  (див. криву 3 при  $D_{em} = 0.8$ ). Збільшення коефіцієнту індукованої дифузії  $D_{em}$  приводить до зменшення значення моменту часу  $t_c$  (пор. криві 3 та 4 на Рис. 1.4). Більш детальний аналіз показав, що  $t_c$  експоненціально зменшується з  $D_{em}$ , як це показано суцільною кривою на вставці до Рис. 1.4; дані числового моделювання представлено кружками. За умови досить сильної анізотропії у поверхневій дифузії, при  $D_{em} > 1$ , подальше збільшення  $D_{em}$  приводить до уповільнення динаміки  $W^2(t)$  (див. криві 5 та 6 на Рис. 1.4).

Динаміку еволюції асиметрії  $m_3$  та ексцесу  $m_4$  подано на Рис. 1.5а та Рис. 1.5б, відповідно. На початкових стадіях осадження як асиметрія  $m_3$ , так і ексцес  $m_4$  набувають гаусових значень  $m_3 \simeq 0$ ,  $m_4 \simeq 3$ , що відповідає стадії I у динаміці  $W^2(t)$ . Осциляторна динаміка обох величин (стадія II) характеризується значно більшою амплітудою, порівняно з динамікою параметра порядку

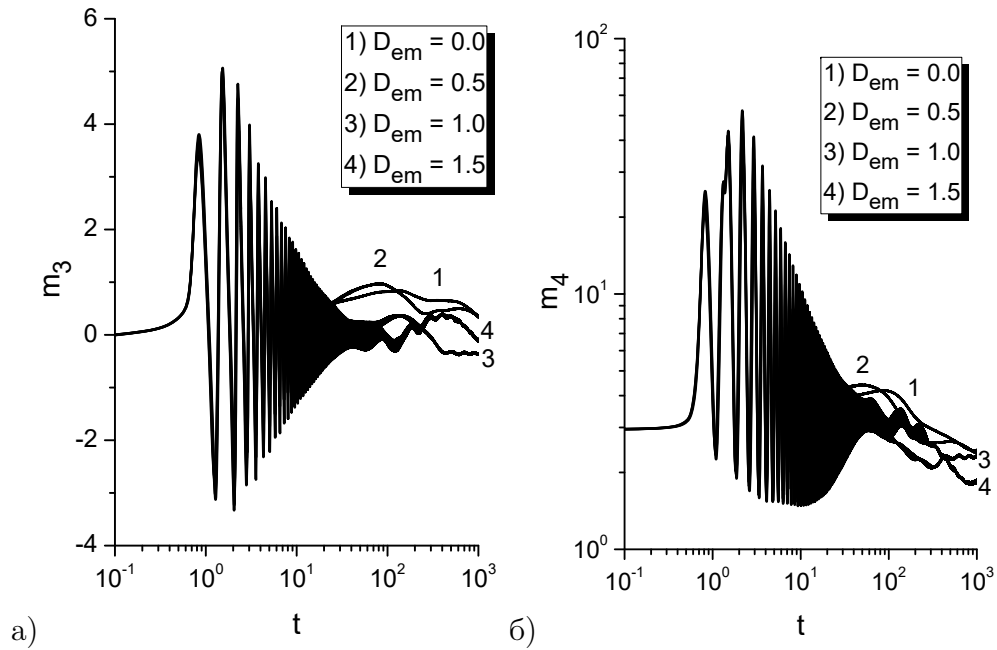


Рисунок 1.5 — Еволюція а) асиметрії  $m_3$  та б) ексцесу  $m_4$  при різних значеннях коефіцієнту дифузії  $D_{em}$

$W^2(t)$ . На пізніх стадіях осадження (стадія III) як  $m_3$ , так і  $m_4$  слабо змінюються з часом. Варто відзначити, що при певних значеннях коефіцієнту анізотропної дифузії обидві величини ілюструють стаціонарний режим (див. криві 3 при  $D_{em} = 1$ ). Проте, слід відмітити, що стаціонарність величин  $W^2$ ,  $m_3$  та  $m_4$  свідчить лише про незмінність статистичних характеристик зростаючої поверхні, а не про стаціонарність процесу осадження чи росту плівки. Динаміку росту товщини плівки та висоти поверхневих структур буде проаналізовано нижче.

З метою детального вивчення ефектів уповільнення динаміки росту поверхні за рахунок ефектів електроміграції, спричинених впливом зовнішнього електричного поля, розрахуємо середній час  $\langle t \rangle$ , необхідний для росту однієї тисячі атомових шарів при різних значеннях коефіцієнту індукованої дифузії  $D_{em}$ . Отримані результати представлено на Рис. 1.6 заповненими кружками. Видно, що з ростом коефіцієнту дифузії  $D_{em}$  середній час, необхідний для росту 1000 атомових шарів збільшується. Слід відзначити, що закон росту часу  $\langle t \rangle$  з  $D_{em}$  змінюється при перевищенні величиною  $D_{em}$  критичного значення  $D_{em}^c \simeq 0.95$ . Отримані числові результати для  $D_{em} < D_{em}^c$  добре апроксимуються експоненційною зростаючою функцією  $\langle t \rangle = t_1 + a_1 \exp(D_{em}/b_1)$ , поданою штриховою кривою на Рис. 1.6. При  $D_{em} > D_{em}^c$  середній час зро-

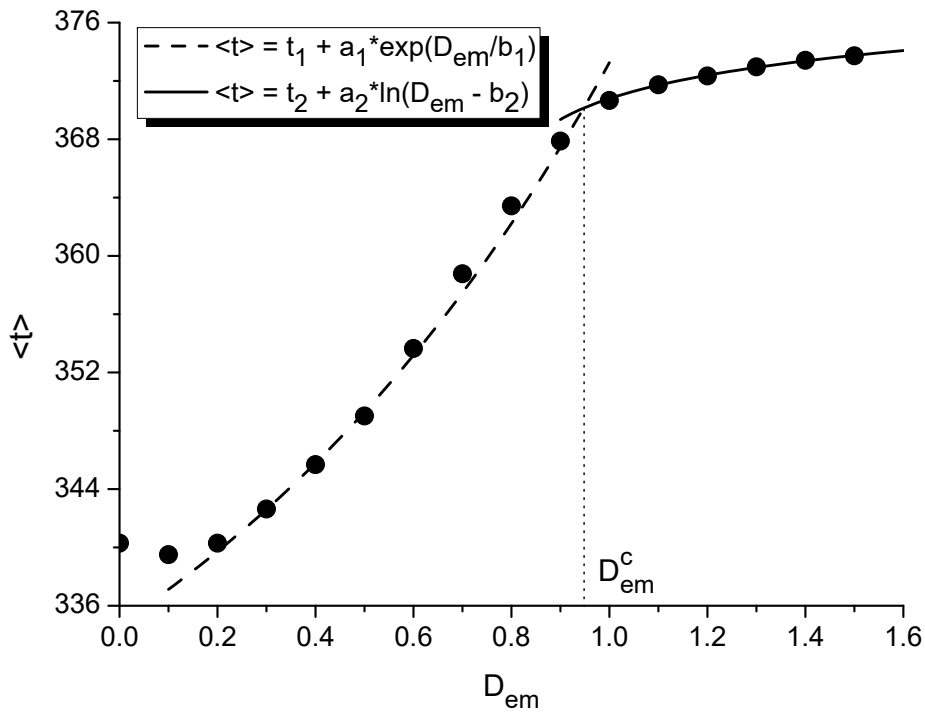


Рисунок 1.6 — Залежність часу, необхідного для росту 1000 атомових шарів від коефіцієнту дифузії  $D_{em}$ . Апроксимаційні штрихова та суцільна криві параметризуються значеннями:  $t_1 = 312.37$ ,  $a_1 = 22.4$ ,  $b_1 = 1$ ; та  $t_2 = 374.55$ ,  $a_2 = 2.6$ ,  $b_2 = 0.76$ , відповідно

стає повільніше з  $D_{em}$  і числові дані відповідають логарифмічній залежності  $\langle t \rangle = t_2 + a_2 \exp(D_{em}/b_2)$  (див. суцільну криву на Рис. 1.6). Критерієм для апроксимації отриманих числових результатів було максимальне значення коефіцієнту детермінації.

Далі проаналізуємо динаміку росту товщини плівки та висоти поверхневих пірамідальних структур при варіюванні коефіцієнту індукованої дифузії  $D_{em}$ . Як було вказано вище, упродовж осадження зростає як максимальне, так і мінімальне значення фазового поля,  $\phi_{max}$  та  $\phi_{min}$ , відповідно. Таким чином,  $d \equiv \phi_{min}$  можна асоціювати із товщиною плівки, щільно заповненої адсорбатом, тоді як висота поверхневих структур визначається різницею  $h \equiv (\phi_{max} - \phi_{min})$ . Еволюцію  $d$  та  $h$  подано на Рис. 1.7 штриховими та суцільними кривими, відповідно. Тут результати подано при  $d, h \geq 1$ , нехтуючи стадіями перегрупування адсорбату на підкладці: криві з позначкою 1 отримано для ізотропного випадку при  $D_{em} = 0$ ; криві з позначкою 2 відповідають анізотропному випадку з  $D_{em} = 1.5$ . Перш за все слід відзначити, що електроміграція суттєво не впливає на закон росту товщини плівки,  $d(t) \simeq bt$ , де швидкість росту спадає від

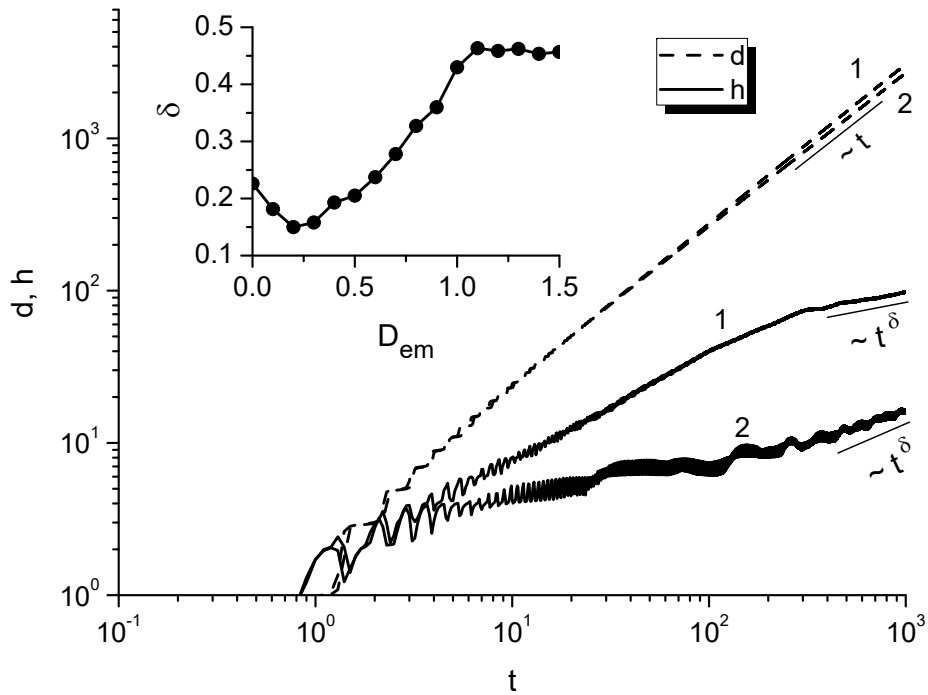


Рисунок 1.7 — Еволюція товщини плівки  $d$  та висоти поверхневих структур  $h$  при різних значеннях коефіцієнту дифузії  $D_{em}$ : 1)  $D_{em} = 0.0$ ; 2)  $D_{em} = 1.5$ . На вставці наведено залежність показника росту  $\delta$  від коефіцієнту дифузії  $D_{em}$  у режимі огрубіння

$b = 3.04$  при  $D_{em} = 0$  до  $b = 2.68$  при  $D_{em} = 1.5$  (див. штрихові криві 1 та 2 на Рис. 1.7). Динаміка росту висоти поверхневих структур  $h(t)$  суттєво залежить від коефіцієнту дифузії  $D_{em}$ : збільшення  $D_{em}$  приводить не лише до суттєвого зменшення висоти поверхневих структур, а ще й до певного стохастичного характеру залежності  $h(t)$  (пор. криві 1 та 2 при  $D_{em} = 0$  та  $D_{em} = 1.5$  на Рис. 1.7). Слід відзначити, що на пізній стадії еволюції висоти структур  $h(t)$  реалізується степеневий закон  $h(t) \propto t^\delta$ . Аналіз суцільних кривих 1 та 2 показує, що показник росту  $\delta$  залежить від коефіцієнту дифузії  $D_{em}$ . На вставці до Рис. 1.7 представлено значення параметру росту  $\delta$  для різних  $D_{em}$ . Видно, що при  $D_{em} < D_{em}^c$  показник росту  $\delta$  зменшується, набуває мінімального значення та починає зростати. Таким чином посилення ефектів електроміграції з одного боку приводить до зменшення висоти поверхневих структур, але з іншого боку – до пришвидшення динаміки росту висоти структур на пізній стадії. При цьому, при виконанні умови  $D_{em} > D_{em}^c$  показник росту суттєво не залежить від коефіцієнту індукованої дифузії та приймає значення  $\delta \simeq 0.46$  (див. вставку на Рис. 1.7).

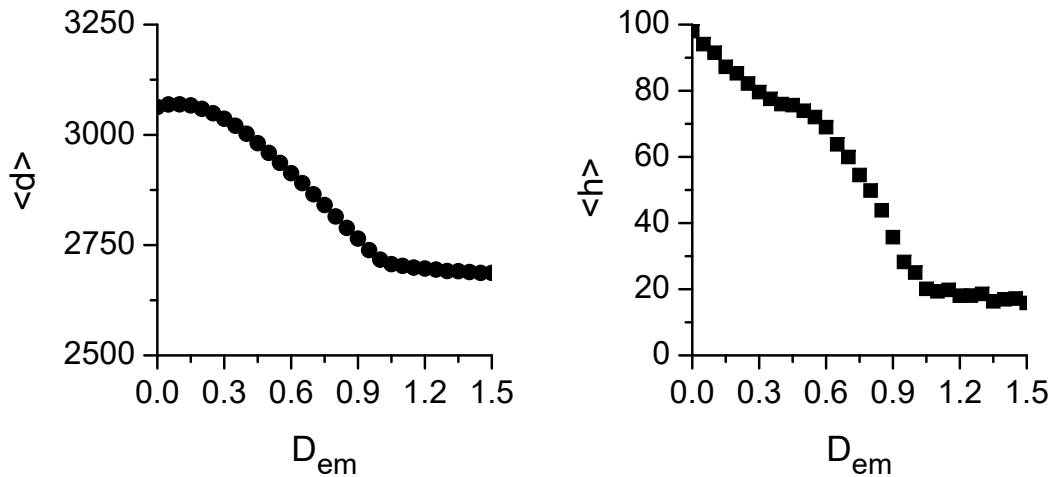


Рисунок 1.8 — Залежності середніх значень товщини плівки  $\langle d \rangle$  та висоти поверхневих структур  $\langle h \rangle$  від коефіцієнту дифузії  $D_{em}$  при довгостроковому осадженні ( $t = 10^3$ )

Далі проаналізуємо вплив коефіцієнту дифузії  $D_{em}$  на середні значення товщини плівки  $\langle d \rangle$  та висоти поверхневих структур  $\langle h \rangle$  у квазі-стаціонарному режимі при довгостроковому осадженні (при  $t = 10^3$ ). Відповідні результати подано на Рис. 1.8. Видно, що збільшення напруженості електричного поля біля підкладки при  $D_{em} < D_{em}^c$  приводить до зменшення як товщини плівки, так і висоти поверхневих структур; при  $D_{em} > D_{em}^c$  ефекти електроміграції суттєво не впливають на значення  $\langle d \rangle$  та  $\langle h \rangle$ . При цьому, варто відзначити, що товщина плівки зменшується на рівні 15 % зі збільшенням коефіцієнту анізотропної дифузії  $D_{em}$ , тоді як висота поверхневих структур, а отже й кількість шарів пірамідальних структур суттєво зменшується з ростом  $D_{em}$ . Таким чином, ефекти електроміграції призводять до руйнування терас пірамідальних структур адсорбату та сприяють гомогенізації розподілу адсорбату на плівці.

Для характеристики впливу сили анізотропії поверхневої дифузії адсорбату, викликані ефектами електроміграції, на розподіл поля висоти поверхні за значеннями при довгостроковому осадженні далі проаналізуємо залежності значень асиметрії  $m_3$  та ексцесу  $m_4$  поверхні при  $t = 10^3$  від коефіцієнту індукованої електричним полем дифузії  $D_{em}$ . Розраховані залежності  $m_3(D_{em})$  та  $m_4(D_{em})$  наведено на Рис. 1.9. Типові ілюстрації морфології поверхні при  $t = 10^3$  та різних значеннях коефіцієнту дифузії  $D_{em}$  подано на Рис. 1.10. Розраховані розподіли поля висоти за значеннями представлено на Рис. 1.11. Аналіз отриманих результатів показує, що за умови ізотропної дифузії (при  $D_{em} = 0$ )

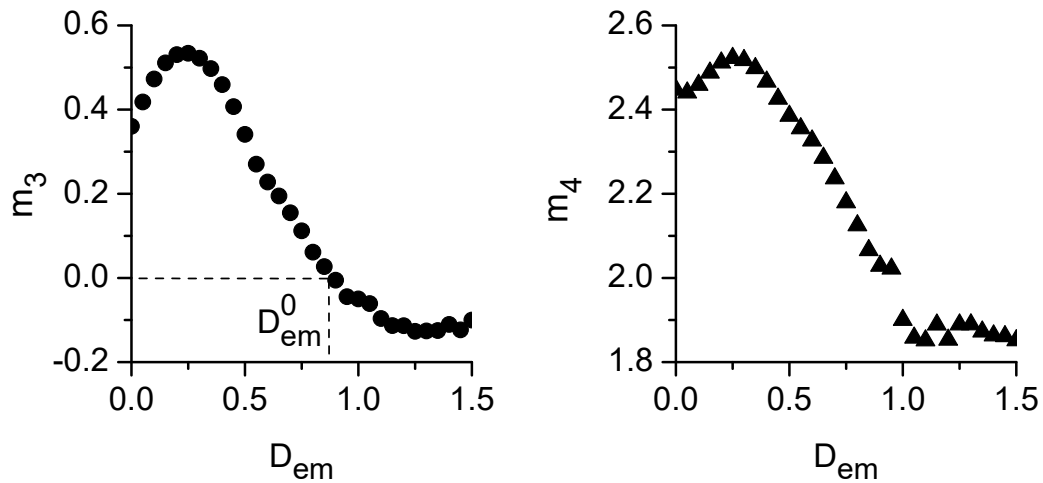


Рисунок 1.9 — Залежності статистичних моментів  $m_3$  і  $m_4$  від коефіцієнту дифузії  $D_{em}$  при  $t = 10^3$

поверхня характеризується значеннями  $m_3 > 0$  та  $m_4 < 3$ , а, отже, поверхня статистично відрізняється від гаусової: розподіл висот є асиметричним і більшість значень висоти поверхні є більшими за середнє значення. Розрахований розподіл поля висоти за розмірами подано на Рис. 1.11 при  $D_{em} = 0.0$ . Тут числові дані, представлені порожніми кружками, добре узгоджуються з узагальненим розподілом екстремальних значень (Generalized Extreme Value Distribution) у вигляді [40]:

$$f(\phi) = \kappa^{-1} \exp(-z) \exp\{-\exp(-z)\},$$

де  $z \equiv (\phi - \mu)/\kappa$ ;  $\mu$  та  $\kappa$  це параметри апроксимації. Видно, що даний розподіл є асиметричним і більшість значень поля  $\phi$  характеризується значеннями більшими за середнє  $\langle \phi \rangle$ , тоді як для найбільш імовірного значення  $\phi_p$  маємо  $\phi_p < \langle \phi \rangle$ . Відхилення  $m_4$  від значення  $m_4 = 3$ , характерного для гаусового розподілу, (див. Рис. 1.9) свідчить про просторовий порядок поверхні з реалізацією терас у просторовому розподілі висот, що є відмінним від гаусового випадкового поля. При збільшенні коефіцієнту індукованої дифузії  $D_{em}$  обидві статистичні величини  $m_3$  та  $m_4$  дещо збільшуються, набувають максимального значення та зменшуються до відповідних фіксованих значень. При цьому асиметрія змінює знак при  $D_{em} = D_{em}^0$ . Таким чином, збільшення  $D_{em}$  приводить до морфологічного перетворення в структурі поверхні: від поверхні з більшістю значень висоти більших за середнє значення до поверхні з переважною

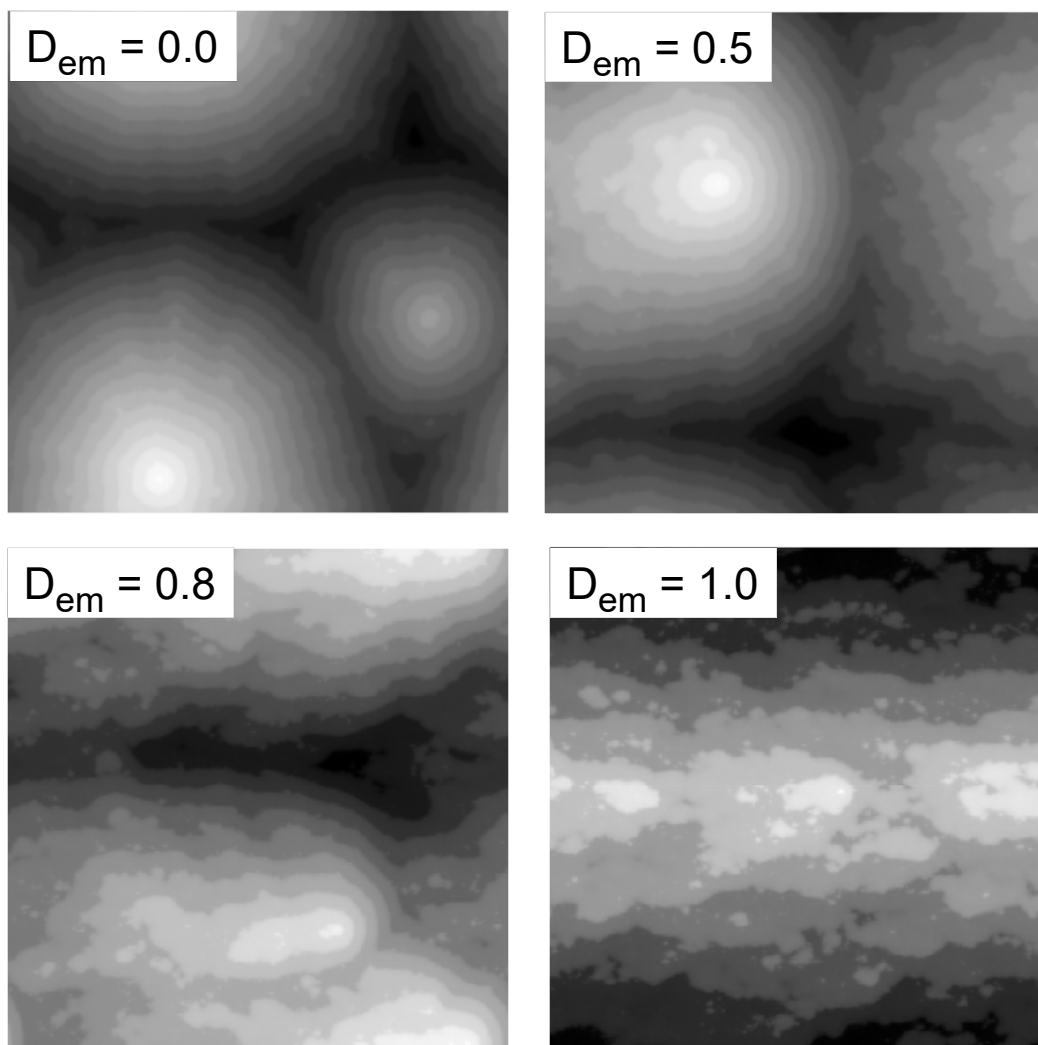


Рисунок 1.10 — Типові знімки морфології поверхні у квазі-стаціонарному режимі при різних значеннях коефіцієнту дифузії  $D_{em}$

більшістю значень висоти менших за середнє. При цьому, зменшення значення ексцесу  $m_4$  з ростом  $D_{em}$  свідчить про збільшення кореляцій вздовж поверхні і, як результат, до збільшення ширини терас поверхневих структур.

При  $D_{em} = 0.5$  поверхневі структури адсорбату характеризуються анізотропією у напрямку підведеного до підкладки електричного поля завдяки ефектам електроміграції (див. Рис. 1.10). При цьому, розподіл висот стає більш симетричним і характеризується наявністю двох основних піків: при  $\phi = \phi_p^- < \langle \phi \rangle$  та  $\phi = \phi_p^+ > \langle \phi \rangle$  (див. розподіл на Рис. 1.11 при  $D_{em} = 0.5$ ). Числові дані добре апроксимуються суперпозицією двох гаусіанів.

З подальшим збільшенням коефіцієнту індукованої дифузії поверхневі структури стають видовженими у напрямку підведеного поля (див. ілюстрацію по-



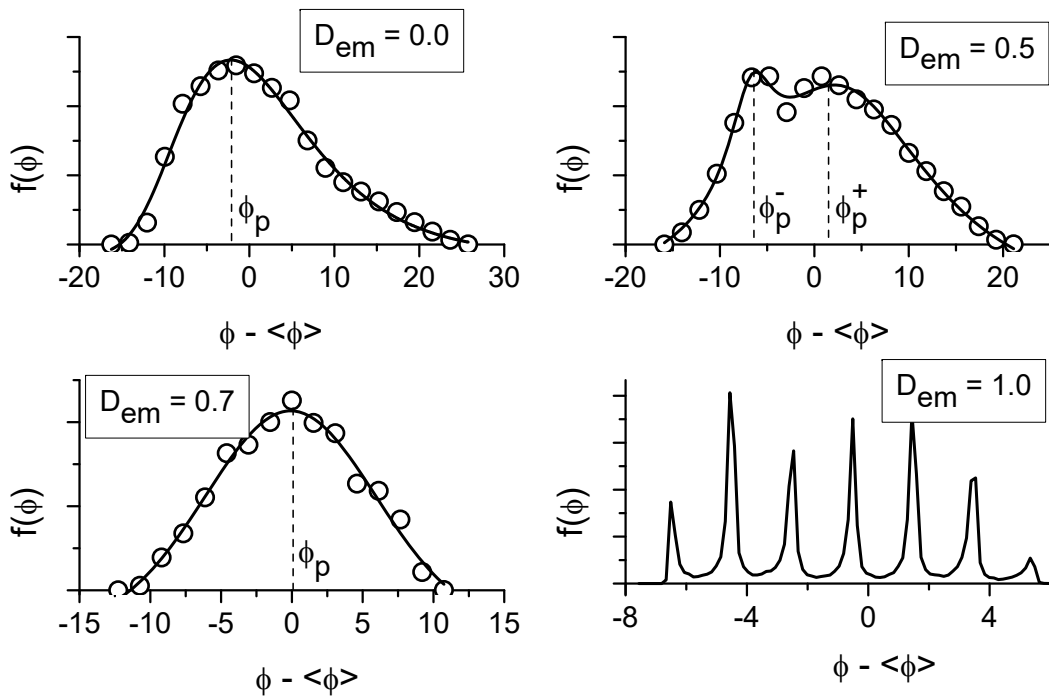


Рисунок 1.11 — Розподіли висоти поверхні, відрахованої від середнього значення  $\langle \phi \rangle$  для структур, наведених на Рис. 1.10

верхні на Рис. 1.10 при  $D_{em} = 0.8$ ). Варто відзначити, що при  $D_{em} \simeq 0.8$  маємо  $m_3 = 0$  (див. Рис. 1.9), що свідчить про симетричний розподіл значень висоти поверхні відносно середнього значення  $\langle \phi \rangle$  (див. Рис. 1.11 при  $D_{em} = 0.8$ ). Суцільною кривою тут наведено апроксимацію числових даних (поданих пустими кружками) одномодовим гаусіаном, для якого  $\phi_p \simeq \langle \phi \rangle$ .

При завищених значеннях коефіцієнту індукованої дифузії  $D_{em} > D_{em}^c$  як асиметрія, так і ексцес суттєво не залежать від  $D_{em}$  (див. Рис. 1.9). При таких умовах вирощування прикладене електричне поле приводить до руйнування добре виражених пірамідальних поверхневих структур. Тут формується один перколюючий кластер адсорбату з малою кількістю широких терас, що характеризуються негладкою границею (див. Рис. 1.10 при  $D_{em} = 1.0$ ). Така поверхня суттєво відрізняється від гаусової, оскільки характеризується значенням ексцесу  $m_4 \simeq 1.85$  (див. Рис. 1.9). Асиметрія  $m_3 \simeq -0.15$  свідчить про незначну більшість значень поля висоти, що є меншими за середнє значення. Відповідний розподіл подано на Рис. 1.11 при  $D_{em} = 1.0$ , який ілюструє незначну кількість терас (кількість піків визначає кількість терас).

## 1.4 Керування морфологією поверхні за рахунок флуктуацій напруженості електричного поля

У даному розділі сконцентруємо нашу увагу на встановленні впливу флуктуацій напруженості підведеного до підкладки електричного поля. З цією метою зафіксуємо середнє значення напруженості поля  $D_{em}^0 = 0.5$  та будемо проводити моделювання динаміки росту поверхневих структур адсорбату при епітаксiальному рості з урахуванням ефектів електроміграції, варіюючи значення інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  та часу їх кореляції  $\tau$ .

Спочатку проаналізуємо часову залежність коефіцієнту індукованої дифузії  $D_{em}$  при різних значеннях інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  та часу їх кореляції  $\tau$ . Відповідні результати подано на рис.1.12, 1.13 та 1.14. На рисунках 1.12 та 1.13 представлено часові ряди  $D_{em}(t)$  (верхні панелі), кореляційні функції  $C(t)$  (нижня панель зліва) та розподіли за значеннями  $f(D_{em})$  (нижня панель справа) при  $\tau = 0.5$  та різних значеннях інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2 = 0.1$  та  $\sigma^2 = 1.0$ , відповідно.

Із часових залежностей  $D_{em}(t)$ , представлених на верхніх панелях на рис.1.12 та 1.13 можна бачити, що збільшення інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  приводить до суттєвого збільшення у розкиді значень  $D_{em}$ . При проведенні розрахунків ми обмежували випадкове значення наступним чином:  $0 \leq D_{em} \leq 1$ , враховуючи що максимальна амплітуда флуктуацій  $D_{em}$  не перевищує середнє значення  $D_{em}^0$ . На нижніх панелях зліва на рис.1.12 та 1.13 наведено залежності кореляційних функцій  $C(t)$  процесів  $D_{em}(t)$ , розраховані стандартним чином:

$$C(t) = \frac{2}{T} \int_0^{T/2} D_{em}(t) D_{em}(t') dt',$$

де  $T$  – повний час осадження. З отриманих результатів видно, що кореляційна функція  $C(t)$  спадає з часом на певному інтервалі та надалі залишається незмінною. Кореляція процесу  $D_{em}(t)$  зменшується з часом за експоненційним законом  $\sim \exp(-t/\tau)$ , як це показано на вставках суцільними кривими (числові дані подано сірими символами). Апроксимація числових даних аналітичними кривими дала добре узгодження зі значенням часу релаксації  $\tau = 0.5$  для обох

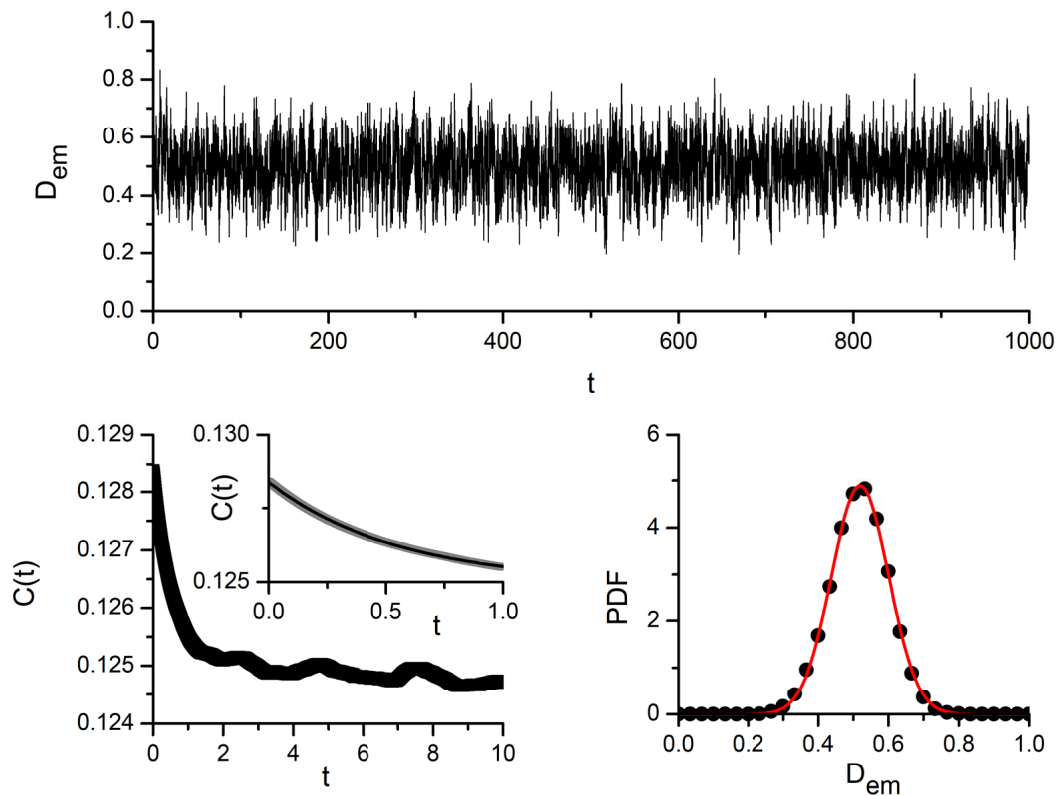


Рисунок 1.12 — Часовий ряд  $D_{em}(t)$  (верхня панель), кореляційна функції  $C(t)$  (нижня панель зліва; на вставці наведено кореляційну функцію та відповідну апроксимацію експоненційною функцією) та розподіл за значеннями  $f(D_{em})$  при  $\tau = 0.5$  та  $\sigma^2 = 0.1$ .

випадків, не залежно від значення інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$ . На нижніх панелях справа наведено розподіли за значеннями  $D_{em}$  кружками; суцільними кривими наведено апроксимації числових даних Гаусовим розподілом у стандартному вигляді:

$$f(D_{em}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - D_{em}^0)^2}{2\sigma^2}\right),$$

де величина  $\sigma^2$  задає дисперсію розподілу та пов'язана з інтенсивністю флуктуацій величини  $D_{em}$ . Отримані результати щодо співпадіння числових результатів та теоретичних кривих для кореляційної функції та функції розподілу за значеннями свідчать про стійкість числового методу адекватність числових розрахунків.

На рис.1.14 наведено часовий ряд  $D_{em}(t)$  (верхня панель), кореляційна функції  $C(t)$  (нижня панель зліва; на вставці наведено кореляційну функцію та відповідну апроксимацію експоненційною функцією) та розподіл за значеннями  $f(D_{em})$  при  $\tau = 0.1$  та  $\sigma^2 = 0.5$ . Тут слід відмітити, що числові дані

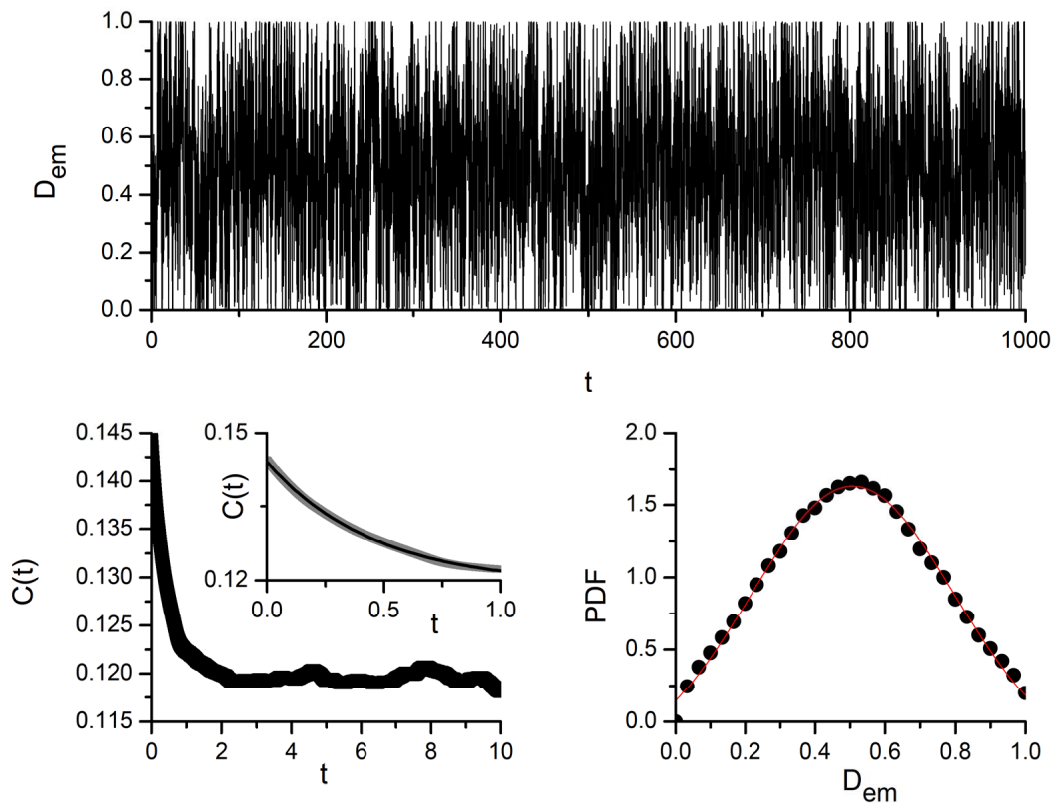


Рисунок 1.13 — Часовий ряд  $D_{em}(t)$  (верхня панель), кореляційна функція  $C(t)$  (нижня панель зліва; на вставці наведено кореляційну функцію та відповідну апроксимацію експоненційною функцією) та розподіл за значеннями  $f(D_{em})$  при  $\tau = 0.5$  та  $\sigma^2 = 1.0$ .

щодо кореляційної функції добре апроксимуються експоненційною функцією зі значенням часу кореляції  $\tau = 0.1$ .

Далі розглянемо залежності основних статистичних величин, а саме, параметра порядку  $W^2$ , асиметрії  $m_3$ , ексцесу  $m_4$ , а також, товщини плівки  $d$  та висоти поверхневих структур  $h$ , що характеризують сформовану плівку з поверхневими структурами, від інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  та часу їх кореляції  $\tau$  у границі довготривалого осадження. Для було проведено низку числових експериментів, варіюючи значення інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  та часу їх кореляції  $\tau$  від 0 до 1 з кроком 0.1. Отримані дані у часовому інтервалі від 900 до 1000 усереднювалися. Результати представлено на рис.1.15–1.22 для параметра порядку  $W^2$ , товщини плівки  $d$ , висоти поверхневих структур  $h$ , асиметрії  $m_3$  та ексцесу  $m_4$ , відповідно.

Розглянемо спочатку залежність стаціонарного значення параметра порядку  $W^2$  від інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  коефіцієнту індукованої поверхневої дифузії  $D_{em}$  та часу релаксації  $\tau$ , що представлено на рис.1.15. Тут у відтін-

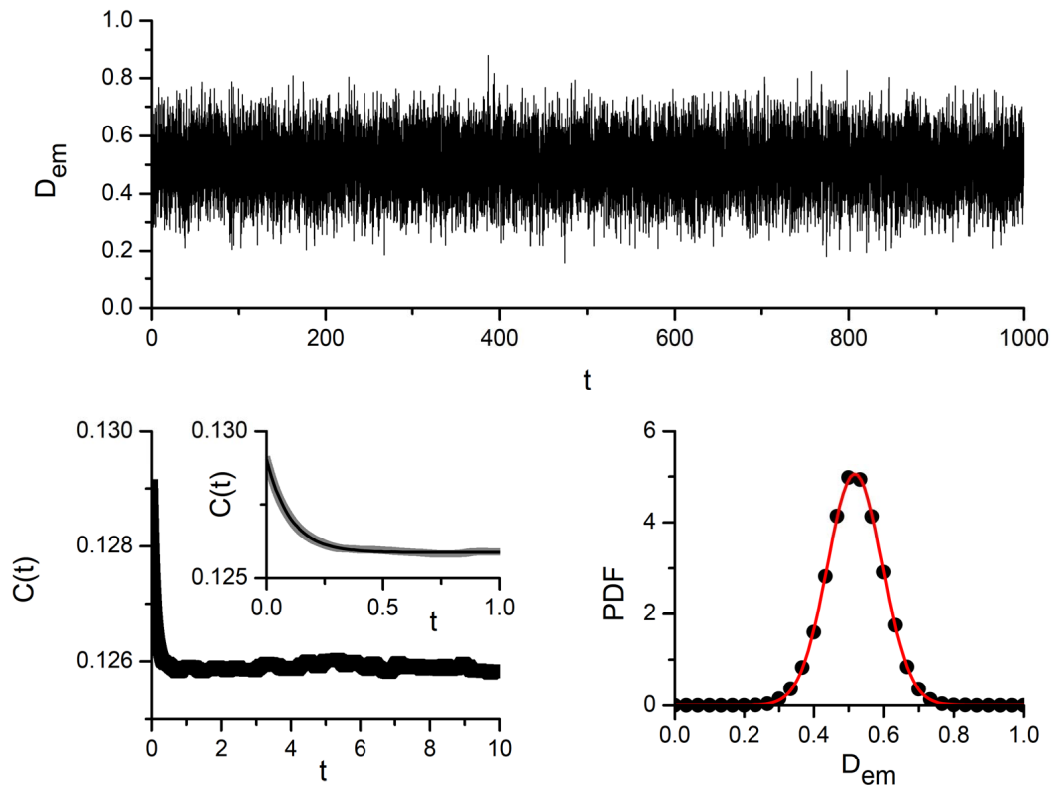


Рисунок 1.14 — Часовий ряд  $D_{em}(t)$  (верхня панель), кореляційна функція  $C(t)$  (нижня панель зліва; на вставці наведено кореляційну функцію та відповідну апроксимацію експоненційною функцією) та розподіл за значеннями  $f(D_{em})$  при  $\tau = 0.1$  та  $\sigma^2 = 0.5$ .

ках сірого кольору наведено стаціонарне значення від чорного (мінімальне) до білого (максимальне), як наведено справа на шкалі значень. З отриманих результатів випливає, що уведені флуктуації напруженості електричного поля суттєво впливають на упорядкованість зростаючої поверхні. При чому, слід відмітити відсутність певної однозначної в залежності параметра порядку  $W^2$  як від інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  при сталому значенні часу релаксації  $\tau$ , так і від часу релаксації  $\tau$  при сталому значенні інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$ . Ці дві характеристики сумісно визначають ступінь упорядкованості адсорбату на підкладці. Варто відмітити, що навіть у випадку нескорельованих у часі флуктуацій напруженості підведеного до підкладки електричного поля, що представляється звичайним білим шумом (при  $\tau = 0$ ), упорядкованість зростаючої поверхні немонотонним чином залежить від інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$ , як це можна бачити на рис.1.15.

Розподіли стаціонарних значень товщини зростаючої плівки  $d$  та висоти структур  $h$  від інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  коефіцієнту індукованої поверхне-

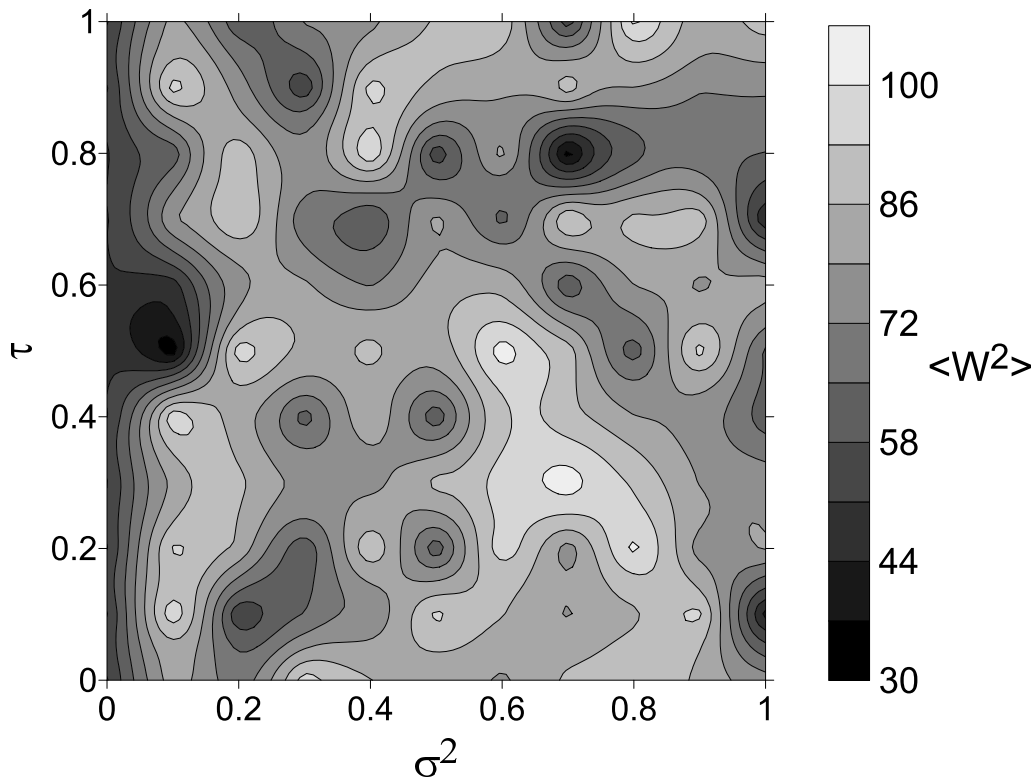


Рисунок 1.15 — Залежність стаціонарного значення параметра порядку  $W^2$  від інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  коефіцієнту індукованої поверхневої дифузії  $D_{em}$  та часу релаксації  $\tau$ .

вої дифузії  $D_{em}$  та часу релаксації  $\tau$  наведено на рис.1.16 та 1.17, відповідно. Тут також використано градацію сірого кольору (від чорного до білого) для подання значень відповідних величин (від найменшого до найбільшого). Перш за все слід відмітити, що топологія отриманих залежностей  $d(\sigma^2, \tau)$  та  $h(\sigma^2, \tau)$  є подібною до залежності  $W^2(\sigma^2, \tau)$ : чим більше впорядкованість зростаючої поверхні, тим товщою є плівка та тим вищими є поверхневі структури. Так, фіксуючи  $\tau = 0.5$  при  $\sigma^2 = 0.1$  маємо темну область зі значенням параметра порядку  $W^2 \simeq 30$ , товщиною плівки  $d \simeq 2770$  та висотою поверхневих пірамідальних структур  $h \simeq 28$  в одиницях моноатомних шарів. При цьому, при значеннях  $\tau = 0.5$  та  $\sigma^2 = 0.6$  у світлій області на рис.1.15, ?? та 1.17 зростаюча поверхня є більш структурованою (упорядкованою) зі значенням  $W^2 \simeq 100$ ; товщина плівки приймає значення  $d \simeq 3000$ , а висота структур досягає  $h \simeq 55$  моношарів.

Для детального дослідження динаміки процесів формування та росту поверхневих багат шарових структур адсорбату при епітаксіальному рості з ура-

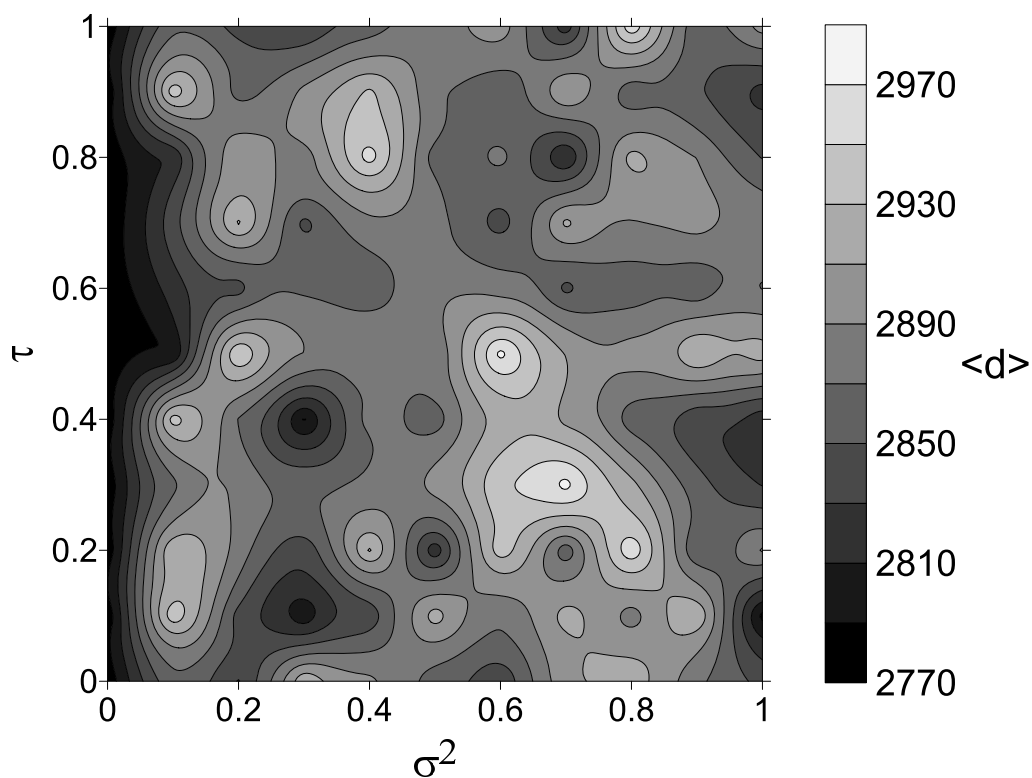


Рисунок 1.16 — Залежність стаціонарного значення товщини плівки  $d$  від інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  коефіцієнту індукованої поверхневої дифузії  $D_{em}$  та часу релаксації  $\tau$ .

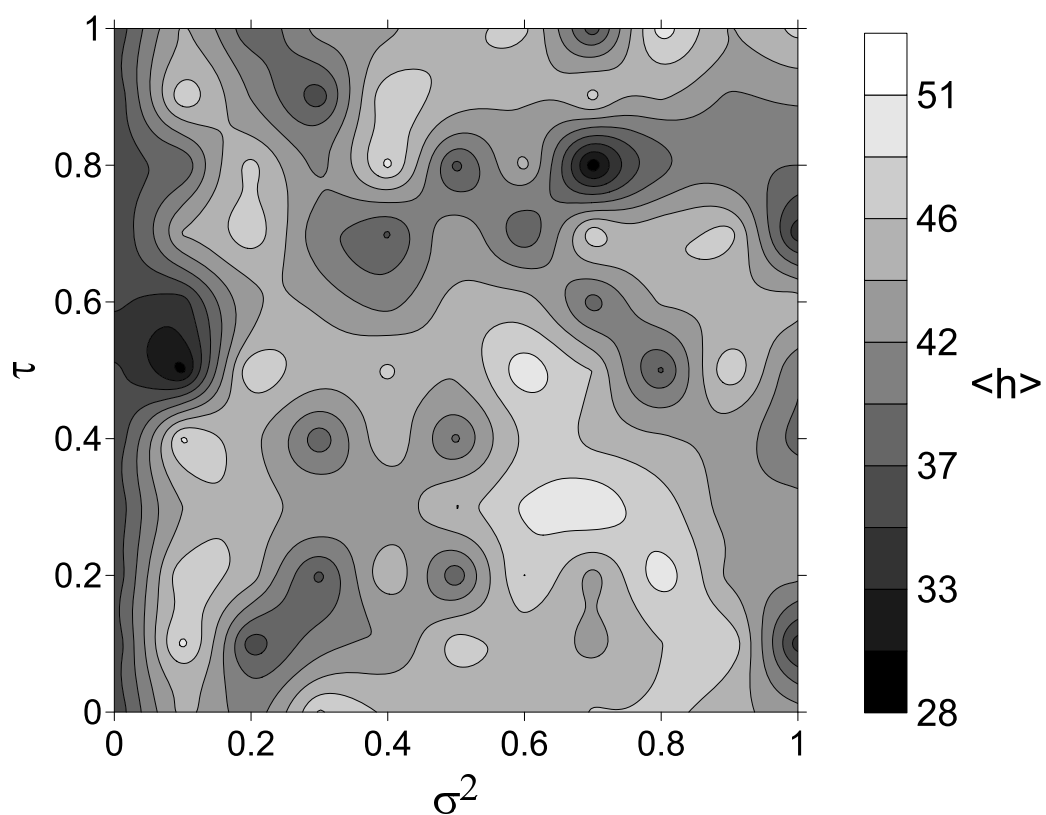


Рисунок 1.17 — Залежність стаціонарного значення висоти структур  $h$  від інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  коефіцієнту індукованої поверхневої дифузії  $D_{em}$  та часу релаксації  $\tau$ .

хуванням ефектів електроміграції враховуючи стохастичну природу приведеного до підкладки розглянемо еволюцію основних статистичних величин, а саме параметра порядку  $W^2$ , товщини плівки  $d$  та висоти поверхневих структур  $h$ , а також, асиметрії  $m_3$  та ексцесу при  $\tau = 0.5$  та  $\sigma^2 = 0.1$  і  $\sigma^2 = 0.6$ . Еволюцію фазового поля  $\phi$ , що ілюструє зміну морфології зростаючої поверхні з часом, подано на рис.1.18. Порівнюючи отримані результати для випадків  $\tau = 0.5$  та  $\sigma^2 = 0.1$  (темна область на залежностях стаціонарних значень параметра порядку, товщини плівки та висоти структур) і  $\tau = 0.5$  та  $\sigma^2 = 0.6$  (світла область на залежностях стаціонарних значень параметра порядку, товщини плівки та висоти структур) бачимо, що вже на початкових стадіях епітаксiального росту при  $\sigma^2 = 0.1$  формується велика кількість відокремлених островів адсорбату. При подальшому осадженні сумісний вплив інтенсивності флуктуацій та часу їх кореляції приводить до об'єднання малих острівців адсорбату у великі у випадку  $\sigma^2 = 0.6$ , тоді як при  $\sigma^2 = 0.1$  флуктуаційні ефекти перешкоджають цим процесам, і в результаті формується велика кількість відокремлених структур з широкими терасами. При  $\sigma^2 = 0.6$  при тривалому осадженні всі структури об'єднуються в одну піраміду і ширина тераси цих структур є меншою за ширину тераси поверхневих структур при  $\sigma^2 = 0.1$ , що добре видно із останніх знімків на рис.1.18. Таким чином, можна стверджувати, що властивості флуктуацій напруженості підведеного до підкладки електричного поля визначають ширину терас поверхневих структур, які реалізуються при епітаксiальному рості.

Далі проаналізуємо еволюцію параметра порядку  $W^2$  при значеннях інтенсивності флуктуацій та часу їх кореляції з темної та світлої областей рисунків 1.15, ?? та 1.17. Відповідні залежності подано на рис.1.19. Бачимо, що як і у випадку детерміністичної системи, описаної у попередньому розділі, початкові стадії еволюції параметра порядку характеризуються наявністю затухаючих осциляцій. При чому, ані амплітуда цих флуктуацій, ані частота не залежить від властивостей флуктуацій напруженості електричного поля. Відмінності проявляються після завершення осциляційної динаміки: параметр порядку зростає з часом та виходить на квазістаціонарне значення. При цьому,



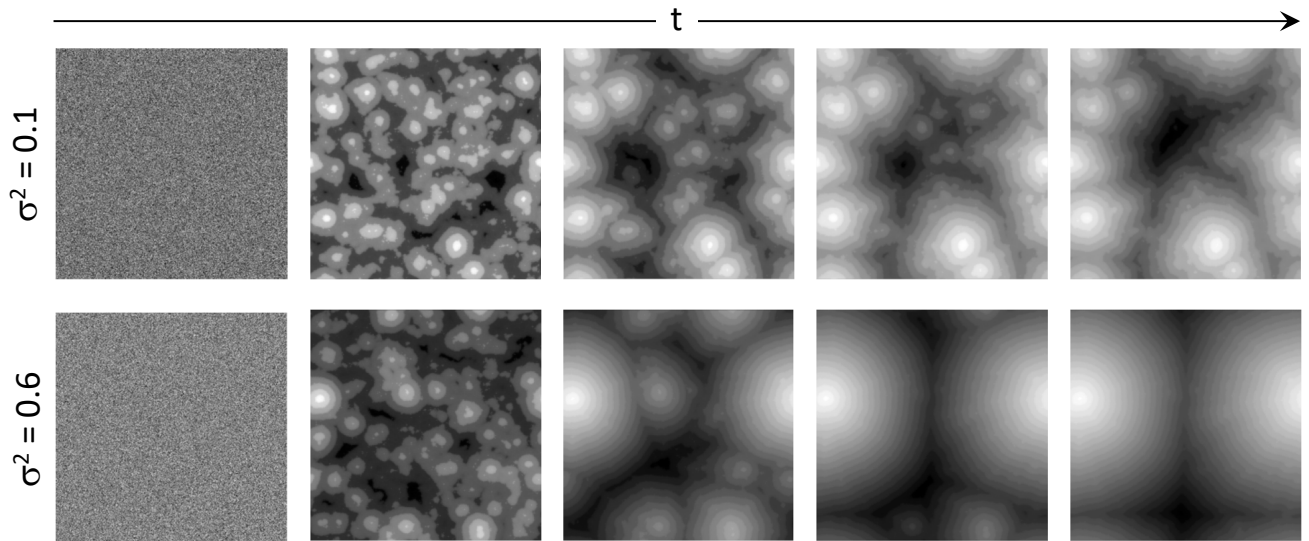


Рисунок 1.18 — Динаміка еволюції морфології поверхні при  $\tau = 0.5$  та різних значеннях інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$ .

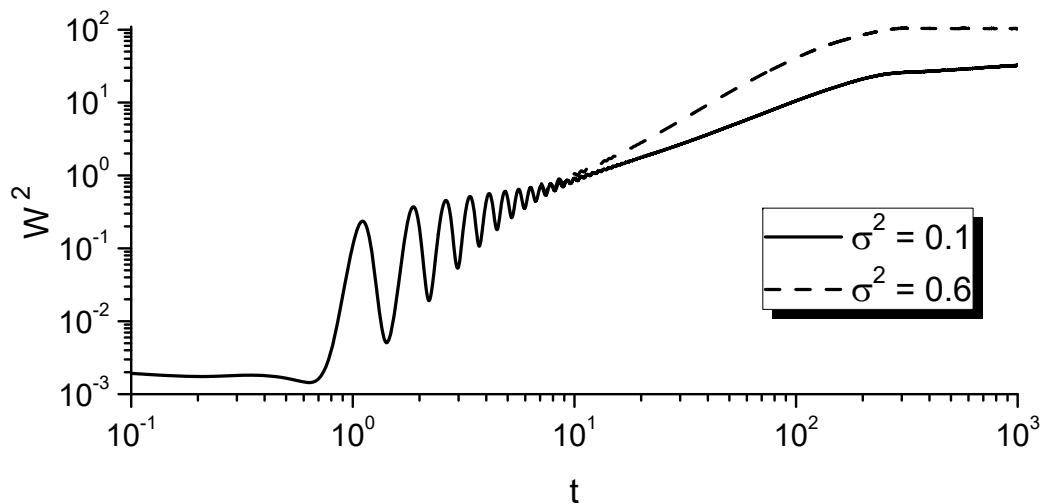


Рисунок 1.19 — Динаміка еволюції параметра порядку  $W^2$  при  $\tau = 0.5$  та різних значеннях інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$ .

швидкість росту параметра порядку та квазістаціонарне його значення при значеннях параметрів зі світлої області діаграм рис.1.15, ?? та 1.17 є більшими. Аналогічний ефект проявляється і на залежності висоти поверхневих структур від часу осадження, що представлено у якості основного графіка на рис.1.20. Проте, на відміну від параметра порядку, тут відмінності проявляються вже при осциляторній динаміці висоти структур. На вставці до рис.1.20 наведено еволюцію товщини плівки при різних значеннях інтенсивності флуктуацій, яка суттєво не впливає на еволюцію товщини плівки.

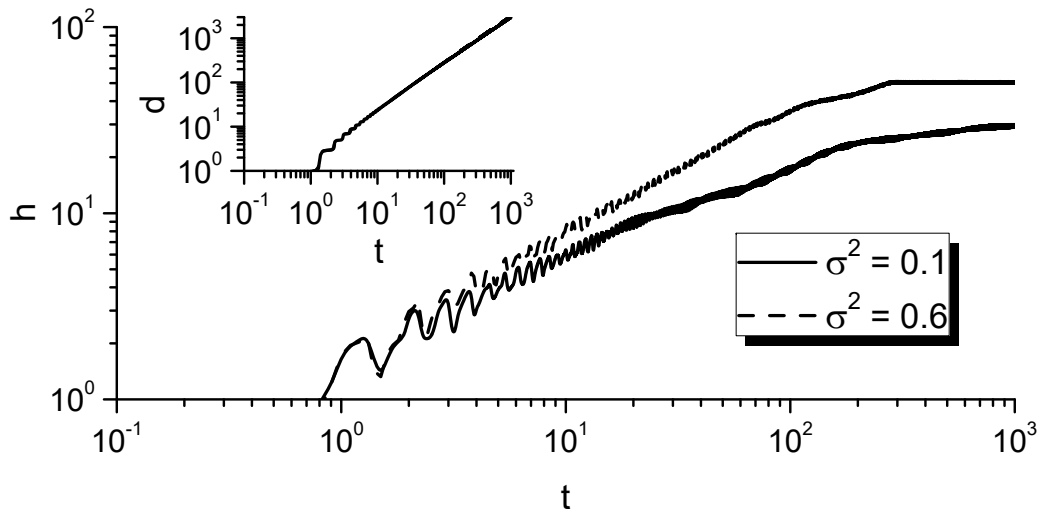


Рисунок 1.20 — Динаміка еволюції товщини плівки  $d$  та висоти поверхневих структур  $h$  при  $\tau = 0.5$  та різних значеннях інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$ .

Далі проаналізуємо детально статистичні властивості процесу росту структурованої поверхні при епітаксiальному рості, розглядаючи динаміку асиметрії  $m_3$  та ексцесу  $m_4$ . Відповідні залежності представлено на рис.1.21 та 1.22, відповідно. Бачимо, що відмінності у значеннях обох величин спостерігаються по завершенні коливальної динаміки. При цьому, квазістаціонарні значення асиметрії  $m_3$  різняться для досліджуваних двох наборів параметрів, тоді як ексцес  $m_4$  набуває квазістаціонарного значення, яке майже не відрізняється для двох досліджуваних випадків. Останнє свідчить про те, що у квазістаціонарному випадку (при довготривалій епітаксії) сформовані структури з ши-

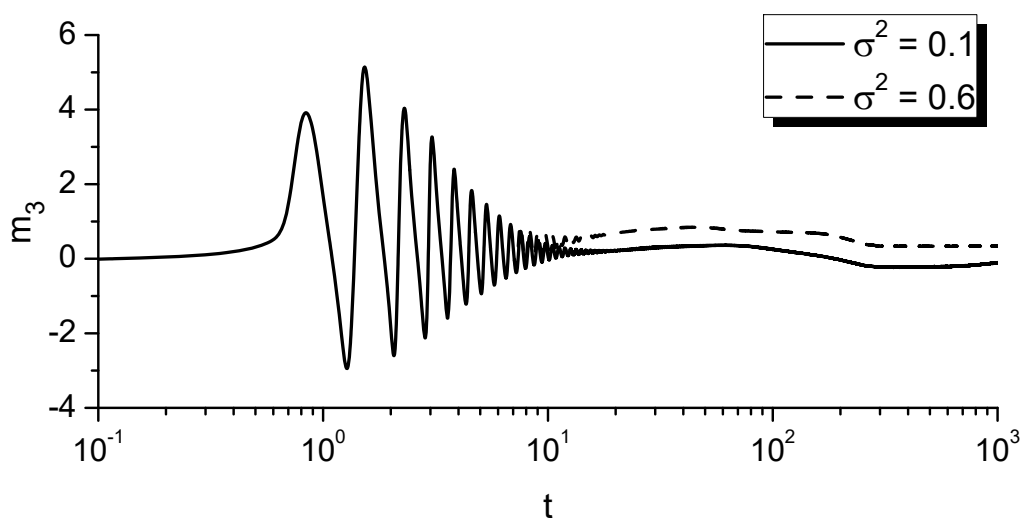


Рисунок 1.21 — Динаміка еволюції асиметрії  $m_3$  при  $\tau = 0.5$  та різних значеннях інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$ .

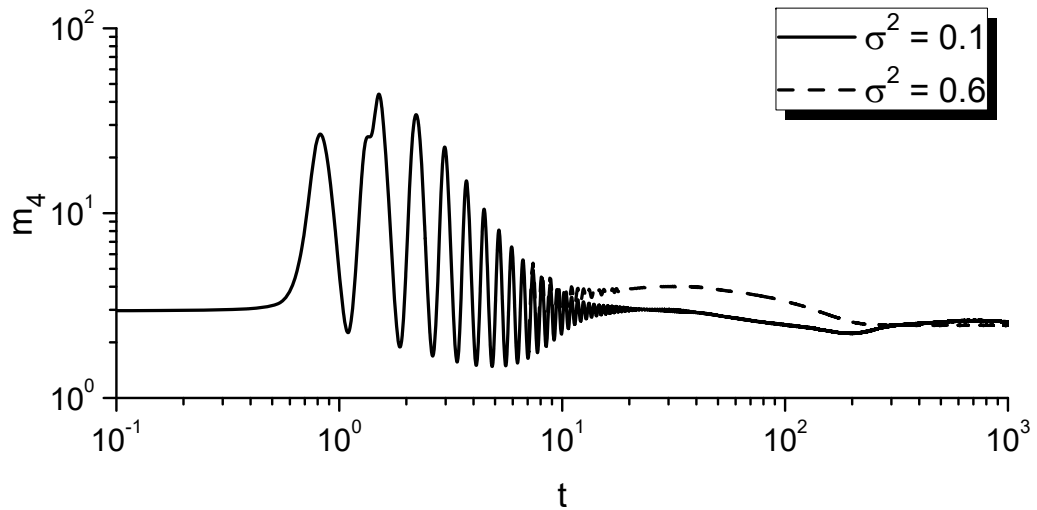


Рисунок 1.22 — Динаміка еволюції ексцесу  $m_4$  при  $\tau = 0.5$  та різних значеннях інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$ .

рокими терасами та малою кількістю шарів і структури з вузькими терасами та великою кількістю шарів можуть мати схожі статистичні властивості щодо розподілу структур за розмірами та положенням середнього рівня висоти структур відносно всіх структур.

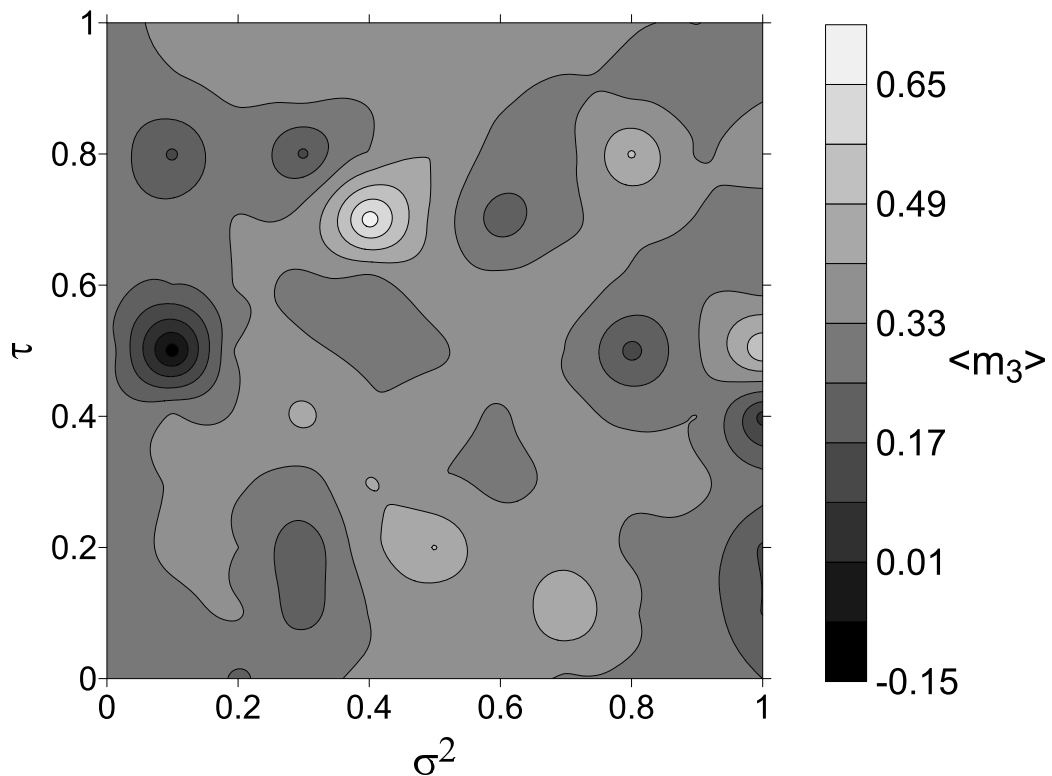


Рисунок 1.23 — Залежність стаціонарного значення асиметрії  $m_3$  від інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  коефіцієнту індукованої поверхневої дифузії  $D_{em}$  та часу релаксації  $\tau$ .

Для більш детального аналізу впливу інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  та часу їх кореляції  $\tau$  нами було розраховано залежності  $m_3(\sigma^2, \tau)$  та  $m_4(\sigma^2, \tau)$  у квазі-стаціонарному режимі. Отримані числові результати подано на рис.1.23 та 1.24, відповідно. Перш за все слід відзначити, що топологія цих залежностей відрізняється від аналогічних для параметра порядку, товщини плівки та висоти структур. Більш того, детальний аналіз рисунків 1.23 та 1.24 показує, що при певних значеннях інтенсивності флуктуацій та часу їх кореляції розподіл значень висоти поверхні буде характеризуватися майже гаусовим розподілом, коли  $m_3 \simeq 0$  та  $m_4 \simeq 3$ , що реалізується при  $\tau = 0.5$  та  $\sigma^2 = 0.1$ . У випадку значень  $\tau = 0.7$  та  $\sigma^2 = 0.4$  розподіл висот за значеннями також буде квазі-гаусовим, проте асиметричним відносно середньої висоти, оскільки  $m_3 > 0$ . Також варто відмітити випадок  $\tau = 0.5$  та  $\sigma^2 = 0.8$ , коли асиметрія  $m_3$  приймає гаусове значення  $m_3 = 0$ , тоді як ексцес є меншим за гаусове значення  $m_4 = 3$ . Ілюстрації поверхневих структур для описаних трьох випадків у квазістаціонарному режимі наведено на рис.1.25. Розподіли висоти поверхні за значеннями для структур поданих на рис.1.25 при різних значеннях інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  та часу їх кореляції  $\tau$  наведено на рис.1.26.

Розглянемо спочатку детально випадок при  $\tau = 0.5$  та  $\sigma^2 = 0.1$  (див. першу ілюстрацію на рис.1.25 та відповідний розподіл висоти за значеннями, відрахованими від середнього  $\langle \phi \rangle$  на 1.26а). Як зазначалося вище, при таких значеннях характеристик флуктуацій напруженості електричного поля зростаюча поверхня стає слабо структурованою і характеризується невеликим значенням як товщини плівки, так і висоти поверхневих структур, які характеризуються широкими терасами. Для цього випадку для значень асиметрії та ексцесу, які характеризують розподіл висот за значеннями маємо  $m_3 = -0.12$  та  $m_4 = 2.59$ . Такі значення задовольняють гаусовий розподіл центрований в околі середнього значення  $\langle \phi \rangle$ . Отримані числові дані щодо відповідного розподілу подано на рис.1.26а за допомогою гістограми. Тут основні піки відповідають терасам пірамідальних структур, тоді як невисокі піки пов'язані з тими значеннями висоти, коли в пірамідальних структурах реалізується сходинка. Бачимо, що як основні піки (кружечки), так і другорядні піки (квадрати), добре апроксиму-

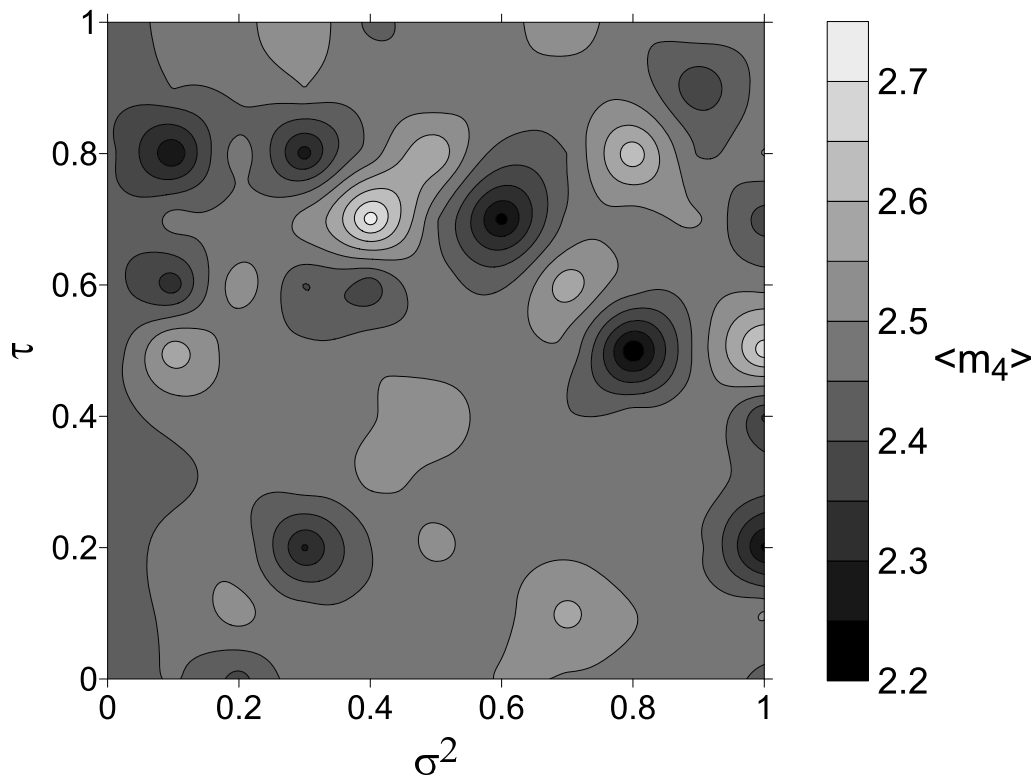


Рисунок 1.24 — Залежність стаціонарного значення ексцесу  $m_4$  від інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  коефіцієнту індукованої поверхневої дифузії  $D_{em}$  та часу релаксації  $\tau$ .

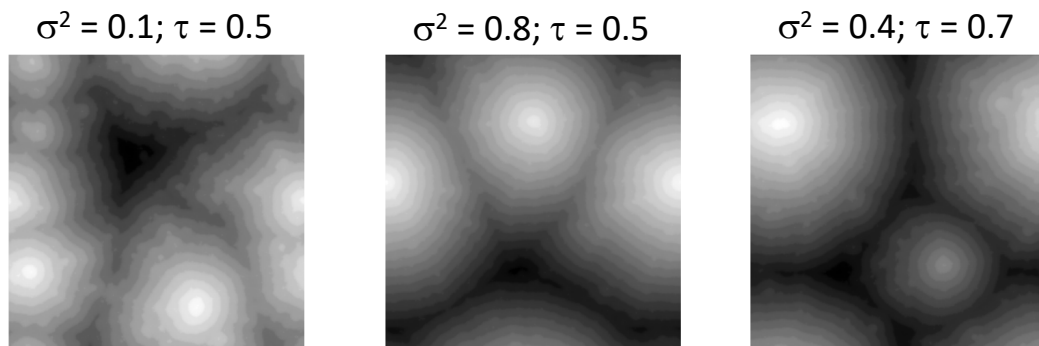


Рисунок 1.25 — Морфологія поверхні при різних значеннях інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  та часу їх кореляції  $\tau$ .

ються стандартним гаусіаном, центрованим в околі значення середньої висоти структур  $\langle \phi \rangle$ .

Далі розглянемо детально випадок при  $\tau = 0.7$  та  $\sigma^2 = 0.4$  (див. другу ілюстрацію на рис.1.25 та відповідний розподіл висоти за значеннями, відрахованими від середнього  $\langle \phi \rangle$  на 1.26б). Відповідно до отриманих значень асиметрії  $m_3 = 0.71$  та ексцесу  $m_4 = 2.73$  можна стверджувати, що розподіл висот за значеннями має задовольняти гаусовий розподіл, який є асиметричним з

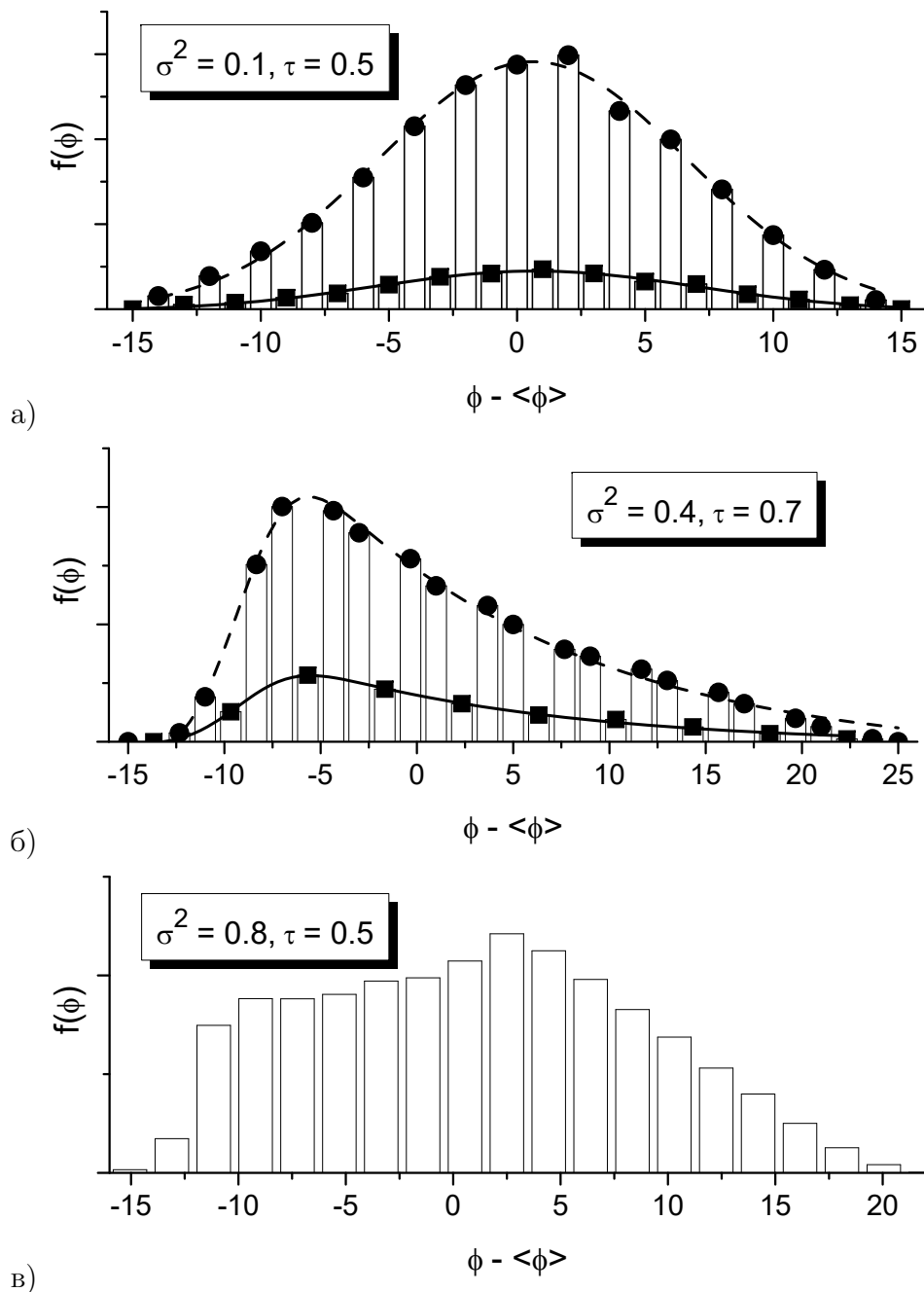


Рисунок 1.26 — Розподіли висоти поверхні за значеннями для структур поданих на рис.1.25 при різних значеннях інтенсивності флуктуацій  $\sigma^2$  та часу їх кореляції  $\tau$ .

більшістю значень висоти більших за середнє значення. Отримані числові дані щодо відповідного розподілу подано на рис.1.26б за допомогою гістограми. Тут, як і у попередньому випадку, основні піки відповідають терасам пірамідальних структур, тоді як невисокі піки пов'язані зі сходінками. Числові дані як для основних піків (кружечки), так і для другорядних піків (квадрати) добре апроксимуються модифікованим розподілом гауса, який має вигляд:

$$f(y) = y_0 + \frac{A}{2t_0} \exp\left(\frac{1}{2} \left(\frac{w}{t_0}\right)^2 - \frac{x - x_c}{t_0}\right) \left(\operatorname{erf}\left(\frac{z}{\sqrt{2}}\right) + 1\right),$$

де  $z = \frac{x - x_c}{w} - \frac{w}{t_0}$ . Наприкінці розділу розглянемо випадок при  $\tau = 0.5$  та  $\sigma^2 = 0.8$  (див. третю ілюстрацію на рис.1.25 та відповідний розподіл висоти за значеннями, відрахованими від середнього  $\langle\phi\rangle$  на 1.26в), для якого асиметрія та ексцес приймають значення  $m_3 = 0.14$  та  $m_4 = 2.19$ . Таким чином можна стверджувати що відповідний розподіл висот за значеннями буде несиметричним з більшістю значень висот, які перевищують середнє значення  $\langle\phi\rangle$  та буде відрізнятися від гаусового профілю, що й представлено на рис.1.26 у вигляді гістограми.

## ВИСНОВКИ

У даній роботі було досліджено вплив ефектів електроміграції на динаміку росту тонких плівок при епітаксіальному рості в рамках теорії фазового поля з використанням процедури числового моделювання. Ефекти електроміграції враховано шляхом уведення направленого потоку адатомів з коефіцієнтом дифузії, пропорційним до напруженості підведеного до підкладки електричного поля. Окремо досліджено випадок корельованих у часі флуктуацій напруженості електричного поля. Встановлено вплив інтенсивності флуктуацій та часу їх кореляцій на динаміку структурування поверхні та статистичні властивості поверхневих структур.

Побудовано математичну модель еволюції висоти зростаючої поверхні при епітаксіальному рості кристалів з урахуванням ефектів електроміграції, викликані підведеним до підкладки зовнішнім електричним полем. Ефекти електроміграції враховано шляхом уведення направленого потоку адатомів з коефіцієнтом дифузії, пропорційним до напруженості підведеного до підкладки електричного поля.

Досліджено вплив ефектів електроміграції на динаміку росту тонких плівок при епітаксіальному рості в рамках теорії фазового поля з використанням процедури числового моделювання. Встановлено, що підвищення коефіцієнту індукованої дифузії приводить до уповільнення динаміки росту як товщини плівки, так і висоти поверхневих багатосарових структур адсорбату та симетризації розподілу поля висоти за значеннями.

Показано, що ефекти електроміграції приводять до формування анізотропних поверхневих структур. Динаміка росту висоти структур дається степеневим законом. При великих значеннях коефіцієнту індукованої дифузії у процесі епітаксіального росту формується перколююча багатосарова структура адсорбату з широкими терасами, що характеризуються негладкими границями. При перевищенні коефіцієнтом індукованої дифузії певного критичного значення динаміка росту поверхні та її статистичні властивості суттєво не залежать від збільшення напруженості електричного поля.



Проаналізовано вплив флуктуацій напруженості підведеного до підкладки електричного поля на динаміку росту анізотропних поверхневих структур. Показано, що статистичними властивостями зростаючої поверхні, упорядкованістю зростаючої плівки, її товщиною та висотою поверхневих структур можна керувати за рахунок інтенсивності цих флуктуацій та часу їх кореляції.

Побудовані моделі дозволяють проводити якісний аналіз динаміки формування поверхневих структур при епітаксіальному рості тонких плівок з урахуванням ефектів електроміграції, а отримані у роботі результати надають можливість прогнозувати морфологію поверхні та виробити рекомендації щодо її керуванням за рахунок додаткових чинників.

Практична значимість отриманих результатів полягає у можливості їх використання у фундаментальних дослідженнях, спрямованих на вивчення закономірностей процесів самоорганізації складних конденсованих систем. Отримані результати можуть бути використані у прикладних дослідженнях щодо вирощування наноструктурованих тонких плівок у процесах епітаксіального росту для оцінювання часу осадження, необхідного для формування поверхневих структур, керування морфологією поверхні за рахунок додаткових чинників. Отримані у роботі результати можуть бути корисними для прогнозування динаміки росту плівок при епітаксіальному рості в умовах наявності електричного поля біля підкладки та для корегування технологічних умов вирощування поверхневих структур заданої морфології.

Роботу виконано в строк та в повному обсязі.

## ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. J. R. Black. *IEEE Transactions on Electron Devices* **16**, 338 (1969).
2. P. S. Ho, T. Kwok. *Rep. Prog. Phys.* **52**, 301 (1989).
3. Y. Homma, R. J. McClelland, H. Hibino. *Jap. J. Appl. Phys.* **29**, L2254 (1990).
4. E. D. Williams, E. Fu, Y. N. Yang, et. al. *Surf. Sci.* **336**, L746 (1995).
5. B. J. Gibbons, J. Noffsinger, J. P. Pelz. *Surf. Sci.* **575**, L51 (2005).
6. S. Lin, Y. Liu, S. Chiu, et al. *Sci. Rep.* **7**, 3082 (2017).
7. F. Leroy, D. Karashanova, M. Dufay, et. al. *Surf. Sci.* **603**, 507 (2009).
8. V. Usov, C.O. Coileain, I. V. Shvets. *Phys. Rev. B* **82**, 153301 (2010).
9. O. Toktarbaiuly, V. Usov, C.O. Coileain, et. al. *Phys. Rev. B* **97** 035436 (2018).
10. A. A. Shklyaeв, A. V. Latyshev. *App. Surf. Sci.* **465**, 10 (2019).
11. B. Voigtlander. *Surf. Sci. Rep.* **43**, 127 (2001).
12. A. A. Shklyaeв, M. Ichikawa. *Phys. Usp.* **51**, 133 (2008).
13. A. A. Shklyaeв, K. N. Romanyuk, S. S. Kosolobov. *Surf. Sci.* **625**, 50 (2014).
14. S. A. Teys. *Appl. Surf. Sci.* **392**, 1017 (2017).
15. J. M. MacLeod, J. A. Lipton-Duffin, U. Lanke, et. al. *Appl. Phys. Lett.* **94**, 103109 (2009).
16. A. Shklyaeв, L. Bolotov, V. Poborchii, et. al. *J. Appl. Phys.* **117**, 205303 (2015).
17. A. Voigt. *Multiscale modeling in epitaxial growth* (Birkhauser, 2000).
18. C. Ratsch, P. Puggerone, M. Scheffler. *Surface Diffusion: Atomistic and Collective Processes* (Plenum, 1997).
19. H. Metiu, Y.-T. Lu, Z. Y. Zhang. *Science* **255**, 1088 (1992).

20. C. Ratsch, M. F. Gyure, R. E. Caflisch, et. al. *Phys. Rev. B* **65**, 195403 (2002).
21. S. Park, H. Jeong, B. Kahng. *Phys. Rev. E* **59**, 6184 (1999).
22. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, I. O. Lysenko, et. al. *Phys. Rev. E* **82**, 061108 (2010).
23. F. Liu, H. Metiu. *Phys. Rev. E* **49**, 2601 (1994).
24. A. Karma, M. Plapp. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4444 (1998).
25. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, I. O. Lysenko. *Phys. Scr.* **83**, 045802 (2011).
26. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, T. Zhylenko, et. al. *Eur. Phys. J. B* **86**, 175 (2013).
27. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, A. V. Dvornichenko. *Eur. Phys. J. B* **88**, 3 (2015).
28. D. Kandel, E. Kaxiras. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1114 (1996).
29. S. Stoyanov, V. Tonchev. *Phys. Rev. B* **58**, 1590 (1998).
30. V. Popkov, J. Krug. *Phys. Rev. B* **73**, 235430 (2006).
31. B. Rangelov, S. Stoyanov. *Surf. Sci.* **603**, 2907 (2009).
32. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko. *Phys. Rev. E* **86**, 041143 (2012).
33. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, S. V. Kokhan, et. al. *Phys. Scr.* **86**, 055401 (2012).
34. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, A. V. Dvornichenko. *Surf. Sci.* **630**, 158 (2014).
35. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko. *Eur. Phys. J. B* **85**, 383 (2012).
36. V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko. *Phys. Rev. E* **89**, 042133 (2014).
37. F. Cucker, P. G. Ciarlet. *Handbook of Numerical Analysis vol 11 Special Volume: Foundations of Computational Mathematics* (Amsterdam, Elsevier, 2003)

38. G. Strang. *Introduction to Applied Mathematics* (Wellesley-Cambridge Press, 1986).
39. E. S. Gadelmawla, M. M. Koura, T. M. A. Maksoud, et. al., *J. Mater. Process. Tech.* **123**, 133 (2002).
40. G. Muraleedharan, C. G. Soares, C. Lucas. *Characteristic and Moment Generating Functions of Generalised Extreme Value Distribution (GEV)* (In: *Sea Level Rise, Coastal Engineering, Shorelines and Tides*, Chapter-14, pp. 269–276) (Nova Science Publishers, 2011).