

УДК 548.25

© 1993

## ФЛУКТУАЦИИ РЕШЕТКИ ИЗЛОМОВ ПРИ РОСТЕ ВИЦИНАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ В РЕЖИМЕ «KINK FLOW»

И. Л. Алейнер<sup>1</sup>

Теоретически изложен рост вицинальной поверхности в режиме с неизменным количеством ступеней и изломов («kink flow»). При этом рост кристалла происходит за счет движения решетки изломов по его поверхности. Изучены флуктуации такой решетки в случае, если система стабильна; получен нижний теоретический предел для их дисперсии.

Использование вицинальных поверхностей при выращивании кристаллов методом молекулярной эпитаксии вызывает в последнее время значительный интерес. Это связано, в частности, с появлением возможности избежать неконтролируемого образования источников нового слоя.

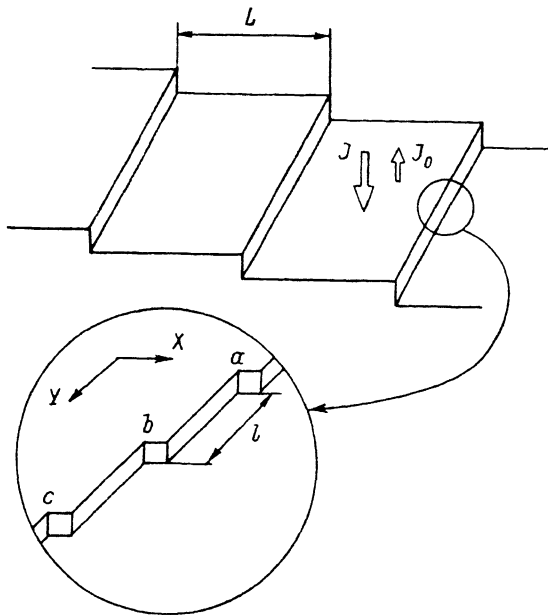
При этом, если поверхность имеет индексы  $(\nu_x, 0, \nu_z)$ ,  $\nu_z \gg \nu_x$ , то возможен режим, при котором рост осуществляется путем движения ступеней атомной высоты по поверхности кристалла [1]. Такой режим носит название «step flow». В работе [2] был теоретически изучен еще один мыслимый режим роста вицинальной поверхности — «kink flow». Этот режим роста возможен для поверхности  $(\nu_x, \nu_y, \nu_z)$ , причем  $\nu_y \ll \nu_x \ll \nu_z$ . Такая поверхность представляет собой атомно-гладкие участки поверхности (001) — террасы, разделенные ступенями, направленными параллельно  $[\nu_x, \nu_y, 0]$  и расположенными на расстоянии  $L = a\nu_z / (\nu_x^2 + \nu_y^2)^{1/2}$  ( $a$  — постоянная решетки кристалла) друг от друга (см. рисунок). Ступени же состоят из отрезков атомно-гладкой ступени [100] длиной  $l = a\nu_x / \nu_y$ , разделенных изломами (см. рисунок). Рост кристалла происходит путем захвата атома из газовой фазы на террасу, диффузионного блуждания по ней с последующим встраиванием в излом на ступени. Излом при этом сдвигается на одну постоянную решетки. Таким образом, рост кристалла происходит за счет движения решетки изломов по его поверхности, что и соответствует режиму «kink flow».

Изломы в силу случайного характера встраивания в них атомов (и выброса их), естественно, флуктуируют относительно их идеального периодического расположения. Устойчивость системы по отношению к таким флуктуациям была подробно рассмотрена в [2]. Были исследованы противодействующие друг другу механизмы, главный из которых связан с взаимовлиянием изломов через перераспределение диффузионных потоков, и теоретически предсказаны режимы роста, при которых система стабильна. Существенным оказалось, что стабилизация имеет в основном кинетическую природу, т. е. декремент затухания флуктуации возрастает с увеличением скорости роста.

<sup>1</sup> Институт теоретической физики университета Миннесоты, Миннеаполис, США, а также ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург.

Схематическое изображение растущей вицинальной поверхности.

Согласно [2], при диффузии вдоль ступени, ограниченной изломами  $a$  и  $b$  (вставка), он может встраиваться только в излом типа «а». 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  $a$ — $b$  необходим переход на террасу и диффузия по ней к канаве  $b$ — $c$ ). Эта асимметрия приводит к кинетической стабильности по отношению к изменению расстояния между изломами.



В этой работе проанализирована корреляционная функция расположения узлов устойчивой решетки изломов. Мы увидим, что случайные силы, действующие на излом, состоят из двух независимых частей.

Первая часть: «генерационно-рекомбинационный шум» обусловлен приходом атомов из газовой фазы и встраиванием их в излом («рекомбинация»), а также переходом атомов из излома на террасу с последующим переходом в газовую фазу («генерация»). Понятно, что генерационно-рекомбинационные случайные силы, действующие на различные изломы, некоррелированы между собой.

Вторая часть: «тепловые» случайные силы связаны с отрывом атома от излома, диффузионного блуждания по террасе и со встраиванием в другой излом. Ввиду зависимости вероятности обмена атомами изломов от расстояния между последними эти случайные силы коррелированы для разных изломов.

Если кристалл находится в состоянии термодинамического равновесия с газовой фазой, случайные силы приводят к термодинамически равновесному расположению изломов на ступени.

Существенно, что рекомбинационный шум возрастает при увеличении скорости роста, в то время как остальные случайные силы от нее не зависят. Из этого сделан вывод о том, что скорость роста разумно увеличивать лишь до тех пор, пока рекомбинационный шум не сравнится с термодинамическим. Дальнейшее увеличение скорости роста не имеет смысла, поскольку возрастание декремента затухания флуктуации компенсируется ростом рекомбинационного шума и флуктуации перестают уменьшаться при увеличении пересыщения.

Статья организована следующим образом. В разделе 1 сформулированы общие соотношения, вероятностным образом описывающие эволюцию системы изломов. Введено понятие характеристического функционала системы изломов, его гауссовой аппроксимации, получены соответствующие ей уравнения Ланжевена. В разделе 2 приводится последовательная процедура нахождения характеристического функционала. В разделе 3 приведены результаты расчета для модели роста вицинальной поверхности, сформулированной в [2].

## 1. Вероятностное описание системы изломов

Вicinaльная поверхность однозначно описывается радиус-векторами изломов  $\vec{r}_{\text{kin},n}^m$ , где целое число  $m$  нумерует ступень, а  $n$ -излом на ступени. Примем направление осей  $X$  и  $Y$  вдоль направлений  $[010]$  и  $[100]$  соответственно (см. рисунок). Тогда положение излома можно записать как

$$\Gamma_{\text{кин}_n}^m = (mL - na) \mathbf{e}_x + y_n^m(t) \mathbf{e}_y, \quad (1)$$

где  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$  — орты соответствующих осей;  $L$  — расстояние между ступенями;  $a$  — постоянная решетки кристалла. Случайные функции  $y_n^m(t)$  характеризуют конфигурацию изломов на ступени и принимают значения, кратные постоянной решетки кристалла.<sup>2</sup>

Пусть в момент времени  $t_0$  система имеет конфигурацию  $\{y(t_0)\}$  (фигурные скобки означают, что рассматриваются положения всех изломов на поверхности). Рассмотрим случайные функции  $\{\dot{y}(t)\}$  на интервале времени  $[t_0, t_0 + \delta t]$ . Величина  $\delta t$  должна быть выбрана так, что

$$\frac{\max(L^2, l^2)}{D} \ll \delta t \ll \tau_s \min\left(\frac{a}{L}, \frac{a}{l}\right), \quad (2)$$

где  $l$  — среднее расстояние между изломами на одной ступени,  $D$  — коэффициент диффузии атомов по террасам,  $\tau_s$  — время роста одного монослоя. Левая часть неравенства (2) есть характерное время, за которое атом, диффундирующий по террасе, захватится на излом. Рассмотрение интервалов, много больших этой величины, позволяет не учитывать атомы, находящиеся на террасе к моменту времени  $t_0$ , и принимать во внимание только атомы, появившиеся на террасе в течение рассматриваемого промежутка, а также считать диффузию бесконечно быстрым процессом. Правая часть (2) — время, за которое положение излома изменится на расстояние  $\delta l \sim \min(L, l)^2$ , что вызовет существенное изменение диффузионных траекторий. Выполнение правой части неравенства (2) позволяет рассматривать функции  $\{y(t)\}$  при постоянной конфигурации изломов  $\{y(t_0)\}$ . Выполнение (2) возможно при не очень больших скоростях роста, так что применимо квазистационарное приближение.

Определим характеристический функционал  $\Phi[\{k(t)\}]$ , заданный на семействе интегрируемых на  $[t_0, t_0 + \delta t]$  функций  $\{k(t)\}$  как (см. [3])

$$\Phi[\{k(t)\}] = \langle \exp \left( i \sum_{mn} \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} dt k_n^m(t) \dot{y}_n^m(t) \right) \rangle, \quad (3)$$

где суммирование производится по всем изломам, а  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по всем траекториям  $\{\dot{y}(t)\}$ , причем в силу условия (2) оно ведется при постоянной конфигурации  $\{y(t_0)\}$ .

Гауссова аппроксимация характеристического функционала (3) имеет вид<sup>3</sup>

$$\Phi[\{k(t)\}] \approx \exp \left( i \sum_{mn} B_n^m \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} k_n^m(t) dt - \frac{1}{2} \sum_{\substack{mn \\ m'n'}} \mathcal{K}_{nn'}^{m'm'} \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} k_n^m(t) k_{n'}^{m'}(t) dt \right), \quad (4)$$

где  $B_n^m$  и  $\mathcal{K}_{nn'}^{m'm'}$  — функции только от расположения изломов в момент времени  $t_0$ . Их явной зависимостью от времени можно пренебречь в силу условия (2). По этой же причине можно пренебречь временными корреляциями во втором

<sup>2</sup> Здесь следует заметить, что изломы на одной ступени не могут проходить друг через друга, т. е.  $y_n^m(t) \leq y_{n+1}^m(t)$ . То же относится и к ступеням. Поскольку вся дальнейшая теория строится в линейном приближении для малых флуктуаций, ниже этого условие не будет учитываться.

<sup>3</sup> В гауссовом приближении дискретность значений  $y_n^m$  несущественна.

слагаемом. Линейное по  $k_n^m$  слагаемое характеризует среднее значение функции  $y_n^m(t)$ , а квадратичное — ее дисперсию. Такому характеристическому функционалу (4) соответствуют уравнения Ланжевена вида

$$\frac{\partial}{\partial t} y_n^m(t) = B_n^m(\{y(t)\}) + F_n^m(t, \{y(t)\}), \quad (5)$$

где  $F$  — случайные силы с коррелятором

$$\langle F_n^m(t) F_{n'}^{m'}(t') \rangle = \delta(t - t') \mathcal{R}_{nn'}^{mm'}(\{y(t)\}). \quad (6)$$

Линеаризуем уравнения (5), (6), положив

$$y_n^m(t) = y_n^{(0)m}(t) + \xi_n^m(t), \quad (7)$$

где

$$y_n^{(0)m}(t) = l \left( n + \frac{t}{\tau_s} \frac{L}{a} \right) \quad (8)$$

описывает движение периодической решетки изломов как целого при росте кристалла, а  $\xi_n^m(t)$  — флуктуации изломов относительно их периодического расположения. Подстановка (8) в (5) дает выражение для  $\tau_s$ , а при подстановке (7) в (5) в первом по  $\xi$  приближении получим

$$\tau_s \frac{\partial}{\partial t} \xi_n^m(t) = \sum_{m'a'} \Lambda_{n-n'}^{m-m'} \xi_{n'}^{m'}(t) + f_n^m(t), \quad (9)$$

где

$$\Lambda_{n-n'}^{m-m'} = \tau_s \frac{\partial}{\partial y_n^m} B_n^m(\{y^{(0)}(t)\}) \quad (10)$$

описывает взаимодействие за счет перераспределения диффузионных потоков и соответствует оператору, рассмотренному в [2]; случайные же силы  $f$  имеют коррелятор

$$\langle f_n^m(t) f_{n'}^{m'}(t') \rangle = \delta(t - t') K_{n-n'}^{m-m'}, \quad (11)$$

где

$$K_{n-n'}^{m-m'} = \tau_s^2 \mathcal{R}_{nn'}^{mm'}(\{y^{(0)}(t)\}). \quad (12)$$

При выводе (10), (12) учтена трансляционная инвариантность периодической решетки изломов, используемой как нулевое приближение.

Выражение для коррелятора положений изломов  $\mathcal{R}$ , определяемого как

$$\mathcal{R}_{n-n'}^{m-m'}(t - t') \equiv \langle (\xi_n^m(t) - \xi_{n'}^{m'}(t'))^2 \rangle, \quad (13)$$

имеет вид

$$\mathcal{S}_n^{Tn}(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq_x dq_y}{(2\pi)^2} \frac{1 - \exp(iq_x m + iq_y n) \exp(-\lambda(q_x, q_y) t / \tau_s)}{-\tau_s \operatorname{Re} \lambda(q_x, q_y)} \times \\ \times \kappa(q_x, q_y), \quad (t > 0), \quad (14)$$

где

$$\lambda(q_x, q_y) = \sum_{mn} \Lambda_n^m \exp(-iq_x m - iq_y n), \\ \kappa(q_x, q_y) = \sum_{mn} K_n^m \exp(-iq_x m - iq_y n).$$

При  $t < 0$  в (14) надо заменить  $t \rightarrow -t$ ,  $\lambda \rightarrow \lambda^*$ .

Важно подчеркнуть, что формула (14) имеет смысл лишь для устойчивого кристалла, что эквивалентно условию  $\operatorname{Re} \lambda(q_x, q_y) < 0$  для  $q_x, q_y \neq 0$ .

## 2. Получение характеристического функционала

Диффундирующий по поверхности атом может появиться на ней либо за счет отрыва от излома, либо за счет прихода из газовой фазы. При присоединении атома к излому последний сдвигается в направлении [100] (см. рисунок) и в противоположном направлении — при отрыве от него атома. Для скорости продвижения излома  $n$ ,  $m$  имеем

$$\frac{1}{a} \dot{j}_n^m(t) = \sum_{j=1}^{N^{(T)}} (\delta(t - t_c^j(m, n)) - \delta(t - t_{\text{off}}^j(m, n))) + \sum_{j=N^{(T)}+1}^{N^{(T)}+N^{(g)}} \delta(t - t_c^j(m, n)), \quad (15)$$

где  $t_c^j(m, n)$  — момент присоединения  $j$ -го атома к излому  $m, n$ ;  $t_{\text{off}}^j(m, n)$  — момент отрыва того атома от того же излома;  $N^{(T)}, N^{(g)}$  — полное число атомов, оторвавшихся с изломов и пришедших из газовой фазы в течение интервала времени  $[t_0, t_0 + \delta t]$  соответственно. Времена  $t_c^j(m, n)$ ,  $t_{\text{off}}^j(m, n)$  могут и не принадлежать рассматриваемому интервалу времен — это означает, что  $j$ -й атом не взаимодействовал соответствующим образом с рассматриваемым изломом.

Подставляя (15) в (3) и учитывая отсутствие корреляции между разными атомами при их поверхностной диффузии, получим характеристический функционал при фиксированном числе атомов, участвующих в процессе

$$\Phi[\{k(t)\}]_{N_k, N_g} = \left( \left\langle \exp \left( i \sum_{mn} \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} dt k_n^m(t) \delta(t - t_c^g(m, n)) \right) \right\rangle \right)^{N^{(g)}} \times \\ \times \left( \left\langle \exp \left( i \sum_{mn} \int_{t_0}^{t_0 + \delta t} dt k_n^m(t) (\delta(t - t_c^T(m, n)) - \delta(t - t_{\text{off}}^T(m, n))) \right) \right\rangle \right)^{N^{(T)}}, \quad (16)$$

где индекс  $(g)$  означает, что величина относится к одному атому, пришедшему из газовой фазы, а индекс  $(T)$  — к оторвавшемуся от излома. В первом множителе в (16) усреднение следует производить по диффузионным траекториям одного атома, пришедшего из газовой фазы, и по пространственно-временным координатам начал таких траекторий. Во втором множителе усреднение производится

сначала по диффузионным траекториям, а потом по начальному и конечному изломам и временам отрыва и встраивания.

Усредняя (16) по количеству атомов с использованием распределения Пуассона

$$W(N^{(T)}) = \frac{\bar{N}^{(T)N^{(T)}}}{N^{(T)}!} \exp(-\bar{N}^{(T)}),$$

$$W(N^{(g)}) = \frac{\bar{N}^{(g)N^{(g)}}}{N^{(g)}!} \exp(-\bar{N}^{(g)}),$$

получим

$$\Phi[\{k(t)\}] = \exp\left(-\bar{N}^{(g)} \left\langle 1 - \exp\left(i \sum_{mn} \int_{t_0}^{t_0+\delta t} dt k_n^m(t) \delta(t - t_c^g(m, n))\right)\right\rangle\right) \times \\ \times \exp\left(-\bar{N}^{(T)} \left\langle 1 - \exp\left(i \sum_{mn} \int_{t_0}^{t_0+\delta t} dt k_n^m(t) (\delta(t - t_c^k(m, n)) - \delta(t - t_{off}^k(m, n)))\right)\right\rangle\right). \quad (17)$$

Среднее от полного числа атомов, оторвавшихся от изломов  $\bar{N}^{(T)}$  и пришедших из газовой фазы  $\bar{N}^{(g)}$ , вычисляется как

$$\bar{N}^{(g)} = Ja^2 \delta t N_{cr},$$

$$\bar{N}^{(T)} = \delta t \sum_{mn} \frac{1}{\tau_{off_n}^m}, \quad (18)$$

где  $J$  — поток атомов из газовой фазы на растущую поверхность,  $N_{cr}$  — полное число атомов поверхности подложки,  $\tau_{off_n}^m$  — время отрыва атома от излома  $m, n$ .

Вычисление фигурирующих в (17) под знаком усреднения средних должно в первом сомножителе производиться с учетом парных корреляций между приходом атома из газовой фазы на террасу и встраиванием его в излом, а во втором сомножителе — с учетом корреляции между отрывом атома из излома и встраиванием атома в излом.

Гауссова аппроксимация функционала (17), полученная при разложении до второго порядка экспонент под знаком усреднения, имеет вид (4), причем

$$\frac{1}{a} B_n^m = f_n^{(1)m}(\{y(t_0)\}) - f_n^{(2)m}(\{y(t_0)\}), \quad (19)$$

$$\frac{1}{a^2} \mathcal{H}_{nn'}^{mm'} = \left( f_n^{(1)m}(\{y(t_0)\}) + f_n^{(2)m}(\{y(t_0)\}) \right) \delta_{mm'} \delta_{nn'} + \\ + \sum_{m_1 n_1} \sum_{m_2 n_2} \frac{P^{(T)}(m_1, n_1; m_2, n_2 | \{y(t_0)\})}{\tau_{off_{n_2}}^{m_2}} (2\delta_{mm_1} \delta_{nn_1} \delta_{mm'} \delta_{nn'} - \\ - \delta_{mm_1} \delta_{nn_1} \delta_{m_2 m'} \delta_{n_2 n'} - \delta_{mm_2} \delta_{nn_2} \delta_{m_1 m'} \delta_{n_1 n'}), \quad (20)$$

$$f_n^{(1)m} = J a^2 \sum_{j=1}^{N_{cr}} P^{(\varepsilon)}(m, n; r_j | \{y(t_0)\}), \quad (21)$$

$$f_n^{(2)m} = \frac{1}{\tau_{off_n}^m} - \sum_{m'n'} \frac{P^{(T)}(m, n; m', n' | \{y(t_0)\})}{\tau_{off_n}^{m'n'}}, \quad (22)$$

где  $P^{(\varepsilon)}(m, n; r_j | \{y(t_0)\})$  — вероятность встраивания атома в излом  $m, n$  при условии, что он перешел из газовой фазы в точку  $r_j$ ;  $P^{(T)}(m, n; m', n' | \{y \times (t_0)\})$  — вероятность встраивания атома, оторвавшегося от излома  $m', n'$ , в излом  $m, n$ . Эти вероятности вычисляются при конфигурации  $\{y(t_0)\}$ , определяющей потенциальный рельеф поверхности для диффузии атома. При суммировании по диффузионным траекториям должны быть исключены траектории, проходящие через изломы. При вычислении  $P^{(\varepsilon)}, P^{(T)}$  в континуальном приближении от  $\{y(t_0)\}$  зависят граничные условия, а сами вероятности выражаются через функции Грина соответствующих диффузионных уравнений (см., например, [2]).

Выражения (21)–(22) соответствуют потоку атомов на излом и потоку атомов с излома соответственно, поэтому первое слагаемое в (20) соответствует генерационно-рекомбинационному шуму. Второе слагаемое в (20) определяется обменом атомами между изломами и соответствует тепловому шуму.

Время роста одного монослоя  $\tau_s$  есть

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{a^4}{lL} (J - J_0) \sum_{j=1}^{N_{cr}} P^{(\varepsilon)}(0, 0; r_j | \{y^{(0)}(t_0)\}), \quad (23)$$

где  $P^{(\varepsilon)}$  можно вычислять при неподвижной системе периодически расположенных изломов, пренебрегая в силу (2) конвективными потоками. Равновесный поток атомов из газовой фазы на поверхность  $J_0$  описывается формулой

$$J_0 = \frac{1}{a^2 \tau_{off}} \frac{1 - \sum_{m'n'} \frac{P^{(T)}(0, 0; m', n' | \{y(t_0)\})}{N_{cr}}}{\sum_{j=1} P^{(\varepsilon)}(0, 0; r_j | \{y^{(0)}(t_0)\})}. \quad (24)$$

В случае термодинамического равновесия ( $J = J_0$ ) с газовой фазой корреляции в расположении изломов могут быть только термодинамическими [2], связанными с увеличением энергии при отклонении изломов от их периодического расположения. Легко убедиться, что в этом случае коррелятор (14), вычисленный с использованием (10)–(11), (19)–(24), действительно соответствует термодинамическому равновесию. Действительно, вариация времени выброса атома из излома в соответствии с его активационной зависимостью есть

$$\delta \left( \frac{1}{\tau_{off_m}^n} \right) = \frac{1}{\tau_{off}} \frac{a}{T} \sum_{m_1 n_1}' \frac{\partial^2 V}{\partial y_{m_1}^{n_1} \partial y_m^n} (\zeta_{m_1}^{n_1} - \zeta_m^n), \quad (25)$$

где  $\tau_{off}$  — время отрыва атома из излома при их периодическом расположении,  $T$  — температура в энергетических единицах,  $V$  — энергия системы изломов,

штрих над знаком суммирования включает в себя слагаемое с  $m_1 = m$ ,  $n_1 = n$ . Подставив (25) в (19), (22), (10) и (24) в (20), из (14) получим

$$\mathcal{R}_n^m(0) = 2T \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{dq_x dq_y}{\pi^2} \frac{1 - \cos(q_x m + q_y n)}{V_2(q_x, q_y) - V_2(0, 0)},$$

$$V_2(q_x, q_y) = \sum_{mn}' \frac{\partial^2 V}{\partial y_0^0 \partial y_m^m} \exp(iq_x m + iq_y n). \quad (26)$$

Таким образом, используемая здесь процедура дает хорошо известное выражение для коррелятора в случае термодинамического равновесия [4]. Такие случайные силы были использованы в работе [5], которая нам стала известна в процессе подготовки статьи к печати. Это выражение, однако, не вполне корректно для неравновесной системы. Проведенный здесь анализ показывает, что в этом случае дополнительно к термодинамическим случайным силам надо учитывать рекомбинационный шум, возрастающий с увеличением скорости роста кристалла. При значительных пересыщениях этот шум становится основным.

### 3. Коррелятор флуктуаций положения изломов

Приведенные выше рассуждения не зависят от выбора модели потенциального рельефа для диффузии атома по террасе. Ниже будут приведены результаты для модели роста кристаллов, сформулированной в [2].

В этой работе были следующие предположения о росте вицинальной поверхности. Атом диффундирует по террасе до ступени, после чего диффундирует вдоль нее квазиодномерным образом, причем эффективная длина такой диффузии  $l_1$  много больше постоянной решетки кристалла. При диффузии вдоль ступени атом может встроиться только в один излом (см. рисунок). Такая асимметрия обеспечивала устойчивость системы по отношению к флуктуациям с  $q_y \neq 0$ ,  $q_x = 0$ . Учитывалось также наличие дополнительного активационного барьера  $\varphi_{br}$  для перехода атома на ступень сверху, <sup>4</sup> обеспечивающего стабильность системы по отношению к флуктуациям  $q_x \neq 0$ ,  $q_y = 0$ . Энергетическим взаимодействием изломов пренебрегалось. <sup>5</sup>

С функцией Грина  $G$  стационарного диффузионного уравнения (граничные условия приведены [2]) вероятности  $P^{(T)}$  и  $P^{(E)}$  связаны как

$$P^{(E)}(m, n; r_j | \{y(t)\}) = \frac{a^2}{\tau} G(\Gamma_{\text{kin}k_n}^m + ae_y; r_j | \{y(t)\}),$$

$$P^{(T)}(m, n; m', n' | \{y(t)\}) = \frac{a^2}{\tau} G(\Gamma_{\text{kin}k_n}^m + ae_y; \Gamma_{\text{kin}k_{n'}}^{m'} + ae_y | \{y(t)\}), \quad (27)$$

<sup>4</sup> Утверждение о существовании такого барьера высказывалось также в [6].

<sup>5</sup> Оценки, сделанные в [2], показывают, что взаимодействие изломов через упругие поля эффективно для актуальных температур роста на масштабе 3—4 постоянных решетки кристалла.



где учитывалось, что атом может встроиться в излом  $m$ ,  $n$  только с точки ступени с координатами  $\mathbf{r}_{\text{kink}_n}^m + a\mathbf{e}_y$ , причем время  $\tau$  — время прыжка атома в излом из этой точки. Только в эту точку возможен и выброс атома с излома.

Задача о декременте затухания флуктуации была решена в [2] для случая

$$l \ll L \ll L_D, \quad (28)$$

где  $L_D$  — диффузионная длина для диффузии атома по террасе. Чтобы избежать излишней громоздкости формул, ограничимся результатами для одновременного коррелятора  $R_n^m \equiv \mathcal{R}_n^m(0)$  в случае

$$\exp\left(\frac{\varphi_{\text{br}}}{T}\right) \gg \frac{L}{a}, \quad (29a)$$

$$l_1 \gg l \ln\left(\frac{l}{a}\right), \quad (29b)$$

который достигается при достаточно низких температурах роста. Выполнение условия (29a) позволяет не учитывать переходы со ступени на террасу сверху, а условие (29b) позволяет считать, что атом, попавший на ступень, обязательно достигнет излома. Как было показано в [2], при выполнении (29) система стабильна, если

$$\eta \equiv \frac{La}{l^2} < 1. \quad (30)$$

Дальнейшие результаты справедливы при

$$\eta \ll 1. \quad (31)$$

Коррелятор удобно представить в виде

$$R_n^m = l^2 \left[ \left(1 + \frac{2}{\alpha}\right) R_n^{(1)m} + \frac{1}{\alpha} R_n^{(2)m} \right], \quad (32)$$

где  $\alpha \equiv (J - J_0)/J_0$  — относительное пересыщение газовой фазы, при котором ведется рост ( $J_0$  — равновесный поток, определенный в (24)). Первое слагаемое в (32) связано с генерационно-рекомбинационным шумом и имеет асимптотики

$$R_n^{(1)m} = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \left(\frac{\eta}{1-\eta}\right)^{1/2} \left(\Psi\left(|m| + \frac{1}{2}\right) + C + 2 \ln 2\right) + \delta_{m0} \frac{a}{l} |n|, & |n| \ll L/l, \\ \frac{1}{\pi} \left(\frac{\eta}{1-\eta}\right)^{1/2} \left(\Psi\left(|m| + \frac{1}{2}\right) + C + 2 \ln 2\right) + \delta_{m0} \frac{a}{l} (1+\eta) |n|, & L/l \ll |n| \ll \sqrt{\frac{L}{a}(1-\eta)}, \\ \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\eta}{1-\eta}\right)^{1/2} \ln\left(16e^{2C} \left(m^2 + \frac{a}{L(1-\eta)} n^2\right)\right), & |n| \gg \sqrt{\frac{L}{a}(1-\eta)}, \end{cases} \quad (33)$$

где  $\Psi$  — пси-функция,  $C \approx 0.577$  — постоянная Эйлера. Сохранение членов более высокого порядка по  $\eta$  в первых слагаемых корректно, поскольку эти выражения точны при  $|m| \gg 1$  независимо от выполнения (31).

При больших расстояниях между изломами корреляционная функция возрастает логарифмически, что типично для двумерного кристалла. Поскольку первое слагаемое в (32) связано с генерационно-рекомбинационным шумом, оно не исчезает с увеличением скорости роста, так как увеличение декремента затухания  $\lambda/\tau_s$  компенсируется ростом рекомбинационного шума. Таким образом, (33) соответствует теоретическому пределу качества решетки изломов. Можно показать, что если (29) не выполняется, то дисперсия флуктуаций превышает (33). Следовательно, (33) является теоретическим пределом флуктуаций решетки изломов с заданными  $l, L$  при оптимизации процесса роста как по температуре, так и по скорости роста.

Второе слагаемое в (32), связанное с тепловым шумом, уменьшается с ростом пересыщения, поскольку тепловые случайные силы не зависят от скорости роста. Для  $R_n^{(2)m}$  расчет дает

$$R_n^{(2)m} = \frac{4}{\pi} \frac{L_D^2}{L^2} \frac{a}{l} \left[ \ln \frac{l}{a} \frac{e^C}{2} + \ln \left[ \frac{16e^C}{\pi} \frac{L}{l} \left( \delta_{m0} \left( \text{th} \left( \frac{\pi l}{4L} |n| \right) - 1 \right) + 1 \right) \right] \right], \quad n \neq 0. \quad (34)$$

Первое слагаемое в (34) обусловлено обменом атомами между ближайшими изломами на ступени ( $\ln(l/a)$  — число соответствующих диффузионных траекторий), второе же слагаемое обусловлено обменом между более далекими изломами. Поскольку обмен между далеко отстоящими изломами неэффективен (атом с подавляющей вероятностью встроится в более близкий излом),  $R_n^{(2)m}$  на больших расстояниях насыщается. Таким образом, крупномасштабные флуктуации всегда обусловлены генерационно-рекомбинационным шумом.

Область применимости развиваемой здесь теории совпадает с областью применимости теории возмущений и есть

$$\alpha \gg \frac{4}{\pi} \frac{L_D^2}{L^2} \frac{a}{l} \ln \frac{l}{a} \frac{e^C}{2}. \quad (35)$$

Пересыщение имеет смысл увеличивать до величины порядка

$$\alpha_* = \frac{4}{\pi} \frac{L_D^2}{L^2} \ln \frac{l}{a} \frac{e^C}{2}. \quad (36)$$

При больших пересыщениях флуктуации определяются рекомбинационным шумом, и дальнейшее увеличение пересыщения не приводит к их уменьшению.

Итак, в этой и предыдущей [2] работах проведен достаточно полный анализ роста вицинальной поверхности за счет движения решетки изломов — «kink flow». Показано, что стабильность такой решетки обусловлена в основном кинетическими механизмами [2], а ее флуктуации уменьшаются с увеличением скорости роста. Получены нижний теоретический предел для дисперсии таких флуктуаций и оценка для пересыщения, при котором можно его достичь.

Автор признателен Р. А. Сурису, инициировавшему эту работу.

Список литературы

- [1] Neave J. H., Dobson P. J., Joyce P. A. et al. // *Appl. Phys. Lett.* 1985. V. 47. P. 100.
- [2] Алейнер И. Л., Сурис Р. А. // *ФТТ.* 1992. Т. 34. № 5. С. 1532—1550.
- [3] Фейнман Р., Хибс А. *Квантовая механика и интегралы по траекториям.* М.: Мир, 1968. 382 с.
- [4] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Статистическая физика. Ч. 1.* М.: Наука, 1976. 584 с.
- [5] Uwaha M., Saito Y. // *Phys. Rev. Lett.* 1992. V. 68. P. 224.
- [6] Tokura Y., Saito H., Fukui T. // *J. Crystal Growth.* 1989. V. 94. P. 46.

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

Поступило в Редакцию  
18 сентября 1992 г.

