

УДК 548.25

© 1992

## МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ВИЦИНАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ПРИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭПИТАКСИИ

И. Л. Алейнер, Р. А. Суриц

Построена теория морфологической стабильности вицинальной поверхности при молекулярной эпитаксии в режиме роста с неизменным количеством ступеней и изломом (Kink flow). Изучено взаимодействие изломов за счет перераспределения диффузионных потоков. При этом оказались существенными одномерная диффузия атомов вдоль ступени и асимметрия встраивания атомов в изломы. Показано, что взаимодействие изломов является доминирующим фактором стабилизации формы ступени.

Одной из важнейших задач современной полупроводниковой технологии является создание слоев с совершенной гетерограницей. Если источником нового слоя является двумерный зародыш или винтовая дислокация [1], то зарождение каждого нового слоя неконтролируемо, и на пути решения этой задачи возникает принципиальное препятствие. Один из способов получения идеальных гетерограниц состоит в использовании процесса роста вицинальной поверхности [2], теоретическому изучению которого и посвящена наша работа.

В простейшем случае кубического кристалла идеальная вицинальная поверхность  $(v_x, v_y, v_z)$  (примем для определенности, что  $v_y \ll v_x \ll v_z$ ) представляет собой атомно-гладкие участки поверхности (001) — террасы, разделенные ступенями, направленными параллельно  $[v_x, v_y, 0]$ , расположенными на расстоянии  $L = av_z / (v_x^2 + v_y^2)^{1/2}$  ( $a$  — постоянная решетки кристалла) друг от друга (рис. 1). Ступени же состоят из отрезков атомно-гладкой ступени  $[100]$  длиной  $l = av_x / v_y$ , разделенных изломами.<sup>1</sup>

Мы будем рассматривать простейшую ситуацию, когда рост кристалла происходит путем захвата атома из газовой фазы на террасу, диффузионного блуждания по ней (коэффициент диффузии  $D$ ) с последующим встраиванием в излом на ступени. На вицинальной поверхности мы имеем «приготовленные» изломы, и рост кристалла происходит за счет движения решетки изломов без образования новых (в отличие от известных работ [4, 5] мы рассматриваем рост, при котором сохраняется не только число ступеней (step flow), но и число изломов (kink flow)). Вследствие случайного характера встраивания атомов в изломы происходит случайное отклонение последних от идеального периодического расположения.

<sup>1</sup> При конечной температуре на поверхности могут возникать термодинамически равновесные ступени, а на них равновесные изломы. Однако, как показано в [3], при  $l/a \ll \exp(\varphi_{\text{kink}}/T)$  ( $\varphi_{\text{kink}}$  — энергия образования излома,  $T$  — температура в энергетических единицах) такими изломами можно пренебречь. Равновесные ступени же возникают на поверхности при температурах, близких к температуре плавления кристалла. В дальнейшем мы будем пренебрегать равновесными изломами и, конечно же, ступенями.

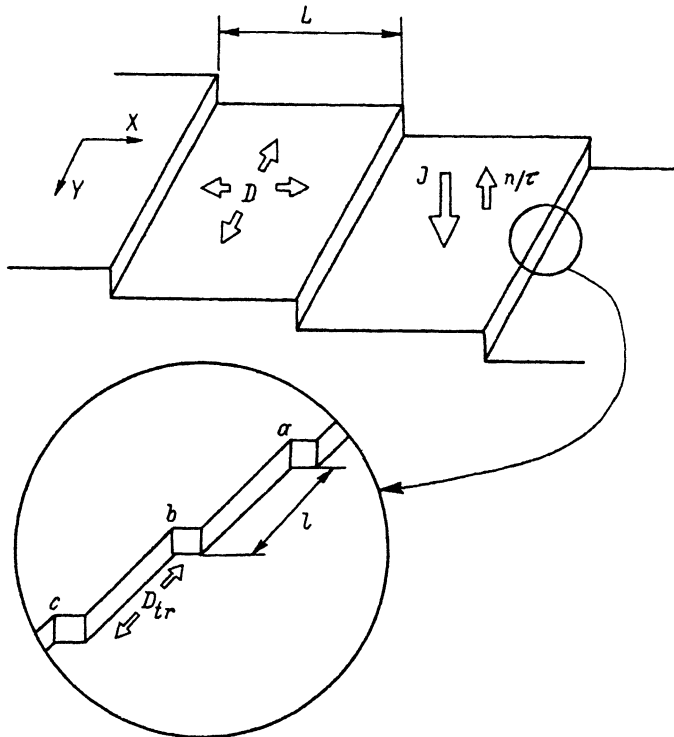
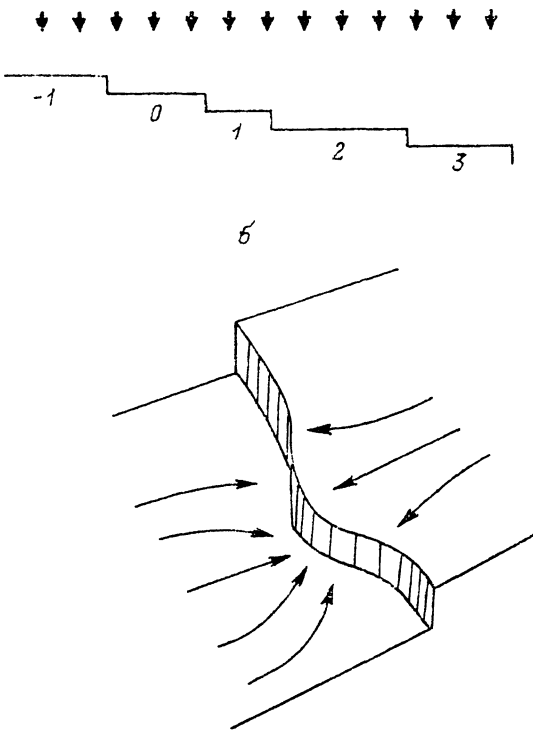


Рис. 1. Схематическое изображение растущей вицинальной поверхности.

Возникает вопрос: является ли система устойчивой по отношению к таким флуктуациям?

В работе [4] исследовалась устойчивость системы прямых параллельных равноотстоящих друг от друга ступеней по отношению к флуктуациям расстояний между ними (безызгибные флуктуации). Эта система устойчива, если скорость встраивания атома, подошедшего к ступени с нижней террасы, больше скорости встраивания атома со стороны верхней террасы. Действительно, предположим, что длина одной из террас уменьшилась (рис. 2, а, 1) за счет увеличения соседней террасы (рис. 2, а, 2), соответственно увеличится общий поток атомов на нее. Тогда общий поток атомов на террасу 1 уменьшится, а на террасу 2 возрастет. Вследствие указанной выше асимметрии захвата изменившийся поток перераспределится таким образом, что ступень, ограничивающая террасу 2, слева начнет «догонять» правую ступень и исходная флуктуация затухнет. Обратное соотношение скоростей встраивания ведет к нарастанию флуктуаций, и процесс роста за счет движения ступеней становится неустойчивым.

Устойчивость системы по отношению к флуктуациям, представляющим собой одинаковый изгиб всех ступеней (изгибные флуктуации), исследовалась в [5]. Результаты исследования крайне неутешительны — данная асимметрия встраивания атомов в ступень (ступень рассматривалась как непрерывный сток) приводит к неустойчивости. Действительно, рассмотрим флуктуацию формы одиночной ступени, такую как на рис. 2, б. При этом происходит сгущение линий тока на нижней террасе в районе флуктуации, и из-за локального увеличения количества приходящих атомов происходит дальнейшее разрастание флуктуации формы ступени. При симметрии скоростей встраивания такое сгу-



щение линий тока на нижней террасе компенсируется разрежением на верхней террасе. При асимметрии же такой компенсации не происходит, и система неустойчива.

В той же работе был рассмотрен механизм, противодействующий такой неустойчивости — увеличение энергии ступени при ее изгибе. В случае же вицинальной поверхности с фиксированным числом изломов это не так — изгиб ступени происходит не за счет рождения новых изломов, требующего дополнительной энергии, а только из-за перераспределения имеющихся изломов по ступени, что не связано с изменением энергии, если взаимодействием изломов пренебречь.

Мы покажем, что и в этом случае поверхность стабильна в процессе роста. При этом механизм, обеспечивающий стабильность, не энергетический, а чисто кинетический. Стабильность

обусловлена асимметрией встраивания атомов в изломы. Мы полагаем, что атом встраивается в излом не прямо с террасы, а путем захвата его в потенциальную канаву около ступени, одномерной диффузии в ней (коэффициент диффузии  $D_{\parallel}$ ) к излому. При этом естественно предполагать асимметрию захвата атома изломом. Так, при диффузии атома в канаве, ограниченной изломами *a* и *b* (врезка к рис. 1), он может встраиваться только в излом типа *a*. Присоединение же к какому-либо другому излому происходит только путем перехода на террасу и диффузии по ней к ступени (например, для встраивания в излом *b* из канавы *a*—*b* необходимы переход на террасу и диффузия по ней к канаве *b*—*c* (врезка к рис. 1)). Мы покажем, что именно эта асимметрия приводит к устойчивости по отношению к изменению расстояния между изломами, обеспечивая стабильность формы поверхности в процессе роста.

Ниже (в разделе 1) мы сформулируем общие соотношения, описывающие эволюцию положения изломов, и перейдем от микроскопического описания формы ступени (путем задания положения изломов) к макроскопическому (путем задания огибающей). Далее в разделе 2 сформулируем основные модельные предположения о механизме роста. В разделе 3 найдем уравнение эволюции формы ступеней. В разделе 4 будут проанализированы условия устойчивости.

## 1. Общие соотношения

Как уже обсуждалось, идеальная вицинальная поверхность представляет собой правильную решетку изломов на периодически расположенных ступенях, а рост кристалла — движение этой решетки по его поверхности. Тогда положение излома можно представить как

$$r_{\text{kink}_n}^m = \left[ e_x \left( \frac{t}{\tau_s} + m \right) L + e_y \left( \frac{L}{a} \frac{t}{\tau_s} + n \right) l \right] + \zeta_n^m(t) (e_x (a/l) + e_y), \quad (1)$$

где  $e_x, e_y$  — орты соответствующих осей, оси  $X$  и  $Y$  ориентированы перпендикулярно и параллельно направлению невозмущенной ступени соответственно (рис. 1). Здесь  $\tau_s$  — время роста одного монослоя,  $\zeta_n^m$  — флуктуационные отклонения положения излома. Целое число  $n$  нумерует излом на ступени, а  $m$  — ступень. Слагаемое в фигурных скобках описывает продвижение решетки изломов как целого при росте кристалла.<sup>2</sup> Излом при отклонении от узла решетки за счет перераспределения диффузионных потоков влияет на остальные изломы. В линейном приближении эта связь имеет вид

$$\tau_s \frac{\partial}{\partial t} \zeta_n^m(t) = \sum_{m' n' = -\infty}^t \mathcal{L}_{n-n'}^{m-m'}(t-t') \zeta_{n'}^{m'}(t'), \quad (2)$$

где оператор  $\mathcal{L}$  описывает взаимовлияние изломов. Наша цель — найти явный вид этого оператора. Некоторые свойства  $\mathcal{L}$  ясны из общих соображений. При постоянном во времени сдвиге всех изломов на одинаковую величину состояние системы не изменяется, следовательно

$$\sum_{mn} \int_0^{\infty} \mathcal{L}_n^m(t) dt = 0. \quad (3)$$

Временная дисперсия  $\mathcal{L}$  существенна лишь на временах  $t \simeq L^2/D$  — времени, за которое частица достигает ступени за счет диффузии. Время, за которое излом меняет свое положение на величину порядка расстояния между изломами [см. (1)]  $t \simeq \tau_s a/L$ . Очевидно, что характерные времена развития флуктуации имеют тот же порядок (это подтверждает и полученный нами результат). В случае

$$\tau_s \gg \frac{L^2}{D} \frac{L}{a} \quad (4)$$

связь (2) можно считать мгновенной и положить

$$\mathcal{L}_n^m(t) = \Lambda_n^m \delta(t), \quad (5)$$

где  $\delta(t)$  — дельта-функция. Для вычисления же  $\Lambda_n^m$  следует использовать квазистационарные уравнения диффузии. Для

$$\zeta(q_x, q_y, t) = \sum_{mn} \zeta_n^m(t) \exp(-i(q_x m + q_y n));$$

из (2), (5) получим

$$\tau_s \frac{\partial}{\partial t} \zeta(q_x, q_y, t) = \lambda(q_x, q_y) \zeta(q_x, q_y, t), \quad (6)$$

где

<sup>2</sup> Координаты изломов, а следовательно, и время  $t$  можно считать непрерывными, если постоянная «решетки изломов» много больше постоянной решетки кристалла.

$$\lambda(q_x, q_y) = \sum_{mn} \Lambda_n^m \exp(-i(q_x m + q_y n)). \quad (7)$$

Из (3) следует, что

$$\lambda(0, 0) = 0.$$

Система устойчива, если

$$\operatorname{Re} \lambda < 0, \quad q_x, q_y \neq 0. \quad (8)$$

Выше мы говорили о флуктуациях положения изломов. Удобнее, однако, пользоваться огибающей ступени, которую можно определить как

$$X_{st}^m(y, t) = \frac{l}{2l_a} \sum_n (\Gamma_{\text{kin}n}^m e_x) \exp\left(-\frac{|y - (\Gamma_{\text{kin}n}^m e_y)l|}{l_a}\right), \quad (9)$$

где  $l_a \gg l$  — некоторая длина усреднения. В конечный результат  $l_a$  не войдет. Из (1) получим

$$X_{st}^m(y, t) = \left(\frac{t}{\tau_s} + m\right) L + \gamma^m(y, t), \quad (10)$$

где  $\gamma^m(y, t)$  — флуктуации формы ступени, и

$$\gamma^m(y, t) = \frac{a}{2l_a} \sum_n \xi_n^m(t) \exp\left(-\frac{\left|y - \left(\frac{L}{a} \frac{t}{\tau_s} + n\right)l\right|}{l_a}\right). \quad (11)$$

Используя связь между флуктуациями положений изломов и формы ступени (11) и закон эволюции изломов (6), немедленно получим для

$$\gamma(q_x, k_y, t) = \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} dy \gamma^m(y, t) \exp(-i(q_x m + k_y y)) \quad (12)$$

уравнение, описывающее развитие флуктуаций формы ступени:

$$\tau_s \frac{\partial}{\partial t} \gamma(q_x, k_y, t) = \left(\lambda(q_x, k_y, l) - ik_y l \frac{L}{a}\right) \gamma(q_x, k_y, t) \quad (13)$$

с  $\lambda$ , определенной в (7). При этом ввиду (11) существенны лишь

$$k_y \leq \pi / l_a. \quad (14)$$

## 2. Модель роста

Рост вицинальной поверхности соответствует модели Бартона, Кабреры и Франка [3]. Мы лишь дополним ее, учтя указанную во введении асимметрию перехода атомов на ступень и захвата их в изломы. Ввиду условия (14) нас интересуют величины, мало меняющиеся на расстояниях порядка постоянной решетки кристалла. Квазистационарное приближение можно использовать, если выполняется (4). Тогда диффузия атомов по террасе описывается уравнением

$$-D\Delta N(r, t) = J - \frac{N(r, t)}{\tau}. \quad (15)$$

Здесь  $\Delta = \partial^2/(\partial x^2) + \partial^2/(\partial y^2)$ ,  $r = (x, y)$ ,  $N$  — поверхностная концентрация атомов на террасе,  $J$  — поток атомов на поверхность из газовой фазы,  $\tau$  — время «испарения» атома с террасы в газовую фазу,  $D$  — коэффициент поверхностной диффузии. Мы будем предполагать следующую иерархию длин:

$$a \ll l \ll L \ll L_D \equiv (D\tau)^{1/2}. \quad (16)$$

Соотношение  $a \ll l \ll L$  эквивалентно соотношению  $v_x v_x/v_z \ll v_y \ll v_x$  для миллеровских индексов вицинальной поверхности. Малость же  $L$  по сравнению с диффузионной длиной  $L_D$  означает, что весь избыточный поток атомов из газовой фазы на поверхность расходуется на рост кристалла и можно пренебречь «испарением» атомов с террас.

Вблизи ступени потенциальный рельеф для атомов имеет особенности. Вслед за [4, 6] мы полагаем, что переходу атомов на ступень с верхней террасы препятствует дополнительный потенциальный барьер, обусловленный спецификой оборванных химических связей. Атом у подножия ступени находится в потенциальной канаве, обусловленной взаимодействием с химическими связями ступени (рис. 3). Наглядное представление о виде модельного потенциала дает термин «окоп». Окоп тянется вдоль ступени, причем его «бруствер», расположен сверху ступени. Граничные условия на ступени (рис. 1, 3) имеют вид

$$\frac{1}{\xi_{tr}} N_{tr}(y, t) = aN(x_{st} + 0, y, t). \quad (17a)$$

$$\frac{1}{\xi_{tr}} N_{tr}(y, t) = aN(x_{st} - 0, y, t) + a^2 \xi_{tr} \frac{\partial}{\partial x} N(x_{st} - 0, y, t), \quad (17b)$$

где  $x_{st}$  — координаты ступени,  $N_{tr}$  — линейная концентрация атомов в окопе. Условие (17a) выражает активационный характер прыжка из окопа на террасу, и поэтому

$$\xi_{tr} = \exp(\varphi_{tr}/T), \quad (18a)$$

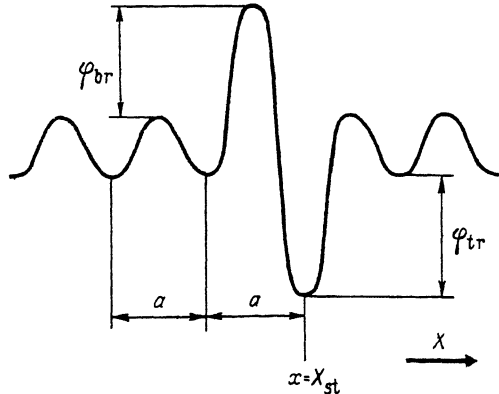


Рис. 3. Модельный потенциал для атома вблизи ступени.

где  $\varphi_{tr}$  — глубина окопа; условие же (17б) соответствует тому, что для прыжка из окопа на верхнюю террасу необходимо преодолеть еще и бруствер. Поэтому

$$\xi_{br} = \exp(\varphi_{br}/T) - 1, \quad (18б)$$

где  $\varphi_{br}$  — высота бруствера.

Оказавшись в окопе, атом диффундирует вдоль него, а закон непрерывности потока в окопе есть

$$-D_{tr} \frac{\partial^2}{\partial y^2} N_{tr}(y, t) = D \left( \frac{\partial N(x_{st} + 0, y, t)}{\partial x} - \frac{\partial N(x_{st} - 0, y, t)}{\partial x} \right), \quad (19)$$

где  $D_{tr}$  — коэффициент диффузии атома в окопе, а правая часть (19) описывает приход атомов с террас. Диффундируя в пределах одного окопа, атом может захватиться только одним изломом (см. начало статьи и врезку к рис. 1), что отражается граничными условиями

$$\frac{1}{\xi_{tr}} N_{tr}(y_{kink} + 0) = a N_{eq}, \quad (20а)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} N_{tr}(y_{kink} - 0) = 0, \quad (20б)$$

где  $y_{kink}$  — координата излома,  $N_{eq}$  — равновесная концентрация атомов на террасе. Граничные условия (20) соответствуют полностью асимметричному стоку, и это, конечно, — идеализация. Однако есть причины, уменьшающие асимметрию стока гораздо больше, чем учет в (20б) малой вероятности перескочить энергетический барьер, ограничивающий сток с одной стороны (см. раздел 3). Таким образом, мы упростили задачу, отказавшись от рассмотрения сложной структуры излома, и рассматриваем окоп, форма которого соответствует форме огибающей ступени, а изломы рассматриваем как полностью асимметричные стоки в нем.

Изменение координаты излома обусловлено потоком атомов на него и описывается законом сохранения вещества:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Gamma_{kink} = D_{tr} a \frac{\partial}{\partial y} N_{tr}(y_{kink} + 0) (e_x(a/l) + e_y). \quad (21)$$

### 3. Эволюция формы ступени

Неоднородные диффузионные потоки, связанные с дискретностью изломов, экспоненциально затухают по мере удаления от ступени и сосредоточены в узком слое  $\sim l/2\pi$  (назовем такой слой кором ступени). Поэтому на больших расстояниях ступень воспринимается как непрерывный сток. Если длина волны флуктуации много больше размеров кора (а именно такие флуктуации в соответствии с (14) нас и интересуют), то взаимовлияние изломов можно представить как сумму двух независимых частей. Первая связана с перераспределением изломов вдоль ступени и, как следствие, с изменением диффузионных потоков в окопе и коре ступени. Для расчета таких диффузионных потоков нужно учесть точечный характер стоков, но

при этом можно пренебречь изгибом ступени и влиянием остальных ступеней. Вторая часть обусловлена изменением диффузионных потоков на всей террасе, и, поскольку характерный масштаб их изменения (не меньший, чем масштаб флуктуации) много больше размеров кора, при вычислении диффузионных потоков на террасах нужно учитывать изгибы ступени, но можно пренебречь дискретностью изломов и рассматривать ступень как непрерывный сток.

1) Вклад в эволюцию перераспределения изломов. Рассмотрим прямую одиночную ступень  $x=0$ . Обозначим распределение концентрации, рассчитанное в модели непрерывного стока как  $\bar{N}(r)$ , и назовем макроскопическим распределением (кинетические коэффициенты стока будут получены ниже). Из (15), пренебрегая потоком из газовой фазы непосредственно в кор ступени, получим диффузионное уравнение для точной концентрации в коре ступени:

$$\Delta N = 0 \quad (22)$$

с граничными условиями (17) при  $x=0$ . На расстоянии  $x$ . ( $l/2\pi \ll x \ll L$ ) от ступени точная концентрация должна быть сшита с макроскопическим распределением

$$\frac{\partial}{\partial x} N(\pm x_*, y, t) = \frac{\partial}{\partial x} \bar{N}(\pm x_*, y, t), \quad (23)$$

$$N(\pm x_*, y, t) = \bar{N}(\pm x_*, y, t). \quad (24)$$

Учитывая то, что  $\bar{N}$  — функция, слабо меняющаяся на длине порядка размера кора, запишем решения (17), (22), (23) в виде

$$N(r) = \begin{cases} x \frac{\partial}{\partial x} \bar{N}(x_*) + \int_{-\infty}^{\infty} dy' \frac{N_{tr}(y')}{a\xi_{tr}} \int_0^{\infty} \frac{dk}{\pi} \cos(k(y-y')) \frac{\text{ch}(k(x-x_*))}{\text{ch}(kx_*)}, & x > 0, \\ (x - a\xi_{br}) \frac{\partial}{\partial x} \bar{N}(-x_*) + \int_{-\infty}^{\infty} dy' \frac{N_{tr}(y')}{a\xi_{tr}} \int_0^{\infty} \frac{dk}{\pi} \times \\ \times \frac{\cos(k(y-y')) \frac{\text{ch}(k(x+x_*))}{\text{ch}(kx_*)}}{1 + \xi_{br}ak \text{th}kx_*}, & x < 0. \end{cases} \quad (25)$$

Подставляя (25) в уравнение непрерывности потока в окопе (19), получим одномерное интегродифференциальное уравнение для описания диффузии атомов в окопе с учетом возможности обмена через террасу:

$$-D_{tr} \frac{\partial^2}{\partial y^2} N_{tr}(y, t) + \int_{-\infty}^{\infty} T(y-y') N_{tr}(y', t) dy' = F, \quad (26)$$

где

$$F = D \left( \frac{\partial}{\partial x} \bar{N}(x_*) - \frac{\partial}{\partial x} \bar{N}(-x_*) \right) \quad (27)$$



является полным макроскопическим потоком, падающим на ступень, а ядро интегрального оператора, описывающего обмен через прилегающие к ступени террасы, имеет вид

$$T(y) = \frac{D}{a\xi_{\text{tr}}} \int_0^{\infty} \frac{dk}{\pi} k \text{th}(kx_*) \cos(ky) \frac{2 + \xi_{\text{br}} a k \text{th}(kx_*)}{1 + \xi_{\text{br}} a k \text{th}(kx_*)}$$

Обмен между точками в окопе, расположенными на расстояниях, меньших длины одномерной диффузии

$$l_1 \equiv a \frac{\pi \xi_{\text{tr}} D_{\text{tr}}}{D}, \quad (28)$$

осуществляется за счет диффузии в окопе.<sup>3</sup> На больших же расстояниях обмен осуществляется преимущественно за счет диффузии по террасам. Отношение  $D_{\text{tr}}/D$  обычно мало, так как энергия активации для одномерной диффузии вдоль окопа превышает аналогичную энергию для диффузии по террасе. Причина этого — взаимодействие с химическими связями ступени. Однако это же взаимодействие является также и причиной образования потенциала окопа. Если глубина окопа превышает увеличение активационной энергии для одномерной диффузии в окопе, что представляется вполне естественным, то длина одномерной диффузии может значительно превышать постоянную решетки. Всюду с самого начала мы неявно предполагали

$$l_1 \gg a.$$

В противном случае учет диффузии в яме (19) и граничные условия (20) некорректны. Температурная зависимость  $l_1$  имеет активационный характер:

$$l_1 = \pi a \exp(\varphi_1/T), \quad (29)$$

где  $\varphi_1$  связана с глубиной окопа,  $\varphi_{\text{tr}}$ , и энергиями активаций диффузии на террасах,  $U$ , и в окопе,  $U_{\text{tr}}$ , простым соотношением  $\varphi_1 = \varphi_{\text{tr}} - U_{\text{tr}} + U$ .

Решение уравнения (26) с граничными условиями (20) в каждом изломе можно записать в виде

$$N_{\text{tr}}(y, t) = a\xi_{\text{tr}} N_{\text{eq}} + \lim_{\mu \rightarrow +0} \left[ \frac{F}{\mu} - \sum_j (A_j^\mu G_\mu(y - y_{\text{kink}_j}(t)) + B_j^\mu G'_\mu(y - y_{\text{kink}_j}(t))) \right], \quad (30)$$

где  $y_{\text{kink}_j}$  — координата  $j$ -го излома, а функция Грина  $G_\mu$  удовлетворяет уравнению

$$D_{\text{tr}} \frac{\partial^2}{\partial y^2} G_\mu(y) + \int_{-\infty}^{\infty} T(y-y') G_\mu(y') dy' + \mu G_\mu(y) = \delta(y) \quad (31)$$

<sup>3</sup> Отсутствие корня в определении длины одномерной диффузии связано с возможностью обратного перехода атома с террасы в окоп.

$$G_\mu(y) = \int_0^{+\infty} \frac{dk}{\pi} \cos(ky) \frac{1}{D_{tr}k^2 + \frac{Dk}{a\xi_{tr}} \operatorname{th}(kx_*)} \frac{1}{\frac{2 + \xi_{br}ak \operatorname{th}(kx_*)}{1 + \xi_{br}ak \operatorname{th}(kx_*)} + \mu}. \quad (32)$$

Воспользовавшись (21), (30), (31), получим

$$\frac{\partial}{\partial t} y_{\text{kink}_j} = aA_j^{\mu=0}. \quad (33)$$

Подставив (30) в граничные условия (20), получаем бесконечную систему линейных уравнений для определения коэффициентов  $A$  и  $B$ :

$$\begin{aligned} A_i^\mu G_\mu(0) - \frac{B_i^\mu}{2D_{tr}} + \sum_j ' (A_j^\mu G_\mu(y_{\text{kink}_i} - y_{\text{kink}_j}) + B_j^\mu G_\mu'(y_{\text{kink}_i} - y_{\text{kink}_j})) &= \frac{F}{\mu}, \\ \frac{A_i^\mu}{2D_{tr}} + B_i^\mu G_\mu''(-0) + \sum_j ' (A_j^\mu G_\mu'(y_{\text{kink}_i} - y_{\text{kink}_j}) + & \\ + B_j^\mu G_\mu''(y_{\text{kink}_i} - y_{\text{kink}_j})) &= 0 \end{aligned} \quad (34)$$

для всех  $i$ . Штрих над знаком суммы исключает слагаемые с  $j=i$ . Возникающая при вычислении  $G''(-0)$  расходимость должна быть обрезана на расстоянии порядка постоянной решетки кристалла, поскольку это определяет предел применимости диффузионных уравнений. Эта процедура корректна, поскольку расходимость логарифмическая.

Из (34) в линейном приближении легко найти связь между вариациями коэффициентов,  $\delta A_j = A_j^{\mu=0} - A$  (не зависящий от  $j$  коэффициент  $A = Fl$  соответствует периодическому расположению изломов, выбираемому как нулевое приближение), и отклонениями изломов от их периодического расположения,  $\zeta_i - \zeta_j \equiv y_{\text{kink}_i} - y_{\text{kink}_j} - l(i-j)$ :

$$\begin{aligned} \delta A(q) &= \zeta(q) \frac{A}{\mathcal{E}_o(q) \mathcal{E}_s(q) + \frac{1}{4D_{tr}^2} - (\mathcal{E}_s(q))^2} \times \\ &\times \left[ \left\{ \mathcal{E}_s(q) \mathcal{E}_s(0) - \frac{1}{4D_{tr}^2} \frac{\mathcal{E}_s(q)}{\mathcal{E}_s(0)} \right\} - \frac{1}{2D_{tr} \mathcal{E}_s(0)} \left\{ (\mathcal{E}_s(q) - \mathcal{E}_s(0))^2 - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \mathcal{E}_s(q) \mathcal{E}_s(q) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (35)$$

Здесь  $\zeta(q) = \sum_j \zeta_j \exp(-iqj)$ ,  $\delta A(q) = \sum_j \delta A_j \exp(-iqj)$ ,

$$\mathcal{E}_n(q) = \frac{1}{2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left( \frac{\partial^n}{\partial y^n} G(+\varepsilon) + \frac{\partial^n}{\partial y^n} G(-\varepsilon) \right) + \sum_{j \neq 0} \frac{\partial^n}{\partial y^n} G(lj) \exp(-iqj),$$

$$G \equiv G_{\mu=0}.$$

Скорость продвижения излома есть

$$\frac{\partial}{\partial t} y_{\text{kink}_j} = Fal + \frac{\partial}{\partial t} \zeta_j.$$

В результате довольно громоздких вычислений получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \zeta(q) = \frac{-\mathcal{K}_1(q) + i\mathcal{K}_2(q)}{\mathcal{K}_1(q)} Fa\zeta(q), \quad (36)$$

где выражения для функций  $\mathcal{K}$  в разных предельных случаях приведены в таблице.

Случай  $l \ll l_1$  ( $l_1$  определена в (28)) является по существу одномерным, и результат по своей форме совпадает с приведенным в [4]. Роль диффузии через террасы состоит в уменьшении асимметрии стока за счет обмена между соседними окопами, уменьшающегося при увеличении длины одномерной диффузии.

Вернемся к граничному условию (20б). В нем в принципе можно учесть малую вероятность преодолеть барьер, ограничивающий излом. Но эта вероятность определяется той же энергией, что и длина одномерной диффузии. Таким образом, пренебрежение этой вероятностью соответствует пренебрежению одной диффузионной траекторией по сравнению с большим числом порядка  $\ln(l/a)$  траекторий на террасе, которые учитывались в данной модели (именно это число и фигурирует в таблице).

Если же  $l \gg l_1$ , то мы приходим к двумерной задаче взаимовлияния изолированных стоков. Одномерная диффузия и асимметрия граничных условий (20) определяют эффективный размер стока и его дипольный момент.

Зависимость от высоты бруствера сводится к появлению перед отношением  $l/l_1$  числового множителя, лежащего в интервале между 1 и 2, определяемого вкладом в обмен диффузионных траекторий на верхней террасе.

Переходя к уравнениям эволюции огибающей ступени в соответствии с (9)—(14) и восстанавливая индексы, нумерующую ступень, получаем [при этом надо полагать  $l_a \gg \max(x_*, \frac{\sqrt{x_* l}}{\pi} \ln(1 + l/l_1))$ ]

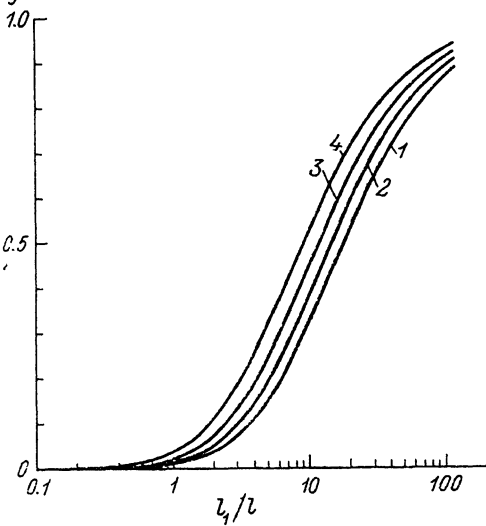
$$\frac{\partial}{\partial t} \gamma^m(y, t) = \left( F^m(y, t) a^2 - \frac{L}{\tau_s} \right) + \frac{L}{\alpha_s} \frac{\beta l^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \gamma^m(y, t), \quad (37)$$

где в соответствии с (27) и с учетом того, что  $\bar{N}$  — функция, слабо меняющаяся на длинах порядка кора ступени,

$$F^m = D \left( \frac{\partial}{\partial x} \bar{N}(X_{st}^m + 0) - \frac{\partial}{\partial x} \bar{N}(X_{st}^m - 0) \right), \quad (38)$$

	$\mathcal{R}_1$	$\mathcal{R}_2$	$\mathcal{R}_3$	$\beta$
$l \ll \min(l_1, \pi a \xi_{br})$	1	$\sin(q)$	$\beta(1 - \cos(q))$	$\left[ 1 + \frac{l}{l_1} \ln \left( \frac{l e^c}{a^2} \right) \right]^{-2}$
$\pi a \xi_{br} \ll l \ll l_1$	$ q  \left[ -\frac{1}{2} \operatorname{ctg} \left( \frac{ q }{2} \right) - \frac{1}{\pi} \left( \Psi \left( \frac{ q }{2\pi} \right) + C \right) + \right.$ $\left. + q \operatorname{th} \left( qx_*/l \right) \frac{2 + \xi_{br} \frac{a}{l} q \operatorname{th} \left( qx_*/l \right)}{1 + \xi_{br} \frac{a}{l} q \operatorname{th} \left( qx_*/l \right)} \times \right.$			$\left[ 1 + \frac{2l}{l_1} \ln \left( \frac{L/a}{(1 + \pi \xi_{br})^{1/2} 2} \frac{e^c}{2} \right) \right]^{-2}$
$l_1 \ll l \ll \pi a \xi_{br}$	$\times \frac{1}{\pi} \ln \left( \frac{l e^c}{l_1^2} \right)$	$q \left( 1 - \frac{ q }{\pi} \right)$		$\frac{2}{3} \left( \frac{l_1}{l} \right)^3 \frac{1}{\ln^2(l_1/a)}$
$l_1 \ll \pi a \xi_{br} \ll l$	$ q  \left[ -\frac{1}{2} \operatorname{ctg} \left( \frac{ q }{2} \right) - \frac{1}{\pi} \left( \Psi \left( \frac{ q }{2\pi} \right) + C \right) + \right.$ $\left. + q \operatorname{th} \left( qx_*/l \right) \frac{2}{\pi} \ln \left( \frac{\sqrt{\pi a \xi_{br}} e^c}{l_1} \right) \right]$		$\beta \frac{q^2}{2} \left[ 1 - \frac{ q }{\pi} + \frac{q^2}{2\pi^2} - \frac{ q  q^2}{8\pi^3} \right]$	$\frac{1}{3} \left( \frac{l_1}{l} \right)^3 \frac{1}{\ln^2(l_1/a)}$
$\pi a \xi_{br} \ll l_1 \ll l$	$ q  \left[ -\frac{1}{2} \operatorname{ctg} \left( \frac{ q }{2} \right) - \frac{1}{\pi} \left( \Psi \left( \frac{ q }{2\pi} \right) + C \right) + \right.$ $\left. + q \operatorname{th} \left( qx_*/l \right) \frac{1}{\pi} \ln \left( \frac{l e^c}{l_1} \right) \right]$			$\frac{1}{12} \left( \frac{l_1}{l} \right)^3 \frac{1}{\ln^2 \left( l_1/a \frac{1}{(1 + \pi \xi_{br})^{1/2}} \right)}$

Примечание. —  $\pi \ll q \ll \pi$ ,  $C \approx 0.577$  — постоянная Эйлера,  $\Psi$  — пси-функция.



а параметр  $\beta$  характеризует эффективную асимметрию изломов. Асимптотические выражения для  $\beta$  (вычисленные с логарифмической точностью) приведены в таблице. На рис. 4 приведены значения  $\beta$  для конкретных значений параметров. Первое слагаемое в (37) обусловлено неоднородностью макроскопического потока из-за изгиба ступеней. Учет же этой неоднородности во втором слагаемом был бы выходом за рамки первого порядка теории возмущений.

В дальнейшем нам понадобится знать усредненную концентрацию в окопе:

$$\bar{N}_{tr}(y, t) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dy' N_{tr}(y', t) \int_0^{+\infty} \frac{dk}{\pi} \frac{\cos(k(y-y'))}{\text{ch}(kx_*)}. \quad (39)$$

Подставляя (30) в (39) и рассматривая лишь малые флуктуации с длиной волны, много большей, чем  $x_*$ , воспользовавшись (33), получим

$$\frac{1}{\xi_{tr}} \bar{N}_{tr}^m(y, t) = aN_{eq} + \tau_c F^m(y, t) \left( 1 + \frac{l}{a} \frac{\partial}{\partial y} \gamma^m + \frac{\beta}{2} \frac{l^2}{a} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \gamma^m \right), \quad (40)$$

где  $\tau_c$  — время захвата атома в излом, и в случае  $l \gg l_1$

$$\tau_c = f \frac{la}{2D\pi} \ln \left( \frac{l}{l_1} \frac{e^C}{2} \right), \quad (41a)$$

где  $C \approx 0.577$  — постоянная Эйлера, а фактор  $f$  определяется вкладом диффузионных траекторий на верхней террасе и лежит в интервале от 1 до 2. В случае  $l \ll l_1$  вторым слагаемым в (40) можно пренебречь, что соответствует достоверному захвату на излом атома, попавшего в кор ступени, и полагать

$$\tau_c = 0, \quad l \ll l_1. \quad (41b)$$

2) Вклад в эволюцию перераспределения потоков на террасе. Получим уравнения для макроскопических распределений в приближении самосогласованного поля. Концентрация вдали от кора ступени совпадает с макроскопическим распределением, и из (15) мы просто получим

$$-D\Delta\tilde{N}(r, t) = J - \frac{\tilde{N}(r, t)}{\tau}. \quad (42)$$

Для получения граничных условий используем уравнения (23)–(25). Из (25) имеем

$$N(X_{st}^m + x_*) = x_* \frac{\partial}{\partial x} \tilde{N}(X_{st}^m + x_*) + \frac{1}{a\xi_{tr}} \tilde{N}_{tr}^m,$$

$$N(X_{st}^m - x_*) + a\xi_{br} \frac{\partial}{\partial x} N(X_{st}^m - x_*) = -x_* \frac{\partial}{\partial x} \tilde{N}(X_{st}^m - x_*) + \frac{1}{a\xi_{tr}} \tilde{N}_{tr}^m,$$

где  $\tilde{N}_{tr}^m$  определена в формулах (39), (40). Положив

$$N(X_{st}^m \pm x_*) = N(X_{st}^m \pm 0) \pm x_* \frac{\partial}{\partial x} \tilde{N}(X_{st}^m \pm 0),$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \tilde{N}(X_{st}^m \pm x_*) = \frac{\partial}{\partial x} \tilde{N}(X_{st}^m \pm 0),$$

получим окончательно граничные условия для макроскопической концентрации

$$\tilde{N}(X_{st}^m + 0) = \frac{1}{a\xi_{tr}} \tilde{N}_{tr}^m,$$

$$\tilde{N}(X_{st}^m - 0) + a\xi_{br} \frac{\partial}{\partial x} \tilde{N}(X_{st}^m - 0) = \frac{1}{a\xi_{tr}} \tilde{N}_{tr}^m. \quad (43)$$

Теперь надо решить (37), (38), (40), (42), (43) в первом порядке граничной теории возмущений по малым флуктуациям формы ступени.

В нулевом приближении (учитывая, что  $L_D \gg L$ ) получим

$$\tilde{N}^{(0)} = N_{eq} + \left( J - \frac{N_{eq}}{\tau} \right) \left( \frac{1}{2D} x \left( L + \frac{1}{1/L + 1/a\xi_{br}} - x \right) + \frac{L}{a} \tau_c \right),$$

$$0 < x < L. \quad (44)$$

Выражение (44) написано в системе координат, в которой начало отсчета  $X$  совпадает со ступенью с номером  $m = 0$ . Концентрация на остальных террасах находится с учетом периодичности  $\tilde{N}^{(0)}$  по  $x$ . Подставляя вычисленный из (38) поток в (37) и полагая  $\gamma \equiv 0$ , получим выражение

$$\frac{1}{\tau_s} = \left( J - \frac{N_{eq}}{\tau} \right) a^2, \quad (45)$$

соответствующее тому, что весь неравновесный поток расходуется на рост кристалла.

В первом порядке теории возмущений имеем

$$\Delta\tilde{N}^{(1)} = 0 \quad (46)$$

при граничных условиях

$$\tilde{N}^{(1)}(mL+0) = \frac{1}{a\xi_{\text{tr}}^{\xi}} \tilde{N}_{\text{tr}}^{(1)m} - \gamma^m \frac{\partial}{\partial x} \tilde{N}^{(0)} \Big|_{x=0}, \quad (47)$$

$$\begin{aligned} & \tilde{N}^{(1)}(mL-0) + a\xi_{\text{br}}^{\xi} \frac{\partial}{\partial x} \tilde{N}^{(1)}(mL-0) = \\ & = \frac{1}{a\xi_{\text{tr}}^{\xi}} \tilde{N}_{\text{tr}}^{(1)m} - \gamma^m \left( \frac{\partial}{\partial x} \tilde{N}^{(0)} + a\xi_{\text{br}}^{\xi} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{N}^{(0)} \right) \Big|_{x=L}. \end{aligned}$$

Для  $\tilde{N}_{\text{tr}}^{(1)m}$ , варьируя (40), получим

$$\frac{1}{\xi_{\text{tr}}^{\xi}} \tilde{N}_{\text{tr}}^{(1)m} = \tau_c F^{(1)} + \frac{\tau_c}{\tau_s} \frac{L}{a^2} \left( \frac{l}{a} \frac{\partial}{\partial y} \gamma^m + \frac{\beta}{2} \frac{l^2}{a} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \gamma^m \right). \quad (48)$$

Решая (46)—(48) и учитывая (37)—(38), получим выражение вида (13) с

$$\lambda = \frac{\lambda_1(k_y, q_x) + \lambda_2(k_y, q_x) + \lambda_3(k_y)}{1 + \frac{D\tau_c}{La} \psi(k_y, q_x)}, \quad (49)$$

где

$$\begin{aligned} \lambda_1 = & \left\{ i \sin(q_x) - \frac{1}{\left( \frac{L}{a\xi_{\text{br}}^{\xi}} + 1 \right)^2} (1 - \cos(q_x)) \right\} \times \\ & \times \left[ \frac{k_y L}{\text{sh}(k_y L)} \frac{1 + \frac{\xi_{\text{br}}^{\xi} a}{L}}{1 + \xi_{\text{br}}^{\xi} a k_y \text{cth}(k_y L)} \right], \end{aligned} \quad (50)$$

$$\lambda_2 = \frac{\frac{1}{2} k_y^2 L^2}{L/a\xi_{\text{br}}^{\xi} + 1} \frac{1 + \frac{\xi_{\text{br}}^{\xi} a}{L} \left( 2 - 2 \frac{\text{th}(k_y L/2)}{k_y L} \right)}{1 + \xi_{\text{br}}^{\xi} a k_y \text{cth}(k_y L)}, \quad (51)$$

$$\lambda_3 = \frac{L}{a} \left( i k_y l - \frac{\beta}{2} k_y^2 l^2 \right), \quad (52)$$

$$\psi = k_y^2 L^2 \frac{\frac{\xi_{\text{br}}^{\xi} a}{L} + 2 \frac{\text{th}(k_y L/2)}{k_y L}}{1 + \xi_{\text{br}}^{\xi} a k_y \text{cth}(k_y L)} + 2 (1 - \cos(q_x)) \frac{\frac{k_y L}{\text{sh}(k_y L)}}{1 + \xi_{\text{br}}^{\xi} a k_y \text{cth}(k_y L)}. \quad (53)$$

Частный случай формулы (50) при  $k_y = 0$  был получен<sup>4</sup> в [4] и соответствует рассмотрению, приведенному в начале статьи. Асимметрия перехода атомов на ступень приводит к устойчивости системы относительно безызгибных флуктуаций, связанных с изменением расстояния между ступенями. Появление экспоненциально убывающего при  $k_y L \gg 1$  множителя связано с тем, что такие коротковолновые

<sup>4</sup> Расхождение в ответе связано с алгебраической ошибкой в [4]. Там вместо  $(1 + L/a\xi_{\text{br}}^{\xi})^{-2}$  фигурирует  $(1 + L/a\xi_{\text{br}}^{\xi})^{-1}$ .

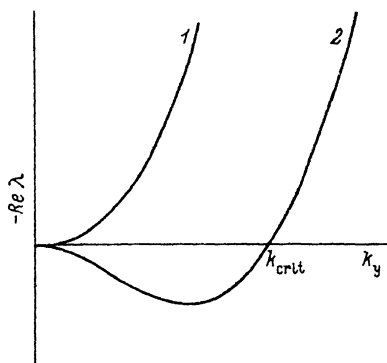


Рис. 5. Зависимость декремента затухания флуктуации от ее волнового вектора в случае выполнения условия устойчивости системы (1) и его невыполнения (2).

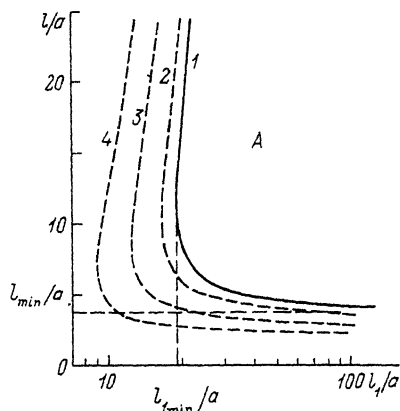


Рис. 6. Диаграмма стабильности системы.

Граница области стабильности (сплошная линия) и изолинии критических векторов флуктуаций (штриховая).  $l/a = 50$ ,  $\xi_{br} = 20$ . Значения  $k_{crit}$ : 1—0, 2—2, 3—5, 4—10. А—стабильный рост. То же для рис. 8.

флуктуации на разных ступенях не могут влиять друг на друга, так как порождаемые ими диффузионные потоки экспоненциально затухают на расстояниях  $\sim 1/k_y$ .

Выражение (51) было получено в [5] и отражает нестабильность системы к изгибным флуктуациям. Причина этой неустойчивости также обсуждалась выше.

В обеих цитируемых работах не учитывалось взаимовлияние изломов и степень рассматривалась как непрерывный сток. Проведенный нами анализ показывает, что дискретность изломов и их взаимовлияние обуславливают затухание изгибных флуктуаций ступеней, описываемое функцией  $\lambda_3$  (52).

Знаменатель в (49) связан с неполным поглощением ступенью изменившегося потока.

4. Условие устойчивости системы и обсуждение результатов. Из (8), (49)—(52) следует, что система устойчива, если

$$\beta > \frac{aL_{eff}}{l^2}, \quad \frac{1}{L_{eff}} = \frac{1}{L} + \frac{1}{a\xi_{br}}. \quad (54)$$

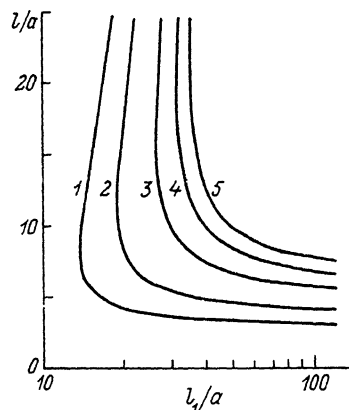
Если же это условие не выполняется, система неустойчива по отношению к длинноволновым флуктуациям с  $k_y < k_{crit}$  (рис. 5).

Подставляя  $\beta$  из таблицы в (54), получим условие устойчивости, которое удобно представить в виде диаграммы (рис. 6, 7). Наименьшее значение расстояния между изломами, при котором возможен стабильный рост

$$l_{min} = \sqrt{aL_{eff}}. \quad (55)$$

Рис. 7. Границы области стабильности системы при разных высотах брусствера.

$l/a = 50$ . Значения  $\xi_{br}$ : 1—10, 2—20, 3—50, 4—100, 5—200.





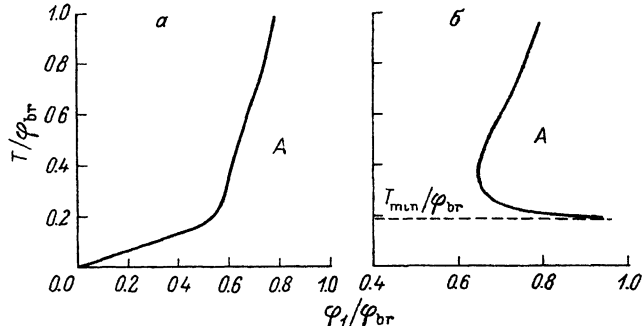


Рис. 8. Области температур стабильного роста.  
 $a - l > \sqrt{aL}$ ,  $L/a = 50$ ,  $l/a = 10$  и  $b - l < \sqrt{aL}$ ,  $L/a = 150$ ,  $l/a = 10$ .

Это ограничение связано с различной природой противодействующих друг другу механизмов (51) и (52). Стабилизирующее систему слагаемое (52) обусловлено взаимовлиянием изломов и, следовательно, пропорционально изменению расстояния между изломами, которое порядка амплитуды флуктуации, отнесенной к количеству изломов, приходящихся на длину волны флуктуации. С уменьшением расстояния между изломами количество таких изломов увеличивается, а следовательно, уменьшаются изменение расстояния между изломами и соответственно слагаемое (52). Дестабилизирующее же систему слагаемое (51) обусловлено перераспределением макроскопических потоков и поэтому не меняется при изменении расстояния между изломами. Конкуренция этих двух механизмов и приводит к условию (55). Ограничение расстояния между изломами сверху связано с уменьшением параметра асимметрии  $\beta$ .

Длина одномерной диффузии не должна быть меньше, чем

$$l_{1\min} \approx l_{\min} \left[ \ln \left( \frac{l_{\min}}{a} \frac{e^{\epsilon+1}}{2} \ln \left( \frac{l_{\min}}{a} \right) \right) + o(1) \right],$$

где  $l_{\min}$  определена в (55). При меньших же  $l_1$  эффективная асимметрия излома недостаточно сильна, чтобы взаимовлияние изломов могло противодействовать разрастанию флуктуаций.

С уменьшением высоты бруствера при постоянной температуре область стабильности расширяется (рис. 7), поскольку уменьшается дестабилизирующее систему слагаемое, хотя при этом увеличивается время затухания флуктуаций, связанных с изменением расстояния между прямыми ступенями.

Параметры  $\xi_{br}$  и  $l_1$  не независимы. Их связь выражают формулы (18б), (29), описывающие температурные зависимости этих параметров, причем соотношение соответствующих активационных энергий является характеристикой материала. Изменяя температуру процесса роста кристалла, можно перейти из режима стабильного роста в режим неустойчивости. Интервал температур, при котором возможен устойчивый рост, приведен на рис. 8. В случае  $l < \sqrt{aL}$  (рис. 8, б) температура стабильного роста не может быть меньше

$$T_{\min} = \frac{\varphi_{br}}{\ln \left( \frac{l^2/a^2}{1 - l^2/aL} \right)}.$$

Невозможность стабильного роста при низких температурах легко понять. Действительно, при этом как стабилизирующее систему слагаемое (52), так и дестабилизирующее ее (51) достигают своих максимальных значений. Однако при таких малых расстояниях между изломами (см. рассуждения при обосновании (55)) подавления неустойчивости не происходит. При больших же расстояниях между изломами ( $l > \sqrt{aL}$ ) область температур устойчивого роста снизу не ограничена (рис. 8, а).

Обсудим теперь сделанные приближения. Во-первых, мы не рассматривали детального строения изломов. Однако в ответ характеристики изломов вошли логарифмическим образом, и более точный анализ привел бы к появлению не представляющих интереса логарифмических поправок. Далее, мы работали в приближении невзаимодействующих (в энергетическом смысле) изломов. Отталкивание изломов друг от друга также приводит к стабилизации поверхности. Такое отталкивание возникает из-за взаимодействия через упругие поля. Учет этого эффекта осуществляется заменой в (20а)  $N_{eq} \rightarrow N_{eq} (1 + \delta E/T)$  [7], где  $\delta E$  — изменение энергии ступени при встраивании одного атома в излом, связанное с взаимодействием изломов. Полученный ответ сводится к появлению в (49) еще одного члена:

$$\lambda_4 = -\frac{\Gamma}{2} \frac{\tau_s}{\tau_{ev}} k_y^2 a L \left( 1 + \frac{L_D^2}{L^2} \psi(k_y, q_x) \right), \quad (56)$$

входящего в (49) в той же форме, что и  $\lambda_{1-3}$ . Здесь  $L_D$  определена в (16),  $\psi(k_y, q_x)$  определена в (53),  $\tau_{ev} = \tau / N_{eq} a^2$  — время испарения одного монослоя при нулевом потоке атомов на поверхность из газовой фазы, а отношение  $\tau_{ev} / \tau_s$  есть просто относительное пересыщение газовой фазы. Величина  $\Gamma$  зависит от закона взаимодействия между изломами. Для потенциала взаимодействия изломов  $V(r)$  вида  $V(r) = V_0 (a/r)^\alpha$  ( $V_0, \alpha$  — константы;  $r$  — расстояние между изломами)

$$\Gamma = \alpha (\alpha - 1) \zeta(\alpha) \frac{V_0}{T} \left( \frac{a}{l} \right)^{\alpha-1},$$

где  $\zeta(\alpha)$  —  $\zeta$ -функция Римана. Рассмотрим теперь, при каких условиях (56) достаточно, чтобы компенсировать неустойчивость к изгибным флуктуациям (51). Сравнивая (56) и (51), заметим, что при  $\tau_{ev} / \tau_s > \Gamma a / L_{eff}$  термодинамическое слагаемое не может обеспечить устойчивости к длинноволновым флуктуациям. Для взаимодействия поверхностных деформационных диполей ( $\alpha = 3$ ,  $V_0 \approx 10 T$ ) это неравенство приобретает вид  $\tau_{ev} / \tau_s > 72 a^3 / l^2 L_{eff}$ . Таким образом, термодинамическая стабилизация возможна лишь при очень малых пересыщениях.

Обсудим теперь возможность независимого рассмотрения перераспределения изломов и изменения диффузионных потоков на террасах. Взаимовлияние этих двух слагаемых легко учесть, считая  $F$  в (26) плавной функцией от координаты. Не представляющий сложности расчет приводит (в нижнем по  $k_y$  порядке) к появлению в (50) действительного слагаемого, пропорционального  $k_y \sin(q_x)$  и обусловленного обсужденной выше асимметрией излома. Наличие слагаемого такого вида приводит к ужесточению условия стабильности (54), однако пока  $\xi_{br} \gg (L/a)^{1/2}$ , этим можно пренебречь. Обратное соотношение параметров не представляет интереса, поскольку тогда декремент затухания безызгибных флуктуаций мал как  $a/L$ .

Конечную диффузионную длину  $L_D$  можно учесть в рамках изложенного выше подхода. При  $\min(l, l^2/l_1) \ll L_D \ll L$  взаимовлияние ступеней отсутствует, ступени могут рассматриваться изолированно, роль же взаимовлияния изломов

не изменяется. Если же  $l \gg \max(L_D, (L_D l_1)^{1/2})$ , то изломы независимы друг от друга.

Рассматривая вицинальную поверхность, мы пренебрегли одномерным зародышеобразованием, которое было рассмотрено в работе [8] без учета влияния изломов на перераспределение диффузионных потоков. Рассмотрение одномерного зародышеобразования с учетом взаимовлияния изломов, разумеется, важно при рассмотрении ограниченных вицинальных поверхностей и должно стать предметом дальнейшего анализа.

Итак, мы показали возможность стабильного роста вицинальной поверхности кубического кристалла в режиме kink flow. Существенно, что устойчивость роста в этом случае обеспечивается не термодинамическими, а кинетическими факторами. Рассмотренная нами ситуация очень близка к молекулярно-лучевой эпитаксии кристаллов типа  $A^3B^5$ , которая обычно проводится при избытке летучей компоненты В. В этом случае кинетика описывается однокомпонентной поверхностной диффузией атомов А (см., например, [9]); ступени на поверхности, близкой к (001), имеют двойную высоту, а энергии образования изломов на ступенях [110] и  $[\bar{1}\bar{1}0]$  существенно различны [10]. Наиболее подходящей является ступень, слабо отклоненная от [110]. Учет влияния анизотропии коэффициента диффузии [11] производится соответствующим преобразованием координат и не приводит к качественно новым следствиям. Полученные нами результаты применимы также и для других процессов выращивания, в которых лимитирующей стадией является поверхностная диффузия.

#### Список литературы

- [1] Чернов А. А., Гиваргизов Е. И., Багдасаров Х. С. Современная кристаллография. М.: Наука, 1980. Т. 3. 403 с.
- [2] Neave J. H., Dobson P. J., Joyce P. A. // Appl. Phys. Lett. 1985. V. 47. P. 100.
- [3] Burton W., Cabrera N., Frank F. // Phil. Trans. A. 1951. V. 243. P. 299.
- [4] Tokura Y., Saito H., Fukui T. // J. Crystal Growth. 1989. V. 94. P. 46.
- [5] Bales G. S., Zangwill A. // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 5500.
- [6] Asai H. // J. Crystal. Growth. 1987. V. 80. P. 425.
- [7] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [8] Воронков В. В. // Кристаллография. 1970. Т. 15. С. 13.
- [9] Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры / Под ред. Л. Ченга и К. Плога. М.: Мир, 1989. 582 с.
- [10] Алейнер И. Л., Сурис Р. А. // Письма в ЖТФ. 1990. Т. 16. № 14. С. 61.
- [11] Kawabe M., Susaga T. // Japan. J. Appl. Phys. 1989. V. 28. P. L1077.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе РАН  
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию  
10 декабря 1991 г.