Письма в ЖЭТФ, том 47, вып. 8, стр. 396 – 399 *25 апреля 1988 г.*

О ФОРМИРОВАНИИ МАКРОСТУПЕНЕЙ НА ВИЦИНАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ В ПРОЦЕССЕ РОСТА КРИСТАЛЛА

В.Г.Барьяхтар, А.Е.Боровик, Ю.С.Кагановский

Исследована эволюция макрорельефа вицинальной поверхности растущего (испаряющегося) кристалла. Получено уравнение, описывающее формирование и распад макроступеней как результат нелинейных эффектов диффузионного взаимодействия движущихся элементарных ступеней. Показано, что в зависимости от величины пересыщения полученное уравнение можно свести либо к уравнению Бюргерса, либо к уравнению Кортевега – де Фриза. Проанализированы частные точные решения этих уравнений наиболее интересные для приложений.

1. Экспериментально установлено, что при определенных условиях роста (испарения) кристалла на вицинальных термодинамически стабильных поверхностях формируется характерный ступенчатый рельеф [1, 2]. Анализ показал, что наблюдаемое образование макроступеней может являться результатом возникновения ударных волн плотности движущихся элементарных ступеней [3].

Настоящая работа посвящена исследованию нелинейных эффектов при диффузионном взаимодействии движущихся элементарных ступеней на вицинальной поверхности с целью последовательного описания морфологии формирующихся макроступеней в зависимости от внешних параметров.

2. Рассмотрим термодинамически стабильную вицинальную поверхность типа $(1K0)$, отклоненную на некоторой малый угол θ_0 от плотноупакованной сингулярной плоскости. Если бы такая поверхность была макроскопически идеально плоской, она состояла бы из элементарных ступеней высотой a, разделенных террасами равной длины $l_0 \approx a/\theta_0$, т. е. представляла бы собой эквидистантный эшелон параллельных элементарных ступеней с плотностью $\rho_0 = l_0^{-1}$. Реальная поверхность отличается от идеальной тем, что на ней имеются макроскопические неровности, т. е. локальная плотность ступеней $\rho(X)$ колеблется вблизи среднего значения ρ_0 [1)].

В условиях роста кристалла каждая из элементарных ступеней перемещается со скоростью определяемой диффузионными потоками адатомов из прилегающих к ней террас:

$$v_i = D_a \left(\frac{\partial \xi_i}{\partial x}\bigg|_{+0} - \frac{\partial \xi_i}{\partial x}\bigg|_{-0} \right), \tag{1}$$

где D_a – коэффициент самодиффузии адатомов, $\xi_i(x)$ – распределение концентрации адатомов на i -й террасе, которое определяется из уравнения [3]:

$$\lambda_s^2 \frac{\partial^2 \xi_i}{\partial x^2} - (\xi_i - \xi_\text{п}) = 0 \tag{2}$$

с граничными условиями

$$\xi_i \big|_{x=0} = \xi_i^0; \qquad \xi_i \big|_{x=l_i} = \xi_{i+1}^0 \equiv \xi_i^0 + \Delta, \tag{3}$$

---

1) Мы используем два характерных масштаба: макромасштаб X, на элементе длины которого δX содержится некоторое число элементарных ступеней $\delta n = \rho\,\delta X$ и микромасштаб x, элемент длины которого δx значительно меньше длины ступени.

где $\lambda_s = (D_a \tau_a)^{1/2}$ – средняя длина диффузионного пути адатома за время его жизни τ_a на поверхности, $\xi_п$ – концентрация адатомов, находящаяся в равновесии с пересыщенным паром, окружающим кристалл. В (3) феноменологически учтена зависимость равновесной концентрации адатомов ξ^0 от кривизны $K = a(\partial \rho / \partial X)$:

$$\xi^0(K) = \xi_0 (1 + K\gamma\omega / kT),$$

где γ – поверхностное натяжение, ω – атомный объем, ξ_0 – равновесная концентрация адатомов на идеально плоской поверхности. Величина добавки Δ к равновесной концентрации адатомов в расчете на одну террасу

$$\Delta = \frac{\delta\xi^0}{\delta X}\, l = \frac{\alpha}{\rho}\, \frac{\partial^2 \rho}{\partial X^2}, \tag{4}$$

где $\alpha = \gamma\omega a \xi_0 / kT$.

Вычисляя v_i из (1) и (2) с учетом (3) и (4) и переходя к безразмерной плотности ступеней $\eta(X) = \lambda_s [\rho(X) - \rho_0]$ (в предположении $|\eta| \ll \lambda_s \rho_0$), из уравнения непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial X}(\rho v) = 0$$

получаем уравнение, описывающее эволюцию эшелона ступеней переменной плотности:

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} - u_0 \frac{\partial \eta}{\partial Y} - B\eta \frac{\partial \eta}{\partial Y} - \kappa \frac{\partial^2 \eta}{\partial Y^2} + C \frac{\partial^3 \eta}{\partial Y^3} = 0, \tag{5}$$

где $\tau = v_0 t / \lambda_s$ – безразмерное время, $v_0 = 2D_a \xi_0 / \lambda_s$ – нормированная скорость движения изолированной элементарной ступени, $Y = X/\lambda_s$ – безразмерная координата, $u_0 = \epsilon_0^3 \sigma_п / 3$, $\sigma_п$ – пересыщение в паровой фазе, $\epsilon_0 = 1/2\lambda_s \rho_0$ – средняя безразмерная длина террасы, $B = 4\epsilon_0^2 \sigma_п$, $\kappa = \epsilon_0^2 \sigma_п + C$, $C = \gamma\omega a / 2kT\lambda_s^2$. Таким образом, задачу в микромасштабе о диффузии адатомов по террасам, мы свели в макромасштабе к задаче об эволюции плотности ступеней.

Качественная картина явлений зависит от конкуренции нелинейных эффектов, определяемых третьим членом в (5), с диссипативными эффектами (четвертый член) или дисперсионными эффектами (последний член).

3. Поскольку коэффициент κ в (5) содержит два слагаемых, ясно, что если пересыщение в паре $\sigma_п$ достаточно велико

$$\sigma_п \gg \gamma\omega a \rho_0^2 / kT, \tag{6}$$

мы приходим к известному уравнению Бюргерса [4]

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} - u_0 \frac{\partial \eta}{\partial Y} - B\eta \frac{\partial \eta}{\partial Y} - \kappa \frac{\partial^2 \eta}{\partial Y^2} = 0, \tag{7}$$

для которого можно получить точные выражения для эволюции широкого класса начальных условий $\eta(Y, \tau = 0) \equiv f(Y)$. Остановимся на интерпретации лишь двух решений, которые нам представляются наиболее интересными.

А. При начальном условии $f(Y) = m\delta(Y)$, которое определяет наличие на рассматриваемой вицинальной поверхности макроступени высотой в m элементарных ступеней, решение уравнения Бюргерса имеет вид треугольной волны (рис. 1). Она движется со скоростью $V = (2m\tau)^{1/2}$ относительно эшелона в направлении, противоположном направлению движения ступеней. Эволюция исходной макроступени в процессе роста происходит так, что распределение плотности ступеней остается неизменным в координатах, представленных на рис. 1.

Это означает, что ступень, двигаясь со скоростью V, медленно (пропорционально $\tau^{1/2}$) "размывается" со временем.

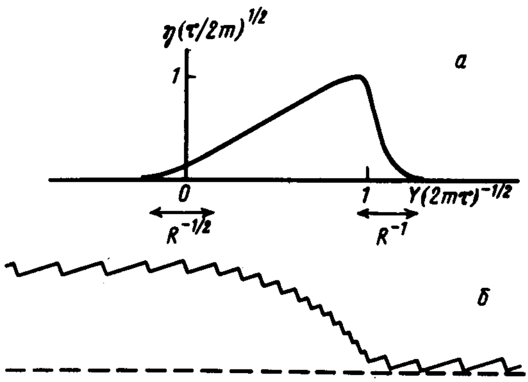

Рис. 1

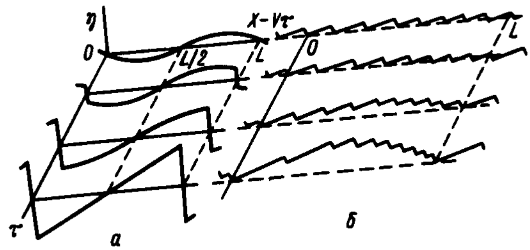

Рис. 2

Рис. 1. Распределение плотности элементарных ступеней *(а)* и нормализованный профиль макроступени *(б)*. $R = Bm/2\kappa$ — число Рейнольдса

Рис. 2. Возникновение разрыва плотности элементарных ступеней *(а)* и профиль поверхности кристалла *(б)* в случае периодических начальных условий

Б. В случае периодического начального условия $f(Y) = \eta_0 \sin(2\pi Y/L)$ в результате эволюции $\eta(Y, \tau)$ мы получаем волны пилообразной формы (рис. 2) с изменяющейся со временем амплитудой разрыва $\Delta\eta$. Это означает, что на практически гладкой в исходном состоянии поверхности возникают макроступени. Разрыв плотности элементарных ступеней возникает в момент времени $\tau_1 = L/2\pi\eta_0$, и высота его $\Delta\eta$ растет со временем, достигает максимального значения при $\tau_2 = L/4\eta_0$, а затем затухает, так что $\Delta\eta \approx L/\tau$.

Если $\sigma_{\text{п}} \ll 2\gamma a \rho_0^2 / kT$, эволюция рельефа определяется конкуренцией нелинейных эффектов с диссипативными и дисперсионными процессами, связанными только с капиллярными силами. При этом эволюция возмущения с характерной длиной $\lambda \gg \lambda_s$ по-прежнему описывается уравнением Бюргерса, если же $\lambda \ll \lambda_s$, то мы приходим к уравнению Кортевега – де Фриза

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} - u_0 \frac{\partial \eta}{\partial Y} - B\eta \frac{\partial \eta}{\partial Y} + C \frac{\partial^3 \eta}{\partial Y^3} = 0. \qquad (8)$$

Качественная структура явлений в этом случае становится иной. Эволюция локализованных в пространстве начальных условий можно описать посредством набора решений типа уединенных волн, представляющих собой область возмущений, движущуюся вдоль поверхности кристалла:

$$\eta(Y, \tau) = \frac{3V/B}{\mathrm{ch}^2\{(V/C)^{1/2}(Y + V\tau + u_0\tau)\}}. \qquad (9)$$

В отличие от предыдущего случая, и форма возмущения, и скорость V его распространения не затухает со временем.

Литература

1. *Гегузин Я.Е., Овчаренко Н.Н.* УФН, 1962, 76, 283.
2. *Кагановский Ю.С., Грищенко В.В., Зикерт Й.* Кристаллография, 1983, 28, 546.

3. *Чернов А.А* УФН, 1961, **73**, 277.

4. *Уизем Дж.* Линейные и нелинейные волны. М.: Мир, 1977, с. 622.

Институт металлофизики
Академии наук Украинской ССР

Харьковский государственный университет
им. А.М.Горького

Поступила в редакцию
11 марта 1988 г.