

Роль одномерной диффузии в модели роста поверхности кристалла Косселя

© А.М. Бойко[¶], Р.А. Сурис

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 2 августа 2005 г. Принята к печати 31 августа 2005 г.)

Изучен кинетический механизм образования дефектов на вицинальной поверхности, разориентированной в двух направлениях, при молекулярно-пучковой эпитаксии. Эти дефекты представляют собой два адатома — „двойку“, слипшихся в потенциальной канаве у края ступени. Изучено влияние параметров поверхности и скорости роста на вероятность образования таких дефектов. Показано, что увеличение угла разориентации поверхности способствует резкому уменьшению количества дефектов в процессе роста.

PACS: 81.15.Aa

1. Введение

В работе [1] исследовалась устойчивость системы прямых параллельных равноотстоящих атомных ступеней на растущей поверхности по отношению к флуктуациям расстояний между ними (безызгибные флуктуации) (рис. 1). Было показано, что такая система устойчива относительно флуктуации расстояний между атомными ступенями, если скорость встраивания атома, подошедшего к ступени со стороны нижней террасы больше скорости встраивания атома, подошедшего к ступени со стороны верхней террасы, т.е. имеет место асимметрия захвата.

Принцип стабилизации состоит в следующем [1]. Предположим, что длина одной из террас (рис. 1, 1) уменьшалась за счет увеличения соседней (рис. 1, 2), соответственно увеличился поток на террасу 2, а на террасу 1 — уменьшился. Вследствие указанной выше асимметрии поток атомов на края ступеней распределится так, что ступень, ограничивающая террасу 2 слева, начнет догонять правую ступень и исходная флуктуация затухнет. Такой режим получил название *step-flow*.

В 1990 году была опубликована работа [2], посвященная проблеме стабильности роста вицинальной поверхности, состоящей из параллельных равноотстоящих ступеней по отношению к изгибным флуктуациям. Ее авторы продемонстрировали, что в общем виде такая система неустойчива относительно флуктуаций в виде изгиба края ступеней.

В 1992 году в работе [3] был предложен новый механизм роста — *kink-flow*¹, который позволял подавлять эту неустойчивость. Для реализации этого принципа стабилизации в механизме *kink-flow* [3] атом встраивается в излом (*kink*) не прямо с террасы, а путем захвата в потенциальную канаву около ступени с последующей одномерной диффузией в ней к излому. Если в случае *step-flow* стабильность обеспечивается асимметрией захвата адатома краем ступени, то в случае *kink-flow* асимметрия захвата относится не только к захвату краем

ступени, но и к захвату адатома изломом края ступени. Такая асимметрия означает, что попав в потенциальную канаву изломами *a* и *b* (см. вставку к рис. 2), атом может встроиться только в излом типа *a*. Потенциальная канавка является одномерной ловушкой для адатомов, ограниченной с одной стороны отражающим, а с другой — поглощающим краями.

Поверхность, состоящая из однотипных изломов, на которой можно было бы реализовать рост по такому механизму, и была рассмотрена в работе [3]. На этой поверхности мы имеем „приготовленные“ изломы за счет разориентации поверхности, и рост кристалла происходит за счет движения решетки изломов без образования новых, в отличие от режима *step-flow*.

Идея существования потенциальной канавы у края ступени и диффузионного транспортного механизма активно использовалась в [4–6].

Потенциальная канавка у края ступени обладает важной особенностью, которая состоит в том, что если в ней окажутся хотя бы два атома, то они могут слипнуться, образовав одномерный зародыш (рис. 3, *a*) нового атомного ряда из работы [7]. В дальнейшем мы будем обозначать термином „двойка“ одномерный зародыш, состоящий из двух атомов.

В работах [8–11] возникновение одномерных зародышей „двоек“ на краях ступеней рассматривается как помеха для диффузии вдоль края ступени, которая со временем исчезает. В работе [3] была обозначена возможность образования одномерных зародышей, а

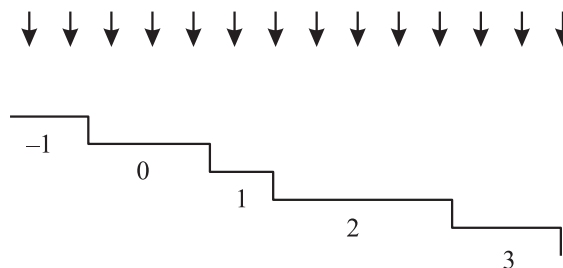


Рис. 1. Флуктуация расстояния между ступенями (из работы [2]).

[¶] E-mail: boiko@theory.ioffe.ru

¹ По аналогии со *step-flow* из работы [1].

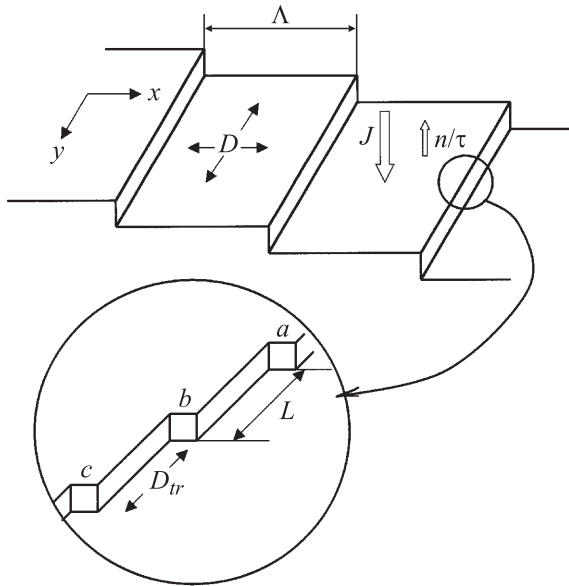


Рис. 2. Схематическое изображение растущей вициальной поверхности из работы [3].

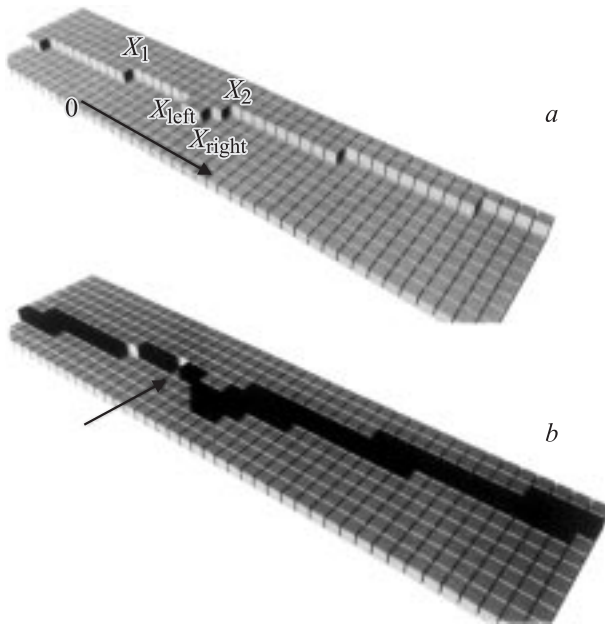


Рис. 3. *a* — атомная ступень, разделенная изломами на участки равной длины, и „двойка“ между двух изломов. *b* — вид ступени в момент, предшествующий полному заполнению ряда атомов между „двойкой“ и изломом. Изгиб ступени.

детальное рассмотрение этого процесса предполагалось провести позже.

В нашей работе мы детально рассмотрим процесс формирования „двоек“ в потенциальной канаве у края ступени. Мы покажем, что „двойка“ становится не только препятствием для свободной диффузии адатомов в этой потенциальной канаве, но также неизбежно становится причиной образования изгиба края ступени

(рис. 3, *b*), что в результате приведет к возникновению дефектов в режиме роста *kink-flow*. Мы продемонстрируем, как вероятность образования „двойки“ зависит от потока.

2. Влияние „двоек“

В этом параграфе мы рассмотрим влияние „двоек“ на рост поверхности в приближении, исключающем возможность их распада. Мы покажем, что возникшая в процессе роста поверхности одиночная „двойка“, просуществовав какое-то время, не поглотится бесследно растущей поверхностью, а станет дефектом на поверхности, представляющим собой изгиб ступени. Мы покажем, что образование изгиба ступени из-за возникшей „двойки“ определяется исключительно расстоянием между изломами и ступенями.

Рассмотрим атомную вициальную поверхность, состоящую из участков атомно-гладких террас, разделенных ступенями (рис. 2). Край ступени содержит направленные в одну сторону изломы, расстояние между которыми составляет L (рис. 2). На такой поверхности при отсутствии одномерного зародышеобразования мог бы реализоваться режим идеального *kink-flow* [3]. Этот режим мог бы реализоваться в том случае, если потенциальная канава между изломами достаточно глубока и захват адатома в излом происходит со всей длины потенциальной канавы у края ступени. В этом случае скорость движения каждого излома прямо пропорциональна длине примыкающей к излому потенциальной канавы.

Разместим между двумя ближайшими изломами „двойку“. Поскольку „двойка“ — это одномерный зародыш на краю ступени, его будет удобно описывать при помощи двух координат — координаты его левого края x_{left} и координаты его правого края x_{right} (рис. 3, *a*). Запишем систему уравнений, описывающую движение изломов с координатами x_1 и x_2 , — это изломы, между которыми расположена „двойка“, и изломов x_{left} и x_{right} , являющихся соответственно левой и правой границами „двойки“ (рис. 3, *a*). Мы рассмотрим ситуацию, при которой изломы x_1 и x_{left} , достигнув один другого, образуют заполненный ряд атомов, и при этом излом x_1 перескакивает в положение излома x_{right} . Далее, оценив время этого процесса, мы покажем, как „двойка“ превращается в изгиб ступени, образуя дефект на поверхности, растущей в режиме *kink-flow*.

Обозначим постоянную решетки a , поток на поверхность J , и если время роста монослоя T_{ml} , то

$$J = \frac{1}{T_{ml} a^2}.$$

Поскольку в рассматриваемом случае идеального *kink-flow* скорость движения излома прямо пропорциональна длине участка ступени, примыкающего к поглощающему излому, то уравнения для движения изломов будут

иметь весьма простой вид. Уравнения для изломов, двигающихся навстречу друг другу (x_1 и x_{left}), будут иметь несколько отличающийся вид. Поскольку скорость их сближения будет уменьшаться пропорционально уменьшению расстояния между ними, окажется, что время образования заполненного ряда атомов стремится к бесконечности. Но это, естественно, не так. Дело в том, что оставшаяся в этом ряду незаполненная позиция, показанная на рис. 3, *b* стрелкой, будет заполнена одним атомом прямым встраиванием с поверхности. И для того, чтобы это отразить в дифференциальном уравнении для $x_1(t)$ и $x_{\text{left}}(t)$, мы добавили последнее слагаемое „ a “:

$$\begin{aligned}\frac{dx_1(t)}{dt} &= \frac{1}{2} a \Lambda J (x_{\text{left}}(t) - x_1(t) + a), \\ \frac{dx_{\text{left}}(t)}{dt} &= \frac{1}{2} a \Lambda J (x_1(t) - x_{\text{left}}(t) - a), \\ \frac{dx_{\text{right}}(t)}{dt} &= a \Lambda J (x_2(t) - x_{\text{right}}(t)), \\ \frac{dx_2(t)}{dt} &= a \Lambda 2 J L.\end{aligned}\quad (1)$$

Решениями системы являются

$$\begin{aligned}x_1(t) &= \left(\frac{x_1^0 - x_{\text{left}}^0 - a}{2} \right) e^{-a \Lambda J t} + \frac{x_1^0 + x_{\text{left}}^0 + a}{2}, \\ x_{\text{left}}(t) &= \left(\frac{-x_1^0 + x_{\text{left}}^0 + a}{2} \right) e^{-a \Lambda J t} + \frac{x_1^0 + x_{\text{left}}^0 - a}{2}, \\ x_{\text{right}}(t) &= (x_{\text{right}}^0 - x_2^0 + L) e^{-a \Lambda J t} + (x_2^0 + a \Lambda J L t - L), \\ x_2(t) &= x_2^0 + a \Lambda J L t.\end{aligned}$$

Приравняв x_1 и x_{left} , получим время, необходимое для того чтобы изломы „1“ и „L“ слились в заполненный ряд атомов

$$T_2 = \frac{\ln \left(\frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{a} + 1 \right)}{a \Lambda J}.\quad (2)$$

Подчеркнем еще раз, что в течение всего этого времени потенциальная канава между изломами „ x_{left} “ и „ x_{right} “ представляет собой ловушку для атомов, которые не имеют возможности ее ни покинуть, ни встроиться в излом по причине отсутствия поглощающего излома.

Легко оценить снизу число атомов K , которые окажутся в потенциальной канаве, возникшей у края протяженного одномерного зародыша, образовавшегося разрастанием „двойки“, за то время, пока этот зародыш не сольется со ступенью:

$$\begin{aligned}K &= \frac{L}{2a} \left[\ln \left(\frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{a} + 1 \right) \right]^2 + \frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{2a} \\ &\times \left(1 - \ln \left(\frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{a} + 1 \right) \right) + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{a} + 1 \right).\end{aligned}\quad (3)$$

Если „двойка“ образовалась на расстоянии более $4a$ от поглощающего излома, то величина K примет значение L/a и будет расти с ростом L . Далее мы увидим, что вероятность „двойки“ образоваться максимальна именно у отражающего края ступени, где характерное значение $x_{\text{left}}^0 - x_1^1$ близко к L . Такое количество выпавших атомов ведет к тому, что на одномерном зародыше возникнут следующие зародыши, которые сформируют выступ ступени (рис. 3, *b*). Формирование таких выступов приведет к переходу роста из режима *kink-flow* в обычный *step-flow*, где эти выступы являются изгибами ступеней. А неустойчивость режима *step-flow* по отношению к изгибам ступени показана в работе [2]. Следовательно, чистый режим *kink-flow* невозможен, и далее мы оцениваем количество возникающих дефектов.

Заметим, что эта оценка (3) занижена, так как образующийся изгиб ступени будет собирать атомы не с длины своего основания, как показано в оценке, а со всего своего изогнутого края.

3. Качественная оценка темпа образования „двоек“

Обозначим время прыжка атома вдоль ступени на одно межатомное расстояние как τ_0 , тогда коэффициент диффузии в канаве $D = a^2/2\tau_0$, а характерное время диффузии адатома вдоль потенциальной канавы у края ступени обозначим как

$$\tau_D \propto L^2/D.\quad (4)$$

Весь процесс роста и образования „двоек“ выглядит так: в потенциальную канаву у края ступени, ограниченную изломами (см. вставку на рис. 2), с нижней террасы попадает адатом и за время порядка τ_D встраивается в излом за счет диффузии вдоль потенциальной канавы у края ступени. Отметим, что мы предполагаем глубину потенциальной канавы достаточной для того, чтобы исключить из рассмотрения процесс выброса атома из канавы обратно на террасу. Затем в течение времени длительного промежутка времени порядка $\tau_J = \frac{a^2}{\Lambda L} T_{ml}$ потенциальная канава у края ступени пустует. Здесь τ_J — это средний временной интервал между выпадением атомов из газовой фазы на участок поверхности размерами $L \times \Lambda$. Далее, в процессе заполнения одного монослоя этот процесс повторится $\frac{L\Lambda}{a^2}$ раз. Для образования самой „двойки“ необходимо, чтобы в течение того времени, пока находящийся в потенциальной канаве адатом не успел встроиться в поглощающий излом, в этой канаве оказался еще один адатом. После этого либо образуется „двойка“, либо ближайший к поглощающему излому адатом встроится в него.

При всех дальнейших расчетах мы будем пользоваться тем фактом, что $\tau_D \ll \tau_J$. Поскольку характерное время диффузии адатома в потенциальной канаве вблизи края

ступени $\tau_D \approx \frac{L^2}{D} = \tau_0 \frac{L^2}{a^2}$, а $\tau_J = \frac{a^2}{\Lambda L} T_{ml}$, отношение этих времен составляет величину

$$\frac{\tau_D}{\tau_J} = \frac{\tau_0}{T_{ml}} \frac{\Lambda L^3}{a^4}, \quad (5)$$

много меньшую единицы при всех физически разумных значениях времени роста монослоя, которое обычно порядка одной секунды. Возьмем, например, $\Lambda = 30a$ — при этом угол разориентации составит 1.9 градуса. Значение L примем также равным $30a$ для того, чтобы наши расчеты были сопоставимы с результатами статьи [3]. Оценим τ_0 исходя из того, что при обычных значениях частоты колебания атома на поверхности $\nu_0 \approx 10^{13}$ Гц, энергии активации диффузии порядка 1 эВ и температуре 1000 К время прыжка составит $\frac{1}{\nu_0} \exp\left(\frac{U}{kT}\right) = 10^{-9}$ с. Обычно $T_{ml} \approx 1$ с. Следовательно, $\frac{\tau_D}{\tau_J}$ составляет величину порядка 10^{-3} . Подчеркнем, что с уменьшением расстояния между ступенями отношение $\frac{\tau_D}{\tau_J}$ резко уменьшается. Заметим, что в такой модели вероятность сосуществования трех атомов в потенциальной канаве меньше вероятности сосуществования двух атомов в потенциальной канаве в τ_D/τ_J раз.

Итак, за время роста монослоя в потенциальную канаву между ближайшими изломами выпадет $\frac{L\Lambda}{a^2}$ „первых“ атомов, каждый из которых будет существовать на ступени примерно $\tau_0 \frac{L^2}{a^2}$ секунд. И в течение этого отрезка времени поток атомов $\frac{L\Lambda}{a^2 T_{ml}}$ продолжает приносить атомы в потенциальную канаву между изломами. Следовательно, ситуация, когда в потенциальной канаве между изломами существуют 2 атома одновременно, образуется в среднем

$$N = \left(\frac{L}{a}\right)^4 \left(\frac{\Lambda}{a}\right)^2 \frac{\tau_0}{T_{ml}} \quad (6)$$

раз за время роста монослоя.

Исходя из критериев стабильности роста из работы [3] расстояние между изломами должно составлять величину не более, чем Λ . Тогда, например, при угле разориентации около 2 градусов $\Lambda/a = 30$, $L/a = 30$ и величина N составит 10^{-3} . А именно за время роста монослоя на каждом участке поверхности размером 400×400 постоянных решетки в среднем будет присутствовать одна „двойка“.

4. Количественная оценка

4.1. 1 атом на ступени

Рассмотрим участок края ступени длиной L между двумя изломами, вдоль которого диффундирует адатом. Найдем функцию распределения плотности вероятности координаты x этого адатома в канаве между ближайшими изломами. Запишем непрерывное уравнение диффузии для ступени, имеющей поглощающий край в точке

$x = 0$ и отражающий в точке $x = L$, обозначив точку выпадения атома² как x_0^2 :

$$\frac{\partial f(x, x_0, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(x, x_0, t)}{\partial x^2}. \quad (7)$$

Решая это уравнение методом Фурье и заменив коэффициент диффузии D выражением $\frac{a^2}{2\tau_0}$, получаем искомую функцию:

$$f(x, x_0, t) = \frac{2}{L} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \sin\left(\frac{\pi}{2L}(1+2n)x_0\right) \times \sin\left(\frac{\pi}{2L}(1+2n)x\right) \exp\left(-\frac{\pi^2 a^2}{4L^2}(1+2n)^2 \frac{t}{2\tau_0}\right) \right\}. \quad (8)$$

Для следующего по времени атома вероятность оказаться в потенциальной канаве у края ступени в момент времени t после выпадения первого равна

$$P(t) = J\Lambda t e^{-J\Lambda t} = J\Lambda t e^{-t/\tau_J}.$$

Как следует из формулы (5), интересующие нас события имеют место на характерных временных интервалах масштаба τ_D , которые заметно короче, чем τ_J . Это позволит нам в расчетах считать экспоненту e^{-t/τ_J} близкой к единице и соответственно вероятность выпадения второго атома — линейно зависящей от времени:

$$P(t) \cong J\Lambda t \equiv \frac{L\Lambda t}{T_{ml} a^2},$$

а поток атомов не единицу длины края ступени считать постоянным.

Для того чтобы вычислить темп формирования „двоек“, воспользуемся изложенным выше утверждением о постоянстве потока падающих атомов. Как мы выяснили ранее, этот поток не зависит от времени в течение интересующего нас интервала времени τ_D . При вычислении проведем усреднение по координате x_0 точки выпадения первого атома. В этом случае темп формирования „двоек“ равен

$$P_2(t) dt = \frac{L\Lambda}{T_{ml} a^2} dt \frac{1}{L} \int_0^L \int_0^L f(x, x_0, t) dx_0 dx.$$

Далее, чтобы получить вероятность образования „двойки“, надо полученную функцию проинтегрировать по интервалу времени, превосходящему „время жизни“ τ_D адатома в потенциальной канаве. В качестве верхнего предела можно выбрать бесконечность, поскольку подынтегральная функция (8) экспоненциально убывает на масштабе времени τ_D и значение подынтегрального выражения на верхнем пределе в любом случае стремится к нулю.

² Можно было бы использовать функцию распределения атома для каждой дискретной позиции, но уже при длине ступени $L > 3$ непрерывная функция распределения отлично заменяет дискретную функцию.

В результате получаем, что за время роста монослоя ситуация, ведущая к формированию „двойки“, на ступени в среднем возникает

$$N = \frac{2}{3} \frac{L^4 \Lambda^2}{a^6} \frac{\tau_0}{T_{ml}} \quad (9)$$

раз. Как видим, эта оценка вероятности сосуществования двух атомов в потенциальной канаве отличается множителем $2/3$ от предварительной оценки (формула (6)). Как мы отмечали ранее, нахождение двух атомов в потенциальной канаве является необходимым, но не достаточным условием образования „двойки“. И теперь мы оценим вероятность слипания двух адатомов.

4.2. Слипание атомов на ступени

Уточним оценку темпа образования „двоек“, исследовав процесс их формирования из двух атомов, оказавшихся на ступени. Эта задача с начальными условиями, задающими положения двух атомов. Обозначим координату атома, расположенного ближе к поглощающему краю ступени, как x_1 , а другого — x_2 . Данная исходная ситуация может завершиться одним из двух нижеследующих событий: либо атомы образуют „двойку“, либо ближайший к поглощающему излому атом в него встроится. Мы обозначим вероятность формирования „двойки“ как C_{x_1, x_2} , а вероятность поглощения адатома изломом ступени как Z_{x_1, x_2} .

Строго говоря, существует вероятность появления третьего атома в потенциальной канаве, но эта вероятность меньше вероятности появления двух атомов в $\frac{T_D}{T_I}$ раз (формула (5)), поэтому мы ее исключаем из расчета. Тогда ясно, что $C_{x_1, x_2} + Z_{x_1, x_2} \cong 1$.

Как и в предыдущей оценке, начало координат расположено у поглощающего излома, а отражающий излом имеет координату L . Если бы атомы могли перескакивать один через другой, то было бы просто записать функцию распределения вероятности как произведение одночастичных функций (7):

$$\Phi(x_1^0, x_1, x_2^0, x_2, t) = f(x_1, x_1^0, t) f(x_2, x_2^0, t). \quad (10)$$

Такая запись переводит задачу о двух частицах с одномерными траекториями в задачу об одной частице с двумерной траекторией. В такой трактовке задачи слипание частиц есть касание траектории прямой $x_1 = x_2$. Это и есть еще одно граничное условие для F . Она должна обращаться в нуль на прямой $x_1 = x_2$. Здесь мы заметим, что функция $\Phi(x_1^0, x_1, x_2^0, x_2, t)$ обладает следующими двумя свойствами. Во-первых,

$$\Phi(x_1^0, x, x_2^0, x, t) = \Phi(x_2^0, x, x_1^0, x, t),$$

а во-вторых, $\Phi(x_2^0, x, x_1^0, x, t)$ полностью удовлетворяет граничным условиям, налагаемым и на $\Phi(x_1^0, x_1, x_2^0, x_2, t)$. Следовательно, их линейная комбинация также удовлетворяет тем же самым

граничным условиям. Комбинируя функции $\Phi(x_2^0, x, x_1^0, x, t)$ и $\Phi(x_1^0, x_1, x_2^0, x_2, t)$, запишем функцию для слипающихся атомов в окончательном виде:

$$F(x_1, x_2, t) = f(x_1, x_1^0, t) f(x_2, x_2^0, t) - f(x_2, x_1^0, t) f(x_1, x_2^0, t). \quad (11)$$

Мы видим, что эта функция обращается в нуль при $x_1 = 0$, что соответствует разрушению конфигурации „два атома на ступени“ посредством поглощения первого атома изломом. Обращение функции в нуль на прямой $x_1 = x_2$, естественным образом соответствует образованию „двойки“. А производная, равная нулю на прямой $x_2 = L$, отвечает отражению адатомов от отражающего края ступени. Область определения этой функции распределения представляет собой треугольник.

$$0 \leq x_1 \leq x_2 \leq L. \quad (12)$$

Проинтегрировав $\frac{\partial F}{\partial x_2}$ по прямой $x_1 = 0$ от 0 до L , получим вероятность прекращения существования двух атомов на ступени путем поглощения одного из них изломом. Теперь, чтобы полностью вычислить коэффициент Z_{x_1, x_2} , остается только проинтегрировать выражение

$$\int_0^L \frac{\partial F}{\partial x_2} dx_1$$

по времени существования двух атомов на ступени. Значение C_{x_1, x_2} получается как $1 - Z_{x_1, x_2}$:

$$C_{x_1, x_2} = 1 - \frac{8}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sin\left(\frac{\pi}{2L}(1+2n)x_1\right) \times \sin\left(\frac{\pi}{2L}(1+2k)x_2\right) \frac{1}{(1+2n)^2 + (1+2k)^2} \times \left(\frac{1+2n}{1+2k} - \frac{1+2k}{1+2n}\right).$$

Общий вид C_{x_1, x_2} представлен на рис. 4. Наибольшее значение, равное единице, эта функция принимает при $x_1 = x_2$, так как это соответствует тому, что атом, приходящий с террасы между ступеней в потенциальную канаву, попадает рядом с тем атомом, который уже в этой канаве находится, и „двойка“ образуется со стопроцентной вероятностью. Но очевидно, что атомы будут оказываться в разных начальных точках с разными вероятностями и такую функцию распределения по начальным точкам будем называть P_{x_1, x_2} .

Собственно говоря, 2 атома на поверхности могут в нашей модельной ситуации образоваться единственным способом. Один атом, будем называть его „ранний“, уже находится в потенциальной канаве вблизи края ступени, а другой атом — „поздний“ выпадает в канаву.

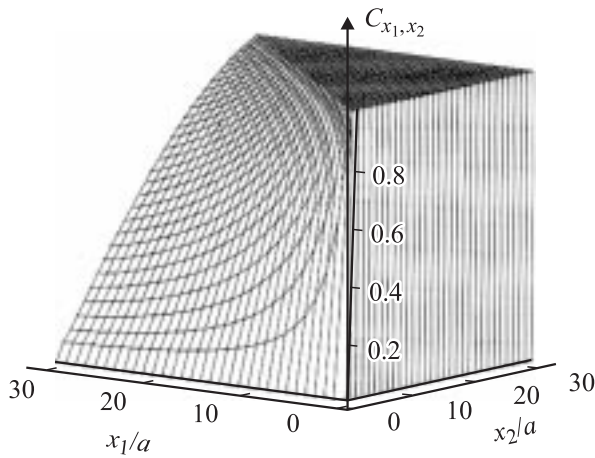


Рис. 4. Вероятность формирования „двойки“ в зависимости от начальных положений двух атомов, C_{x_1, x_2} .

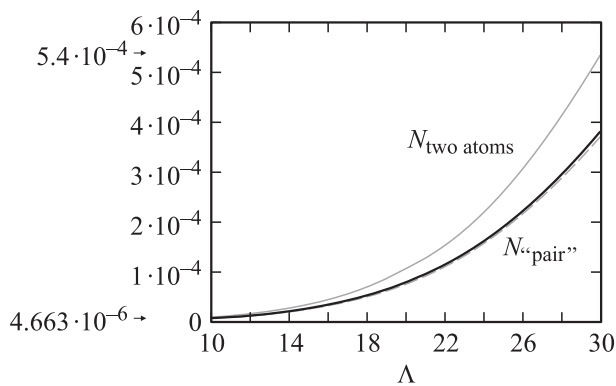


Рис. 5. Вероятность обнаружить два атома в канаве и „двойку“ за время роста одного монослоя при различных расстояниях между ступенями между Λ ближайших изломов.

Как мы помним, функция распределения „раннего“ атома есть не что иное, как одночастичная функция (8) $f(x, x_0, t)$, и, следовательно, вероятность того, что в момент выпадения „позднего“ атома координаты атомов на поверхности будут x_1 и x_2 , составляет

$$P(x_1, x_2, t)dt = \frac{\Lambda}{a^2 T_{ml}} \frac{dt}{L} \int_0^L f(x_1, x_0, t) dx_0 + \frac{\Lambda}{a^2 T_{ml}} \frac{dt}{L} \int_0^L f(x_2, x_0, t) dx_0. \quad (13)$$

Проинтегрировав по времени (13), получаем искомое распределение вероятности возникновения двух атомов с координатами x_1 и x_2 в потенциальной канаве у края ступени:

$$P_{x_1 x_2} = \frac{2L\Lambda}{a^4} \frac{\tau_0}{T_{ml}} \left(2 - \left(1 - \frac{x_1}{L}\right)^2 - \left(1 - \frac{x_2}{L}\right)^2 \right). \quad (14)$$

Видно, что вероятность сосуществования двух атомов в канаве у края ступени тем больше, чем ближе эти атомы

к отражающему краю. Это понятно, поскольку вероятность пребывания адатома в канаве вблизи отражающего края ступени выше, чем у отражающего края.

Если теперь $P_{x_1 x_2}$ проинтегрировать по x_1 и по x_2 по области определения (12) и умножить на количество выпавших за время роста монослоя „ранних“ атомов $\frac{L\Lambda}{a^2}$, то получится в точности результат из диффузионной оценки (формула (9)).

Для того, чтобы узнать число „двоек“ N , которое в среднем может образоваться между ближайшими изломами в течение времени роста монослоя, проинтегрируем произведение вероятности образования „двойки“ из заданного исходного положения адатомов $C_{x_1 x_2}$ на вероятность реализации такого исходного положения $P_{x_1 x_2}$ по всем возможным исходным положениям x_1 и x_2 .

$$N(L, \Lambda) = \frac{L\Lambda}{a^2} \int_0^L \int_{x_1}^L C_{x_1 x_2} P_{x_1 x_2} dx_1 dx_2.$$

На рис. 5 представлены результаты оценок возникновения двух атомов на ступени и вероятности образования „двоек“. Тот факт, что расчетная вероятность нахождения двух атомов в потенциальной канаве и вероятность образования „двойки“ отличаются менее чем на 25%, объясняется тем, что „двойки“, вероятнее всего, образуются при условии, что оба атома выпали вблизи отражающего края ступени и, как следствие, находились близко один от другого. И, как было показано, вероятность атомов образовать „двойки“ также высока, когда они оказываются близко. Таким образом, мы видим, что идея, лежащая в основе качественной оценки, верна и строгий учет слипания атомов не приводит к изменению характера зависимости.

5. Заключение

Диффузия вдоль края ступени приводит к тому, что адатом заметное время обитает в потенциальной канаве вблизи края ступени, не встраиваясь в излом, и результатом этого становится образование „двойки“. Более того, образование „двойки“ в моделях с диффузией вдоль края ступени неизбежно как таковое, вопрос только во временном факторе.

В этой работе мы полагаем, что „двойка“ не может разрушаться. Если бы „двойка“ могла разрушаться, то это бы не вело к снижению их количества на поверхности, так как это бы увеличивало „время“ свободной диффузии атома в потенциальной канаве у края ступени. В свою очередь это бы увеличивало вероятность образования „двойки“, поскольку в потенциальной канаве у края ступени оказывались бы атомы, образованные разрушением „двойки“, а не принесенные потоком. А возможность атомов отрываться от излома приводит к увеличению количества атомов, которые находятся у краев ступени и могут образовать „двойку“.

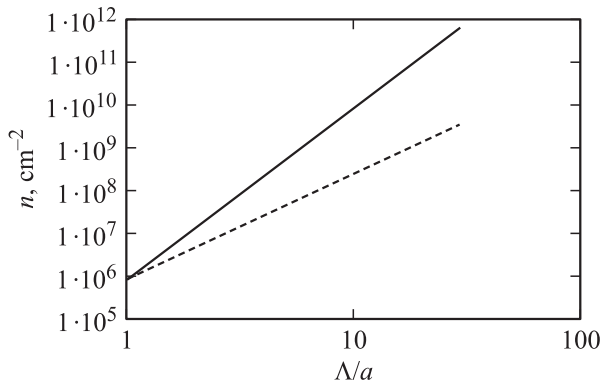


Рис. 6. Зависимость концентрации „двоек“ от расстояния между ступенями Λ при постоянной решетке 3 \AA .

Мы продемонстрировали, что можно уменьшать вероятность образования „двоек“, уменьшая как расстояния между ступенями и изломами, так и уменьшая скорость роста. Но уж коль скоро двойка возникла, то высота изгиба ступени и длина основания, образовавшегося за время, пока заполняется один ряд атомов между „двойкой“ и поглощающим изломом, зависят только от расстояния между изломами и ступенями, а от потока не зависят. Длина основания изгиба составит

$$l = L \ln \left(\frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{a} + 1 \right) - \frac{(x_{\text{left}}^0 - x_1^0 + a)}{2} + a. \quad (15)$$

Если предположить, что форма изгиба близка к треугольной, то его высоту можно оценить, разделив (3) на (15) и умножив на a^2 .

$$h = \frac{aL \left[\ln \left(\frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{a} + 1 \right) \right]^2 + a(x_{\text{left}}^0 - x_1^0) \times \left(1 - \ln \left(\frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{a} + 1 \right) \right) + a \ln \left(\frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{a} + 1 \right)}{L \ln \left(\frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{a} + 1 \right) - \frac{(x_{\text{left}}^0 - x_1^0 + a)}{2} + a}.$$

При расстоянии между изначальным положением „двойки“ и поглощающим изломом $(x_{\text{left}}^2 - x_1^0)$ всего в 8 постоянных решетки, высота изгиба составит уже 2 постоянные решетки, а такой изгиб представляет собой уже настоящий дефект растущей поверхности. При больших L величину h можно оценить как

$$h \cong a \ln \left(\frac{x_{\text{left}}^0 - x_1^0}{2} + 1 \right).$$

Как следует из условий стабильности роста поверхности в режиме *kink-flow*, описанных в [3], расстояния между изломами L и расстояние между ступенями Λ связаны определенными соотношениями. Во-первых, L не может быть меньше $\sqrt{a\Lambda}$, но и не может быть больше самой Λ . Это означает, что в среднем может

реализоваться минимальное количество „двоек“ между двумя соседними изломами

$$N_{\text{min}} = \frac{2}{3} \left(\frac{\Lambda}{a} \right)^4 \frac{\tau_0}{T_{ml}} \quad (16)$$

и максимальное

$$N_{\text{max}} = \frac{2}{3} \left(\frac{\Lambda}{a} \right)^6 \frac{\tau_0}{T_{ml}}. \quad (17)$$

Но поскольку в первом случае изломы расположены плотнее в $\sqrt{\Lambda/a}$ раз, для того чтобы оценивать количество „двоек“ на одинаковой площади, умножим N_{min} на $\sqrt{a\Lambda}$. В таком случае за время роста монослоя на площади размерами $\Lambda \times \Lambda$ количество „двоек“ заключено в пределах

$$\frac{2}{3} \left(\frac{\Lambda}{a} \right)^{\frac{9}{2}} \frac{\tau_0}{T_{ml}} < N < \frac{2}{3} \left(\frac{\Lambda}{a} \right)^6 \frac{\tau_0}{T_{ml}}.$$

А средняя концентрация „двоек“ n на поверхности будет заключена в пределах

$$\frac{2}{3} \frac{1}{a^2} \left(\frac{\Lambda}{a} \right)^{\frac{5}{2}} \frac{\tau_0}{T_{ml}} < n < \frac{2}{3} \frac{1}{a^2} \left(\frac{\Lambda}{a} \right)^4 \frac{\tau_0}{T_{ml}}.$$

При угле разориентации около 2 градусов и постоянной решетке в 3 \AA концентрация дефектов, возникших в процессе роста одного монослоя, составит от $3 \cdot 10^9$ до $6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, а при угле разориентации около 6 градусов такая концентрация составит от $2 \cdot 10^8$ до $7 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$. Видно, что уменьшение расстояния между ступенями всего в 3 раза уменьшает концентрацию „двоек“ на 2 порядка.

Зависимость концентрации дефектов от Λ представлена на рис. 6. Видно, что с ростом угла разориентации количество дефектов падает, но увеличение угла ведет к уменьшению L и Λ .

Работа была выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант РФФИ-05-02-16679, и программы поддержки ведущих научных школ.

Список литературы

- [1] Y. Tokura, H. Saito, T. Fukui. *J. Cryst. Growth*, **94**, 46 (1989).
- [2] G.S. Bales, A. Zangwill. *Phys. Rev. B*, **41**, 5500 (1990).
- [3] И.Л. Алейнер, Р.А. Сурис. *ФТТ*, **34**, 1522 (1992).
- [4] O. Pierre-Louis, M.R. D'Orsogna, T.L. Einstein. *Phys. Rev. B*, **82** (18), 3661 (1999).
- [5] N.C. Bartelt, T.L. Einstein, Ellen D. Williams. *Surf. Sci. Lett.*, **240**, L591 (1990).
- [6] H. Emmerich. *Phys. Rev. B*, **65**, 233 406 (2002).
- [7] В.В. Воронков. *Кристаллография*, **15**, 13 (1970).
- [8] В.П. Евтихийев, В.Е. Токранов, А.К. Крыжановский, А.М. Бойко, Р.А. Сурис, А.Н. Титков, А. Накамура, М. Ичида. *ФТП*, **32** (7), 1323 (1998).

- [9] V.P. Evtikhiev, V.E. Tokranov, A.K. Kryganovskii, A.M. Boiko, R.A. Suris, A.N. Titkov. *J. Cryst. Growth*, **201/202**, 1154 (1999).
- [10] V.P. Evtikhiev, A.M. Boiko, I.V. Kudryashov, R.A. Suris, A.N. Titkov, V.E. Tokranov. *Solid-State Technol.*, **17**, 545 (2002).
- [11] W. Burton, N. Cabrera, F. Frank. *Phil. Trans. A*, **243**, 299 (1951).

Редактор Л.В. Беляков

The role of one dimension diffusion in the growth model of the surface of Cossel crystal

A.M. Boiko, R.A. Suris

Ioffe Physicotechnical Institute
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract We have studied a kinetic mechanism of defect formation on a vicinal surface in two direction during epitaxial growth. These defects consist of two adatoms stuck together in the potential trench near the step edge. We study the effect of the surface parameters and growth rate on the defect formation rate. We show that have the increase of surface slope angle reduce drastically the number of defects arising during the growth.